

English Summary:

4.3 Semiconductor Bloch equations

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{opt} = \sum_{\mathbf{k}} E_c(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} E_v(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \mu \cdot \mathbf{E}(t) (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} + d_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}})$$

$$\frac{d}{dt} f_e(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i} \Omega_p (p^*(\mathbf{k}, t) - p(\mathbf{k}, t)) = \frac{d}{dt} f_h(\mathbf{k}, t)$$

$$\frac{d}{dt} p(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i} \omega_p(\mathbf{k}) p(\mathbf{k}, t) + \frac{1}{i} \Omega_p (1 - f_e - f_h)$$

-inversion

distr. fct. of el. $f_e(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle$

" " of holes $f_h(\mathbf{k}) = \langle d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \rangle$

micro-polarization $p(\mathbf{k}) = \langle d_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle$

$p^*(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$

optical transition frequ. $\omega_p = \frac{1}{\hbar} (E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}))$

Rabi frequ. $\Omega_p = \frac{\mu \cdot \mathbf{E}}{\hbar}$, μ el. dipole moment

(ii) Berücksichtigung von $\hat{H}_{ee} = \hat{H}_{E1-E1} + \hat{H}_{D-D} + \hat{H}_{E1-D}$

$$[\hat{H}_{E1-E1}, a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}}] = \dots = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{V(\mathbf{q})}{z} \left\{ -a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\}$$

$\langle [\hat{H}_{E1-E1}, a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}}] \rangle$ enthält 2-Teilchen-Korrelationen $y^{ee} = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{r}} \rangle$
(e-e-Streuamplituden)

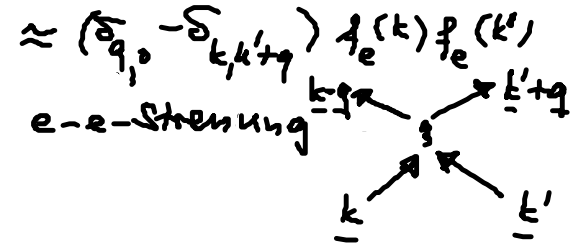
Problem: Zeitentwicklung von y^{ee} müsste durch zusätzl. Gln. beschrieben werden

⇒ Ankopplung an noch höhere Korrelationsterme

⇒ unendl. Hierarchie von Gln. für n-Teilchen-Korrelationen

⇒ Abbruch

$$\text{z.B. } y^{ee} = \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle \approx \delta_{\mathbf{q},0} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle$$



⇒ gl. System schließt.

4.4. Gleichgewichtstatistik: Das ideale Fermigas

bisher: Nichtgleichgewichtszustände
 zeitents. des statist. Op. $\hat{\rho}$ durch
 Liouville- von Neumann-Gl.

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

jetzt: thermodyn. Gleichgewicht (zeitunabh.)
 geg. durch Jaynes'sches Prinzip der
 vorurteilfreien Schätzung:

Minimum der Shannon-Information

$I(\hat{\rho}) = \text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$ unter Nebenbed.

$\text{tr} \hat{\rho} = 1$ (Normierung)	⇒ λ	} Lagrange- Par.
$\text{tr}(\hat{\rho} \hat{M}^\nu) = \langle M^\nu \rangle$ (Makroobs.)	⇒ λ_ν	

⇒ $\hat{\rho} = e^{\lambda - \lambda_\nu \hat{M}^\nu} = Z^{-1} e^{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu}$
 (Zustandssumme $Z \equiv e^{-\lambda} = \text{tr} e^{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu}$)

z.B. kanon. statist. Op. $\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}$ $\beta = \frac{1}{kT}$
 großkanon. statist. Op. $\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$ μ chem. Pot.

Ideales Gas (WW-freie, identische Fermionen):

$\hat{H} = \sum_k E_k a_k^\dagger a_k = \sum_k E_k \hat{N}_k$ $N_k = 0, 1$ Besetzungszahl
 ↳ Einteilchenenergie

Wahrscheinl., das System im Vielteilchenzust. $|\alpha\rangle$ zu finden:

$P_\alpha = \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle = Z^{-1} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^L (E_j - \mu) N_j \right\}$

großkanon. Zustandssumme

$$\Xi = \sum_{N_1 \dots N_\ell} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^{\ell} (E_j - \mu) N_j \right\}$$

$$= \prod_{j=1}^{\ell} \left[\sum_{N_j} \exp \{ -\beta (E_j - \mu) N_j \} \right]$$

Fermionen

$$= \prod_{j=1}^{\ell} \left[\sum_{N_j=0}^1 t_j^{N_j} \right] \quad \text{mit } t_j := \exp \beta (\mu - E_j)$$

$$= \prod_{j=1}^{\ell} [1 + t_j] = \prod_{j=1}^{\ell} \Xi_j$$

$$\Rightarrow P(N_1 \dots N_\ell) = \prod_{j=1}^{\ell} \frac{t_j^{N_j}}{1 + t_j} = \prod_{j=1}^{\ell} p(N_j) \quad \text{separiert}$$

W., das System mit der Besetzung N_1, N_2, \dots zu finden

Mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchen-Zustand E_j :

