10.5.3. Das Einbandmodell: Kinetik, Boltzmanngleichung

bisher in Quantenkinetik keine Energieerhaltung beim Stoß

lange Beobachtungszeiten sollten Elektron und Phononen analog zu klassischen Teilchen stoßen: d.h. Energieerhaltung

$$\Delta E \cdot \underbrace{\Delta t}_{\text{Beobachtungszeit} \to \infty} \geq \hbar \quad \Rightarrow \Delta E \to 0 \Rightarrow \text{Energieerhaltungssatz}$$

Grenzfall sollte in der bisherigen Stoßgleichung existieren, jetzt suchen

$$\underbrace{\dot{\sigma}_k(t)}_{\substack{\text{Dynamik der} \\ \text{Besetzungszahl in } |k\rangle \\ (0,1)}} \cong \int_{-\infty}^{t} dt' \, \underbrace{\cos\{(\nu_{k+q} - \nu_k \pm \omega_q)(t-t')\}}_{\substack{\text{Gedächtnis und Energie-} \\ \text{unschärfe}}} \underbrace{g(t')}_{\sigma_k(t'),\, \sigma_{k+q}(t')}$$

ist die Struktur einer Quantenkinet. Gleichung

neue Integrationsvariable: $s = t - t'$, $\Delta\nu = \nu_{k+q} - \nu_k \pm \omega_q$

$$\hat{=} \int_0^{\infty} ds \, \cos(\Delta\nu_{qk} s) \, g(t-s) \quad , \text{ jetzt } t \to \infty$$

auf Skala der Frequenzoszillationen, Annahme $g(t-s) \approx g(t)$

(Skala t: lang gegen den eigentlichen Stoßvorgang)

$$\hat{=} \int^{\infty} ds \, \cos(\Delta\nu_{qk} s) \, g(t)$$

$$\frac{1}{2}\int_0^\infty ds\,\Big(\underbrace{e^{i\Delta\nu_{qk}s}+e^{-i\Delta\nu_{qk}s}}_{0}\Big)\underbrace{e^{-\gamma s}}$$

Konvergenz erzeugender Faktor
(Dämpfung höherer Korrelationen)
später $\gamma\to 0$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{e^{i\Delta\nu_{qk}s-\gamma s}}{i\Delta\nu_{qk}-\gamma}+c.c.\right)\Bigg|_0^\infty \qquad \hat{=}\ 2\ \text{Realteil}$$

$$=\frac{\gamma}{(\nu_{k+q}-\nu_k\pm\omega_q)^2+\gamma^2}\xrightarrow[\gamma\to 0]{}\pi\,\delta(\nu_{k+q}-\nu_k\pm\omega_q)$$

Die δ-Funktion beschreibt die Energieerhaltung beim Einzelstoß

Phononenergie ($\hbar\omega_q$) muß auf oder abgegeben werden vom Elektron
($\nu_{k+q}-\nu_q$)

⇓ klassische Boltzmanngleichung

$$\boxed{\dot{f}_k(t)=-\Gamma^k_{\text{aus}}(t)\,f_k(t)+\Gamma^k_{\text{ein}}(t)\,(1-f_k(t))}$$

(1) (2)

(1) Ausstreurate:

$$\Gamma^k_{\text{aus}}(t)=2\pi\sum_q|D_q|^2\Big\{\delta(\nu_{k+q}-\nu_k-\omega_q)\,n_q$$
$$+\delta(\nu_{k+q}-\nu_k+\omega_q)(n_q+1)\Big\}(1-f_{k+q}(t))$$

D_q in H ist ersetzt $\frac{D_q}{\hbar} \to D_q$

- Verlustrate der Besetzungszahl im Zustand $|k\rangle$
- Rate: $[\Gamma_{out}] = \frac{1}{s}$
- $|D_q|^2$: 2. Bornsche Näherung
- Markoffapproximation $\rightarrow$ Energieerhaltung durch δ-Funktionen

1. δ-Fkt: $\underbrace{\nu_k + \omega_q}_{\text{Phononabsorption}} = \underbrace{\nu_{k+q}}_{\text{neuer Elektronzustand}}$ $\left(\nu = \frac{\varepsilon}{\hbar} \text{ Elektronenergie}\right)$ stimuliert! $n_q \neq 0$

