

5. Boltzmann-Gleichung

Ziel: Beschreibung von Ladungstransport im Halbleiter

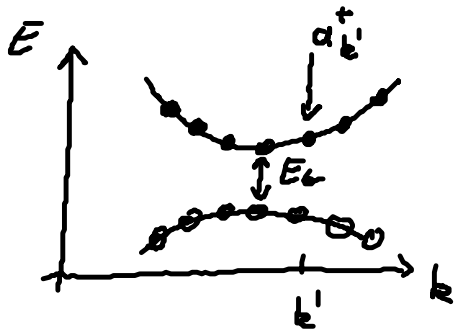
- die Verteilung von Elektronen im Halbleiter $f(r, \underline{k}, t)$
(Wahrscheinlichkeit ein Elektron am Ort r mit Quasimpuls \underline{k} zu finden) soll beschrieben werden im Nichtgleichgewicht durch dyn. Transportgleichung
- zu berücksichtigen sind:
 - Einflüsse äußerer Felder
 - Stöße der Elektronen untereinander

5.1. Beschreibung des Halbleiter als Vielteilchensystem

5.1.1. Skizze der Quantisierung des Schrödinger Wellenfeldes

- Erzeuger + Vernichter Operatoren für Elektronen im N -Teilchen Fock-Raum
- Symmetrie eigen-schaffen (anti-symm.) durch Vertauschungsrelationen erfüllt $\{a_k^\dagger, a_k\} = 1$
↑
Erzeugt Elektron mit Quantenzahl k

- Aus Periodizität des Gitters folgt das Bänderchema \rightarrow Festkörperphysik Bloch Theorem



Leitungsband $E_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

Bandlücke

Valenzband $E_v(k) = -E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$

- Elektronen - Loch Bild:

Def.: Defektelctron (Loch) Erzeuger: $d_k^+ = a_{vk}$

$$d_k = a_{vk}^+$$



Quantenzahl die Bänder kennzeichnet

Bemerkung: Aus Symmetrieeigenschaften

des Viel-Elektronensystems folgt: Loch hat pos. Ladung
pos. Masse

Hamilton Operator für Elektronensystem

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{freier Hamilt.}} + \underbrace{\hat{H}_{opt}}_{\text{WW mit Licht}} + \underbrace{H_{ee} + H_{ii}}_{\text{e-e Stöße durch Coulomb WW}}$$

Stöße über Bandlücke

e-e Stöße durch Coulomb WW

$$a_k \cong a_{Lk}$$

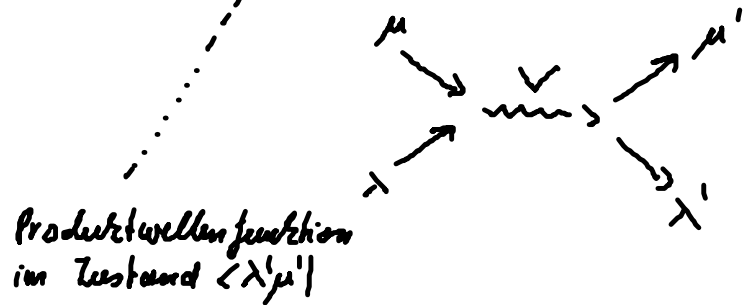
mit Erhaltung der Loch und Elektronenzahl

$$H_0 = \sum_k E_c(k) a_k^\dagger a_k + \sum_k E_v(k) d_k^\dagger d_k$$

kin. Energie der Elektronen
+ Löcher

Wechselwirkung durch Coulombs WW

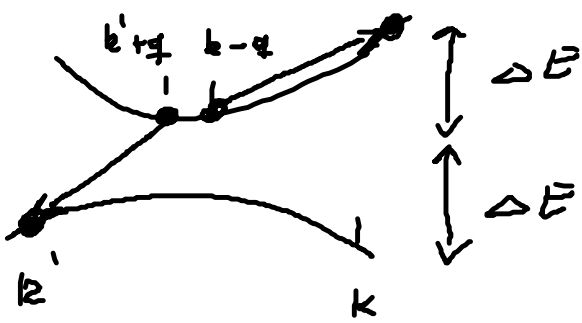
Zwei Teilchen Hamiltonian: $H_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \langle \lambda'\mu' | V_{12} | \lambda\mu \rangle a_{\lambda'}^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_\mu a_\lambda$