Aus $p(N_j) = \exp(\varphi_j - \beta E_j - \alpha N_j)$

$\alpha = -\beta \mu$

$\varphi_j = -\ln \Xi_j = -\ln(1 + t_j)$

$$\langle N_j \rangle = \frac{\partial \varphi_j}{\partial \alpha} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_j = \frac{t_j}{1 + t_j} = \frac{1}{t_j^{-1} + 1}$$

$$\langle N_j \rangle = \frac{1}{\exp \left[\frac{E_j - \mu}{kT} \right] + 1}$$

Fermi-Verteilung

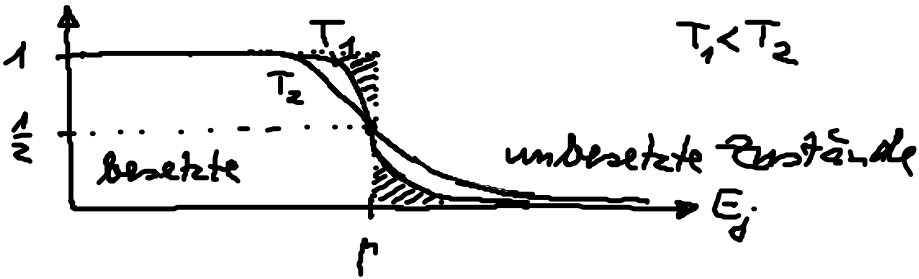
(folgt auch explizit aus $\langle N_j \rangle = \sum_{N_j=0}^1 \sum_{N_2=0}^1 \dots \left\{ N_j \frac{t_j^{N_1}}{1+t_j} \dots \frac{t_j^{N_i}}{1+t_j} \dots \right\}$)

$$= \sum_{N_j=0}^1 N_j \frac{t_j^{N_j}}{1+t_j} = \frac{0 + 1 \cdot t_j}{1+t_j}$$

oder speziell wegen $N_j = 0, 1$ aus $\langle N_j \rangle = p(N_j=1) = \frac{t_j}{1+t_j}$

gilt nicht für Bose!

$\langle N_j \rangle$



$T \rightarrow 0$: $\langle N_j \rangle \rightarrow \Theta(\mu - E_j)$ Stufenfkt.
(Quantendimer)

$T > 0$: „Aufweichungszone“ bei $E_j = \mu$ der Breite $\approx kT$

$$E_j - \mu \gg kT \text{ (hohe Energie)} : \langle N_j \rangle \approx \exp\left[-\frac{E_j - \mu}{kT}\right]$$

klass. Grenzfall

(Maxwell-Boltzmann-Verteil.)

gesamte mittlere Teilchenzahl $\bar{N} = \sum_{j=1}^l \langle N_j \rangle$

Anwendung auf Halbleiter : $\mu = E_F$ Fermi-Niveau

Bestimmung des Fermi-Niveaus aus der Ladungsneutralität, z.B. $n = p$ (intrinsisch) $\Rightarrow E_F$
(\ominus -dichte = Lochdichte)

Verallgemeinerung auf Quasi-Gleichgewicht

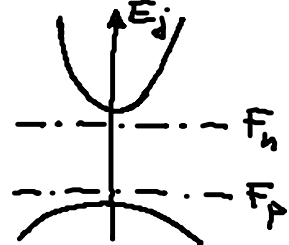
(d.h. Elektronen im Leitungsband untereinander im thermodyn. Gleichgewicht, aber nicht mit den Löchern im Valenzband u. ggf. weiteren Ladungsträger-Ensembles)

\Rightarrow quasi-Fermi-Niveaus der Elektronen F_n
quasi-Fermi-Niveaus der Löcher F_p

$$F_n \neq F_p$$

$$F_n \text{ bestimmt durch } n : n = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^l \frac{1}{\exp\left(\frac{E_j - F_n}{kT}\right) + 1}$$

$$F_p \text{ bestimmt durch } p : p = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^l \frac{1}{\exp\left(\frac{F_p - E_j}{kT}\right) + 1}$$



Thermische Zustandsgl.

$$pV = kT \ln \Xi = kT \sum_{j=1}^l \ln \Xi_j = kT \sum_{j=1}^l \ln [1 + \exp\beta(\mu - E_j)]$$

(Druck p)

Energie u. Zustandsdichte freier Teilchen

Energie-Eigenwerte $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ k Wellenvektor

System sei in Würfel $V = L^3$ eingeschlossen.

Zykl. Randbed. (Born-v. Karman):

$$\psi_j(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} \quad k_\alpha L = 2\pi n_\alpha, \quad n_\alpha = \pm 1, \pm 2, \dots$$

$(\alpha = 1, 2, 3)$

1 Zustand im k -Raum beansprucht das „Volumen“

$$(\Delta k)^3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (\text{ohne Spin!})$$

Im thermodyn. Limes (großes V):

Übergang zum Quasikontinuum $\sum_j \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k$

$$\boxed{\sum_j \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3 p} \quad \text{mit } \underline{p} = \hbar \underline{k}$$

Spin entartung (Spin $\hbar S$): $(2S+1)$ -fach

Kugelsymm. Integral:

$$\sum_j \rightarrow (2S+1) \frac{V}{h^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 dp$$