2. δ-Fkt: $\nu_k = \underbrace{\nu_{k+q} + \omega_q}_{\text{Phononemission}}$ stimuliert + spontan $(n_q + 1)$

auch für $T \to 0$, so $n_q \to 0$, aber $\Gamma_{out} \neq 0$ (spontane Prozesse)

$$② \quad \Gamma_{in}^{k}(t) = 2\pi \sum_q |D_q|^2 \Big\{ \delta(\nu_{k+q} - \nu_k - \omega_q)\,(1+n_q) + \delta(\nu_{k+q} - \varepsilon_k + \omega_q)\, n_q \Big\}\, \sigma_{k+q}(t)$$

1. δ Funktion: Phononenemission
2. δ-Fkt.: Phononabsorption

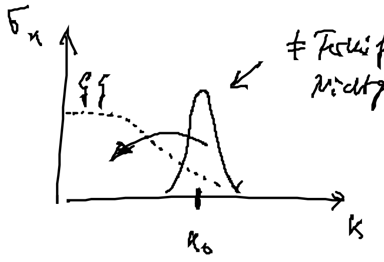
10.6. Ergebnisse numerischer Lösungen der Stoßgleichungen

- im Gleichgewicht ist $\dot{\sigma}_k(t) = 0 = \underbrace{-\Gamma_{out}\,\sigma_k + \Gamma_{in}\,(1-\sigma_k)}$

„detailed balance"

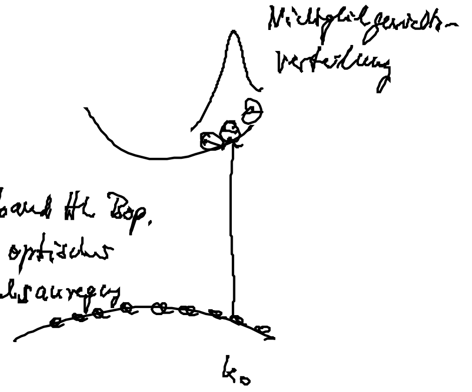
(Lösung sollte dann eine Fermifunktion sein)

- im Nichtgleichgewicht ist $\dot{\vec{\sigma}}_k \neq 0$



Bsp:

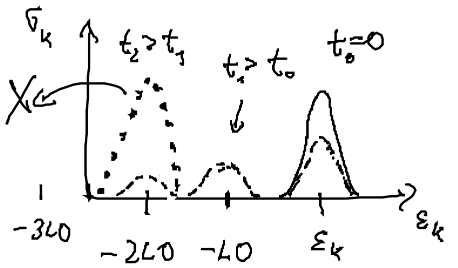
Zweiband HL Bsp.
mit optischer
Kurzpulsanregung

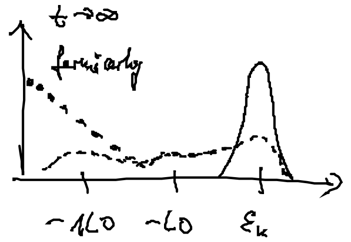


für $t \to \infty$ sollte sich eine Fermifunktion mit $T = T_{phonon}$ ausbilden
und zwar das sich aus der Ladungsträgerzahl ergibt

numerische Lösungen f. LO Phonon

ω_{LO} = konst





Kinetik, Boltzmanngleichung, E-Erhaltung
→ Replika wegen $\Delta E = 0$

Quantenkinetik, Energie-Zeit Unschärfe
→ Auswaschen wegen $\Delta E \neq 0$

11. Strom und Leitfähigkeit

Problem: Ladungstransport unter Einfluß Feld $\vec{E}_L$: $+\Big| \xrightarrow{\vec{E}_L} \Big| -$ Festkörper

und Elektron - Phonon - Stössen

11. 1. Strom als beobachtbare Größe: Einbandmodell f. Metalle

Stromdichteoperator f. Elektronen:

$$\vec{J}_{el} = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \sum_{n_1 n_2} \varphi^*_{n_1}(\vec{r}) \left\{ \vec{p} - q\vec{A} \right\} \varphi_{n_2}(\vec{r})\, a^+_{n_1} a_{n_2}(t) \quad + h.a \Big\}$$

Felder $\vec{A} = \vec{A}_{int} + \vec{A}_{ext} = 0$

$\vec{A}_{int}$: klein (Optik), $\vec{A}_{ext}$: transversal

$$\phi = \phi_{int} + \phi_{ext} = -\vec{r}\cdot\vec{E}_L \quad , \quad \vec{E}_L = \text{konstant} = -\vec{\nabla}\phi_{ext}$$