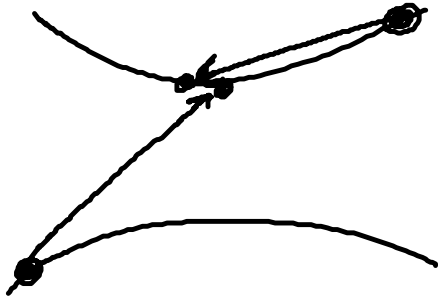
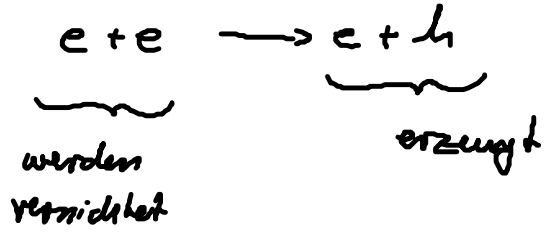
$$H_{ce} = \sum_{kk'q} V(q) \left\{ \underbrace{\frac{1}{2} a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{k'+q} a_{k-q}}_{e-e \text{ Streuung}} + \underbrace{\frac{1}{2} d_k^\dagger d_{k'}^\dagger d_{k'+q} d_{k-q}}_{h-h \text{ Streuung}} \right. \\ \left. - a_k^\dagger d_{k'}^\dagger d_{k'+q} a_{k-q} \right\}_{c-h \text{ Streuung}}$$

q sichert Impulserhaltung
 $V(q)$ Coulombs Matrixelement

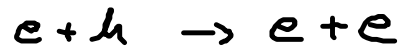
Stoßionisation bzw. Auger Streuung (keine Teilchenzahlerhaltung
in den Bändern)



e-Auger Rekombination



Stoßionisation



$$\hat{H}_{ii} = \sum_{kk'q} M_q^e a_{k+q}^\dagger a_{k'-q}^\dagger d_{-k'}^\dagger a_k + \sum_{kk'q} M_{-q}^{e*} a_{k'+q}^\dagger d_{-(k'-q)} a_{k'}^\dagger a_k$$

Stoßionisation

e-Auger Rekomb.

WW mit Licht

$$\hat{H}_{opt} = \sum_k \left\{ \mu_k E^+(t) a_k^\dagger d_{-k}^\dagger + \mu_k^* E^-(t) d_{-k} a_k \right\}$$



(entspricht \downarrow Lichtmode
 $H_{AF} = \lambda g (\sigma^+ c + c^\dagger \sigma)$
 bei WW Atom + Lichtmode)

5.1.2. Dynamische Gleichungen für Verteilungsfunktion f

- für Atom hatten wir Dynamik der reduzierte Dichtematrix

$$\hat{S}^A = \text{tr}_R S_{SR} \text{ betrachtet } \rightarrow 2 \times 2 \text{ Matrix}$$

Mittelwerte: $\langle \hat{S}_{aa} \rangle$ Besetzungswahrsch.
 $\langle \hat{S}_{ab} \rangle$ Übergangswahrsch.

Jetzt : Vielteilchensystem

also \hat{S}^S ist $(2N \times 2N)$ Matrix (2 Bänder)

wichtig sind zunächst nicht alle Einträge sondern

① Besetzungswahrscheinlichkeit $\langle a_k^\dagger a_k \rangle = f^e(k)$

$f^e(k)$ ist W. ein Elektron bei k zu finden

- im reinen Zustand $f^e(k) = 0$ oder 1
- im gemischten Zustand $f^e(k) \in (0, 1)$
- im Gleichgewicht diese WW ist $f^e(k)$ die Fermifunktion

② mikroskopische Interbandpolarisation

$$\rho(k, t) = \langle a_k^\dagger a_k \rangle \quad \hat{=} \langle \sigma^- \rangle \text{ beim Atom}$$

$$p^*(k, \epsilon) = \langle a_k^+ d_k^+ \rangle$$

• Übergangswahrscheinlichkeit
im Zustand k für \downarrow

$N=3$

$$\begin{pmatrix} f^e(1) & - & - & p(1) & - & - \\ - & f^e(2) & & & p(2) & - \\ - & & f^e(3) & & & p(3) \\ p^*(1) & & & f^h(1) & & \\ - & p^*(2) & & & f^h(2) & \\ - & - & p^*(3) & - & - & f^h(3) \end{pmatrix} = \langle \hat{S}^z \rangle$$

