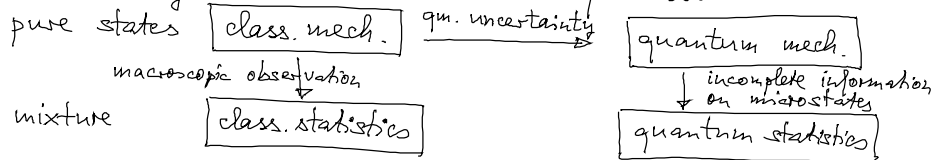


English Summary:

4. Quantum Statistics in Nonequilibrium

4.1 Density matrix - statistical operator



statistical op. $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i p_i \hat{\rho}_i$
 $\hat{\rho}_i = \text{projector on pure states}$

$$\langle \hat{M} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{M})$$

Liouville-von Neumann eq. $\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$

distribution fun. of electrons $f_e(k) = \langle a_k^\dagger a_k \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} a_k^\dagger a_k)$
 " " " holes $f_h(k) = \langle d_k^\dagger d_k \rangle$

4.2 Semiklass. Wechselwirkung mit Licht

- WW mit opt. Lichtfeld versucht Abweichung der Elektronenverteilung vom thermodyn. Gleichgewicht

\Rightarrow Ham. op. \hat{H}_{opt}

Dipolkopplung an elektr. Feld $\underline{E}(\underline{r}, t)$, z.B. Laserpuls (extern, klass. beschrieben)

$\hat{H}_{\text{opt}} = e \hat{\underline{r}} \cdot \underline{E}(\underline{r}, t)$ mit qm. el. Dipol-Op. $e \hat{\underline{r}}$
 (halbklass.: keine Feldquantisierung des Lichtes)

4.2.1 Polarisation des Halbleiters

qm. Dipoldichte (vgl. klass. el. Dipolmomentdichte)

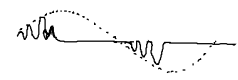
$\hat{\underline{P}}(\underline{r}, t) = e \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}, t) \underline{r} \hat{\psi}(\underline{r}, t)$ $\hat{\psi}^\dagger, \hat{\psi}$ sind Feldoperatoren

Erzeugungpop. $\hat{\psi}^\dagger(\underline{r}) := \sum_{\underline{n}} \hat{\psi}_{\underline{n}}^*(\underline{r}) a_{\underline{n}}^\dagger$

Vernichtungpop. $\hat{\psi}(\underline{r}) := \sum_{\underline{n}} \hat{\psi}_{\underline{n}}(\underline{r}) a_{\underline{n}}$ $\{\hat{\psi}(\underline{r}), \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}')\} = \delta(\underline{r} - \underline{r}')$

Def. makroskop. Polarisation \underline{P} als Erwartungswert des Dipoldichteop. $\hat{\underline{P}}$

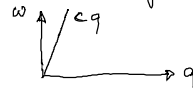
$\underline{P}(\underline{r}, t) = \langle \hat{\underline{P}} \rangle = \langle e \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}, t) \underline{r} \hat{\psi}(\underline{r}, t) \rangle$
 reelle Größe

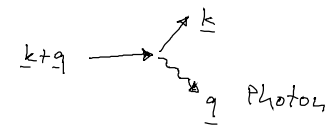
- Blochdarstellung $\hat{\psi}(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{n}, \underline{k}} a_{\underline{n}, \underline{k}} \psi_{\underline{n}, \underline{k}}(\underline{r}, t)$
- $\hat{\psi}(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{\underline{n}, \underline{k} \\ \underline{n}', \underline{k}'}} a_{\underline{n}, \underline{k}}^+ a_{\underline{n}', \underline{k}'} \psi_{\underline{n}, \underline{k}}^*(\underline{r}, t) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} \psi_{\underline{n}', \underline{k}'}(\underline{r}, t)$ ← Blochfkt. $e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} \psi_{\underline{n}, \underline{k}}(\underline{r}, t) \approx \psi_{\underline{n}, \underline{k}}(\underline{r} + \underline{R})$
- Fouriertrafo $\hat{\psi}(\underline{q}, t) = \int d^3 \underline{r} \hat{\psi}(\underline{r}, t) e^{-i \underline{q} \cdot \underline{r}}$ 
- Def.: el. Dipolmatrixelement $\mu_{\underline{n}, \underline{n}'}(\underline{k}) = \frac{1}{V_{\text{BZ}}} \int d^3 \underline{r} u_{\underline{n}, \underline{k}}(\underline{r}) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} u_{\underline{n}', \underline{k}'}^*(\underline{r})$
(oft auch mit $d_{\underline{n}, \underline{n}'}$ bezeichnet, $e < 0$)
- Näherung: schwache \underline{k} -Abhäng. des Blochfkt. mod. $u_{\underline{n}, \underline{k}}$