ϕ_{int}: Coulomb-WW V; ϕ_{ext}: $\neq 0$ und muß $\vec{E}_L$ beschreiben

QZ n_1: $\{k_1, \lambda_1\} \Rightarrow$ Einband λ_1 weglassen

$$\text{WF}: \varphi_{n_1} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}} u_{\cancel{\lambda_1} k_1}(\vec{r})$$

gesucht: quantenmech. EW $\langle \vec{J} \rangle \sim \langle a^+_{k_1}(t)\, a_{k_2}(t) \rangle$

$$\rightsquigarrow \langle \vec{j}\,\rangle_{qm} = \frac{1}{2}\frac{q}{mV}\sum_{k_1k_2} e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}\, u^*_{k_1}(\vec r)\,\underbrace{\vec p\, e^{i\vec k_2\vec r}\, u_{k_2}(\vec r)}_{\circledast\ \vec p = \frac{\hbar}{i}\nabla_r}\,\underbrace{\langle a^+_{k_1}a_{k_2}\rangle_{qm}}_{\text{Später Heisenberg-gleichungen}} + h.a.$$

m: nackte Elektronenmasse im Vakuum

$$\circledast = \frac{\hbar}{i}\left(\nabla_r\, e^{i\vec k_2\vec r}\right) u_{k_2} + \frac{\hbar}{i}\, e^{i\vec k_2\cdot\vec r}\left(\nabla_r\, u_{k_2}(\vec r)\right)$$

$$\langle \vec j\,\rangle_{qm} = \frac{1}{2}\frac{q}{Vm}\left\{\sum_{k_1k_2} e^{-i(\vec k_1-\vec k_2)\vec r}\langle a^+_{k_1}a_{k_2}\rangle\left(\vec k_2\hbar\, u^*_{k_1}(\vec r)\, u_{k_2}(\vec r) + \frac{\hbar}{i}u^*_{k_1}(\vec r)\nabla_r u_{k_2}(\vec r)\right)\right.$$
$$+ h.a.$$

in einer Messung wird über Raumbereiche gemittelt, z.B. Kontakte

∃ weitere Mittlung die über ein Volumen um Stelle: hier Elementarzelle

$$\langle\langle \vec j\,\rangle_{qm}\rangle_R(\vec r) = \underbrace{\frac{1}{\Omega_0}}_{\text{Volumen einer Zelle}} \int_{\Omega_0 \text{ an Stelle } R_L = \vec r} d^3r'\ \langle j\rangle_{qm}(\vec R_L - \vec r\,')$$

mittel über $e^{-i(\vec k_1-\vec k_2)\vec r}\, u^*_{k_1}(\vec r)\, u_{k_2}(\vec r)$ und

$$\underbrace{e^{-i(\vec k_1-\vec k_2)\vec r}}_{\text{Konstant über Zelle}}\ \underbrace{u^*_{k_1}(\vec r)\,\nabla_r\, u_{k_2}(\vec r)}_{\text{nur noch hierüber mitteln, mit Beachtung } u(\vec r\pm\vec R_L) = u(\vec r)}$$

$$\rightsquigarrow \langle u^*_{k_1}(\vec r)\, u_{k_2}(\vec r)\rangle = \frac{1}{\Omega_0}\int_{\Omega_0} d^3r'\ u^*_{k_1}(\vec r\,')\, u_{k_2}(\vec r\,')$$

$$\langle u^*_{k_1}(\vec r)\,\nabla_r\, u_{k_2}(\vec r)\rangle = \frac{1}{\Omega_0}\int d^3r'\ u^*_{k_1}(\vec r)\,\nabla_r\, u_{k_2}(\vec r)$$

damit $\langle \vec j\,\rangle_{qm,R} = \frac{1}{2}\frac{q}{mV}\sum_{k_1k_2} e^{-i(\vec k_1-\vec k_2)\overset{\approx\vec r}{\vec R_L}}\langle a^+_{k_1}(t)\, a_{k_2}(t)\rangle, \ \ldots$

Wenn wir räumlich homogene Systeme anschauen, so kann $\vec{j}$ nicht von $\vec{r}$ abhängen, kann nur erfüllt sein, wenn

$$\boxed{\langle a^+_{k_1} a_{k_2} \rangle = \langle a^+_{k_1} a_{k_1} \rangle \, \delta_{k_1 k_2} \quad \hat{=} \text{ räumliche Homogenität}}$$

also folgt setzt man $k_1 = k_2 = k$, $\langle a^+_{k_1} a_{k_2} \rangle = \delta_{k_1 k_2} \underbrace{\langle a^+_{k_1} a_{k_1} \rangle}_{\sigma_{k_1 = k}}$