Zeitentwicklung von f^e, f^h, p, p^* ist gegeben durch

Heisenberg - Gl. der Erwartungswerte

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle \quad (\text{bildunabhängig})$$

• Berechnung der Kommutatoren:

es gelten die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} a_{\nu k}^+ a_{\nu k} &= d_k d_k^+ \\ &= 1 - d_k^+ d_k \end{aligned}$$

$$\{a_k^+, a_k\} = 1$$

$$\{a_k, d_{k'}\} = 0$$

$$\{a_k, d_k^+\} = 0$$

$$\boxed{j^e}$$

$$[H_0, a_k^+ a_k] = 0$$

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k$$

$$[H_{\text{opt}}, a_e^\dagger a_e] = -\mu E \left(\underbrace{a_k^\dagger d_k^\dagger}_{\text{gem. von Ladungsträgern}} - \underbrace{d_k a_k}_{\text{Rekomb.}} \right)$$

\dot{P}

$$\langle [H_{\text{opt}}, d_e a_e] \rangle = \mu E \left(\underbrace{f_e(k) + f_h(k) - 1}_{\text{Inversion } f_e^L - \underbrace{(1-f_h)}_{f_e^V}} \right)$$

Polarisation getrieben
durch Lichtquelle

$$\langle [H_0, d_e a_e] \rangle = \langle -\hbar \omega_p(l) d_e a_e \rangle$$

freie Oszillation der
Polarisation

$$\omega_p(l) = \frac{1}{\hbar} (E_k(l) - E_v(l))$$

Übergangsfrequenz

→ Dynamik ohne Stöße

Halbleiter Bloch Gleichungen

$$\dot{f}_e(k,t) = \frac{1}{i\hbar} \underline{\mu} \underline{E} (p^*(k,t) - p(k,t))$$

$$\dot{p}(k,t) = \frac{1}{i} \omega_p(k) p(k,t) + \frac{1}{i\hbar} \underline{\mu} \underline{E} (1 - f_e - f_h)$$

$$\dot{f}_e = \dot{f}_h$$

Lösungen sind ungedämpft
Resonanz-Oszillationen.

(2) Dynamik mit Stoßtermen H_{ii}

$$\langle [H_{ii}, a_e^\dagger a_e] \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial t} f^e(l) \right|_{H_{ii}} \approx \frac{1}{T_1} f^e(l)$$

Rotationsgleichungs
Näherung
 T_1 : Lebensdauer bezgl.
Stöße

$$\langle [H_{ii}, d_e a_e] \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial t} p(l) \right|_{H_{ii}} \approx \frac{1}{T_2} p(l)$$

T_2 : Lebensdauer der
Polarisation

Problem: Berechnung der Kommutatoren bleiben Terme mit 4 Erz/Kon. Operatoren übrig (in OGL stehen)

$$\text{z.B. } y_{e1} = \langle a_{k+q}^{\dagger} a_{k-q}^{\dagger} a_{-k}^{\dagger} a_k \rangle$$

→ neue OGL für y_{e1}

→ 6'er Op in OGL für y_{e1}

→ neue OGL
.....

Unendliche Hierarchie an Mittelwertgleichungen

Lösung: Abbruch nötig

Beiträge 1. Ordnung:

Faktorisierung der 4'er Mittelwerte
in Produkte von 2'er Mittelwerte (Hartree - Fock-
Näherung)

$$y_{e1} \approx \delta_{q,0} \langle a_k^{\dagger} a_k \rangle \langle a_k^{\dagger} a_{-k}^{\dagger} \rangle - \delta_{k+q,k'} \langle a_k^{\dagger} a_k \rangle \langle a_{k'}^{\dagger} a_{-k}^{\dagger} \rangle$$

$$\approx -\delta_{k+q,k'} f_e(k) p^*(k')$$