Erwartungswert im Fockraum:

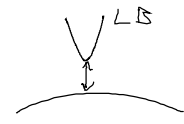
längere Rechnung $\Rightarrow \underline{P}(\underline{q}, t) = - \sum_{\underline{n}, \underline{n}'} \mu_{\underline{n}, \underline{n}'}(\underline{k}) \langle a_{\underline{n}, \underline{k}}^+ a_{\underline{n}', \underline{k} + \underline{q}} \rangle$

Näherung für opt. Grenzfall:

- (1) $\underline{q} \approx 0$ (Impuls des Photons klein gegen Quasiimpuls der Elektronen)
- 



- (2) Bandkantenoptik $\hbar \omega \approx E_g$ (Bandlücke) \Rightarrow nur Interbandübergänge (LS \leftrightarrow VB)

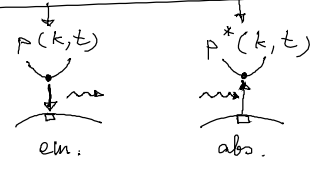


- (3) 2-Band-Modell $n = L, V$ und $\mu_{LV}(\underline{k}) \approx \mu_{LV}(0)$
konstantes Dipolmatrixelement

Elektron-Loch-Bild:

Interbandpolarisation (makr.)

$$\underline{P}^{\text{inter}}(\underline{q}, t) \approx \underline{P}(0, t) \equiv \underline{P}(t) = \sum_{\underline{k}} \mu (\langle d_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \rangle + \langle a_{\underline{k}}^+ d_{\underline{k}}^+ \rangle)$$



mikroskop. Interbandpolarisation

eines Zustandes \underline{k}

$$\begin{aligned} p(\underline{k}, t) &= \langle d_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \rangle \\ p^*(\underline{k}, t) &= \langle a_{\underline{k}}^+ d_{\underline{k}}^+ \rangle \end{aligned}$$

4.2.2 Elektron-Feld-WW-Op.

$$\hat{H}_{\text{opt}} = - \int d^3 \underline{r} \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}, t) e^{i \underline{r} \cdot \underline{E}(\underline{r}, t)} \hat{\psi}(\underline{r}, t)$$

Fouriertrafo $\underline{E}(\underline{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{q}} e^{i \underline{q} \cdot \underline{r}} \underline{E}(\underline{q}, t)$

$$\Rightarrow \hat{H}_{\text{opt}} = \frac{1}{V} \sum_{\substack{\underline{k} \\ n, n'}} \underline{E}(\underline{q}, t) a_{n\underline{k}}^{\dagger} a_{n'\underline{k}+\underline{q}} \mu_{nn'}(\underline{k})$$

Bandkantenoptik wie in §4.2.1:

$$\hat{H}_{\text{opt}} = \sum_{\underline{k}} \mu \cdot \underline{E}(t) (a_{\underline{k}}^{\dagger} d_{\underline{k}}^{\dagger} + d_{\underline{k}} a_{\underline{k}})$$

4.2.3 Halbleiter-Bloch-Gleichungen

• Zeitentwicklung folgender Größen:

Verteilungsfkt. $f_e(\underline{k}, t) = \langle a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} \rangle$

$f_h(\underline{k}, t) = \langle d_{\underline{k}}^{\dagger} d_{\underline{k}} \rangle$

mikr. Polarisation $p(\underline{k}, t) = \langle d_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \rangle$