„...“ von oben

$$\langle \vec{j} \rangle_{qm,R} = \frac{1}{2} \frac{q}{V} \sum_k \sigma_k(t) \left\{ \frac{\hbar \vec{k}}{m} \underbrace{\langle u_k^*(\vec{r})\, u_k(\vec{r}) \rangle}_{=1} + \underbrace{\frac{\hbar}{i m} \langle u_k^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r u_k(\vec{r}) \rangle}_{HA:\ \frac{\vec{\nabla} \varepsilon_k}{\hbar} - \frac{\hbar \vec{k}}{m}} \right\} + k.a.$$

$$\boxed{\langle j \rangle = \frac{1}{2} \frac{q}{V} \sum_k \sigma_k(t) \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}}$$ Ladungsstrom

parabolische Bänder: $\frac{\vec{\nabla} \varepsilon_k}{\hbar} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$

$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}$

Stromdichte ist prop. zu Ladung mal Summe über alle Elektronenimpulse $\vec{k}$ gewichtet mit Besetzung, wobei $\frac{\hbar \vec{k}}{m} \hat{=}$ Geschwindigkeit

V^{-1} sorgt dafür daß es eine Stromdichte ist ...

man kann auch Spinströme beschreiben $\sigma_k \to \sigma_{k\uparrow}, \sigma_{k\downarrow}$

11.2 Elektron – Feld – WW

Ziel: $\dot{\vec{r}}_k = ?$ mit $H = \underset{\checkmark}{H_0} + \underset{\checkmark}{H_{el-ph}} + H^L_{ext}(\underline{\underline{\vec{E}_L}})$

$$H^L_{ext} = \underbrace{\sum_i q\, \phi_{ext}(\vec{r}_i)}_{\text{1. Quantisierg.}} \xrightarrow{\text{2. Quantisierg.}} q \sum_{1,2} \langle 1|\, \phi_{ext}(\vec{r})\, |2\rangle\, a_1^+ a_2$$

f. 1 Band $\;{}_k 1^k \hat{=} k_1\;$, wissen: $\phi_{ext} = -\vec{r}\cdot\vec{E}$

$${}_k|1\rangle^k \hat{=} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}\, u_{k_1}(\vec{r})$$

$$= q \sum_{k_1 k_2} \frac{1}{V} \int dV\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}\, u^*_{k_1\approx 0}(\vec{r})\, \underline{\left(-\vec{r}\cdot\vec{E}_L\right) e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}}\, u_{k_2\approx 0}(\vec{r})\, \underline{\underline{a^+_{k_1} a_{k_2}}}$$

Annahme k_1, k_2 in d. Bloch fkt ≈ 0, weil am Γ-Punkt

verwende: $\quad \underline{-\vec{r}\cdot\vec{E}_L\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}} = i\, \vec{E}_L \cdot \underline{\underline{\nabla_{k_2}}}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}$

und partielle Integration bzgl. $\vec{k}_2$ – ....

$$= \frac{q}{V} \sum_{k_1 k_2} \int dV\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{r}}\, u^*_0(\vec{r})\, u_0(\vec{r}) \left\{ -i\, \vec{E}_L \cdot \nabla_{k_2}\, a^+_{k_1} a_{k_2} \right\}$$

$$\int dV = \sum_{\substack{n \\ \text{Zelle}}} \int d\Omega_n$$

$$= \frac{q}{V} \sum_{k_1 k_2} \sum_{n} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{R}_n} \underbrace{\int d\Omega_n\, u_0^*(\vec{R}_n + \vec{r}_n)\, u_0(\vec{R}_n + \vec{r}_n)}_{\Omega_0} \cdot \{ \dots \}$$

$$= q \sum_{k_1 k_2} \underbrace{\underbrace{\frac{1}{N \cancel{\Omega_0}}}_{V^{-1}} \sum_{n} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{R}_n} \cancel{\Omega_0}}_{\delta_{k_1 k_2}} \cdot \{ \dots \}$$

$$\boxed{H_{int}^{L} = -iq \sum_{k} \vec{E}_L \cdot \vec{\nabla}_k\, a_k^{+} \overset{\downarrow}{a}_k}$$

Wechselwirkungshamiltonian v. Blochelektron im angelegt Feld

$\downarrow$ zeigt auf das k_1 auf welches $\vec{\nabla}_k$ angewendet wird.