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

• Ansatz: Bewegungsgl. für Erwartungswerte
(Fundamentalrelation der Gutzwiller-Theorie)

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

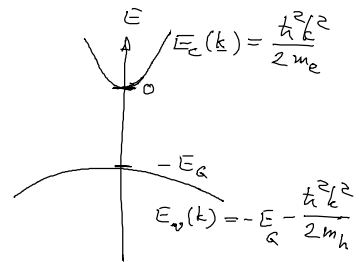
Berechne Kommutatoren ① $[H, a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}}]$

② $[H, a_{\underline{k}}^{\dagger} d_{\underline{k}}^{\dagger}]$

Ham. op. $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{opt}}$

Elektron-Loch-Bild

$$\hat{H}_0 = \sum_{\underline{k}} E_c(\underline{k}) a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} - \sum_{\underline{k}} E_v(\underline{k}) d_{\underline{k}}^{\dagger} d_{\underline{k}}$$



Beiträge zum Kommutator ①

$$[\hat{H}_0, a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}}] = \sum_{\underline{k}} (E_c(\underline{k}) (a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} - a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} a_{\underline{k}})) - \sum_{\underline{k}} E_v(\underline{k}) (\dots)$$

$$= \sum_{\underline{k}} (E_c(\underline{k}) (-\cancel{a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} a_{\underline{k}}} + \cancel{a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}}}) + \underbrace{\delta_{\underline{k}\underline{k}} a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}} - \delta_{\underline{k}\underline{k}} a_{\underline{k}}^{\dagger} a_{\underline{k}}}) - \sum_{\underline{k}} E_v(\underline{k}) (\dots))$$

= 0

d.h. \hat{H}_0 liefert keine Zeitabh. von f_e und f_h

Weitere Kommutatoren s. VL WS 2015/16

$$\Rightarrow \langle [H_{\text{opt}}, a_2^\dagger a_2] \rangle = -\mu \cdot \mathbb{E} (p^*(k, t) - p(k, t)) = \frac{\hbar}{i} f_e$$

WW mit \hat{H}_{opt} führt zur Ankopplung an die Polarisation

$$\begin{aligned} \textcircled{2} \quad \frac{\partial}{\partial t} p(k, t) &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, d_k a_k] \rangle = \frac{i}{\hbar} \mu \cdot \mathbb{E} \underbrace{(f_e(k) + f_h(k) - 1)}_{\text{durch } H_{\text{opt}}} \\ &= \underbrace{-(1-f_e)(1-f_h) + f_e f_h}_{\substack{\uparrow \text{Absorption} \quad \downarrow \text{Em.}}} \\ &\quad \text{Inversion } f_e - (1-f_h) \end{aligned}$$

Polarisation getrieben durch klass. Lichtquelle

$$\begin{aligned} &\underbrace{-\frac{i}{\hbar} (E_c(l) - E_v(l)) \langle d_k a_k \rangle}_{\text{durch } H_0} \\ &\quad \omega_p(k) \text{ freie Oszill. der komplexen Polarisation} \\ &\quad \text{mit opt. Übergangsfrequenz } \omega_p(k) \end{aligned}$$

Halbleiter-Bloch-gln.:

$$\begin{aligned} (1) \quad \frac{\partial}{\partial t} f_e(k, t) &= \frac{1}{i} \Omega_p (p^*(k, t) - p(k, t)) \\ (2) \quad \frac{\partial}{\partial t} p(k, t) &= \frac{1}{i} \omega_p(k) p(k, t) - \frac{1}{i} \Omega_p \underbrace{(f_e + f_h - 1)}_{\text{Inversion}} \\ (3) \quad \frac{\partial}{\partial t} f_h(k, t) &= \frac{\partial}{\partial t} f_e(k, t) \end{aligned}$$

$$\text{Rabi-Frequenz } \Omega_p = \frac{\mu \cdot \mathbb{E}}{\hbar}$$

Bem.: Kohärente Dynamik eines Ensembles unabh. durch klass. Lichtquelle getriebener 2-Niveaus-Systeme (Opt. Bloch gln.)

Also: Ladungsträgergeneration als kohärenter 2-Stufen-Prozess (e-h-Paar)

