

10.5.3. Das Enbandmodell: Kinetik, Boltzmann-Gleichung

bisher in Quantenkinetik keine Energieerhaltung beim Stoß
 lange Beobachtungszeiten sollte Elektron und Phononen analog
 zu klassischen Teilchen Stoßen: d.h. Energieerhaltung

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Beobachtungszeit $\rightarrow \infty \quad \Downarrow \quad \Delta E \rightarrow 0 \Rightarrow$ Energieerhaltung

Grenzfall sollte in der bisherigen Stoßgleichg. existieren, jetzt suchen

$$\dot{\bar{v}}_k(t) \approx \int_{-\infty}^t dt' \underbrace{\cos\left\{\left(v_{k+q} - v_k \pm \omega_q\right)(t-t')\right\}}_{\text{Feldstärke und Energie-unschärfe}} \underbrace{g(t')}_{\substack{\text{Dynamik der} \\ \text{Besetzungszahl in } |k\rangle \\ (q, \tau)}}$$

ist die Umkehr zur Quantenkinetik-Gleichung

neue Integrationsvariable: $s = t - t'$, $\Delta v = v_{k+q} - v_k \pm \omega_q$

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

auf Skala der Frequenzoszillationen, Annahme $g(t-s) \approx g(t)$
 (Skala t : lang gegen den eigentlichen Stoßvorgang)

$$\hat{=} \int_0^{\infty} ds \cos(\Delta v_{qk} s) g(t)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int_0^{\infty} ds \left(e^{i\Delta v_{qk} s} + e^{-i\Delta v_{qk} s} \right) \underbrace{e^{-\gamma s}}_{\text{Konvergenz erzwungen Faktor}} \\
& \quad \text{(Dämpfer höher Korrekturen)} \\
& = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{i\Delta v_{qk} s - \gamma s}}{i\Delta v_{qk} - \gamma} + \text{c.c.} \right) \Big|_0^{\infty} \quad \text{Später } \gamma \rightarrow 0 \\
& \quad \hat{=} 2 \text{ Realteil} \\
& = \frac{\gamma}{(\Delta v_{k+q} - \Delta v_k \pm \omega_q)^2 + \gamma^2} \quad \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \pi \delta(\Delta v_{k+q} - \Delta v_k \pm \omega_q)
\end{aligned}$$

Die δ -Funktion beschreibt die Energieerhaltung beim Einzelstoß
 Photoemission ($\pm \omega_q$) wird auf oder ab gegeben und von Elektron
 ($v_{k+q} - v_k$)

↓ klassische Boltzmann-Gleichung

$$\dot{b}_k(t) = \underbrace{-\Gamma_{\text{out}}^k(t)}_{(1)} b_k(t) + \underbrace{\Gamma_{\text{in}}^k(t)}_{(2)} (1 - b_k(t))$$

(1) Ausstossrate:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\text{out}}^k(t) = 2\pi \sum_q |D_q|^2 & \left\{ \delta(v_{k+q} - v_k - \omega_q) u_q \right. \\
& \left. + \delta(v_{k+q} - v_k + \omega_q) (u_q + 1) \right\} (1 - b_{k+q}(t))
\end{aligned}$$

$$D_f \text{ in } H \text{ ist eselt } \frac{D_f}{t} \rightarrow D_f$$

- Verlustrate der Besetzung im Zustand $|k\rangle$
- Rate: $[\Gamma_{out}] = \frac{1}{S}$
- $|D_f|^2$: 2. Bornsche Näherung
- Markoffapproximation \rightarrow Energieerhaltung durch δ -Funktion
 1. δ -Fkt: $\underbrace{v_k + u_f}_{\text{Phononabsorption}} = \underbrace{v_{k+f}}_{\text{neuer Elektronenzustand}} \quad \left(v = \frac{\epsilon}{t} \text{ Elektronen} \right)$
stimuliert! $u_f \neq 0$
 2. δ -Fkt: $v_k = \underbrace{v_{k+f} + u_f}_{\text{Phononemission}} \quad \text{stimuliert + spontan } (u_f + 1)$

and für $T \rightarrow 0$, so $u_f \rightarrow 0$, aber $\Gamma_{out} \neq 0$ (spontane Prozesse)

$$\textcircled{2} \quad \Gamma_{ik}^k(t) = 2\bar{k} \sum_f |D_f|^2 \left\{ \delta(v_{k+f} - v_k - u_f) (1+u_f) + \delta(v_{k+f} - v_k + u_f) u_f \right\} \bar{\sigma}_{k+f}(t)$$

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

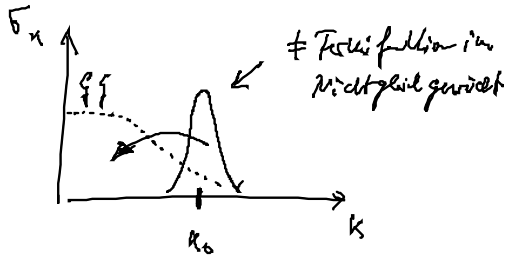
10.6. Ergebnisse numerischer Lösungen der Stoßgleichungen

• im fließgleichgewicht ist $\dot{\bar{\sigma}}_k(t) = 0 = \underbrace{-\Gamma_{out} \bar{\sigma}_k + \Gamma_{in} (1 - \bar{\sigma}_k)}_{=0}$

„detailed balance“

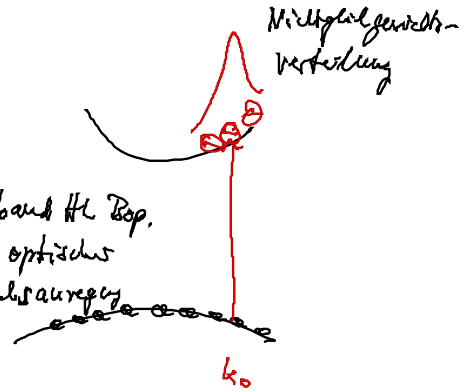
(Lösung solch dann ein Fermifaktor sein)

• im Nichtgleichgewicht ist $\bar{v}_k \neq 0$



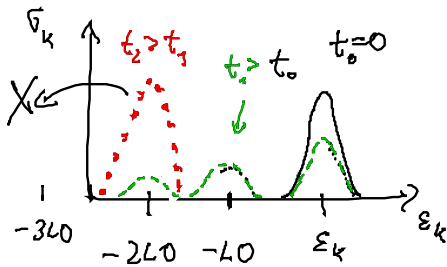
Bsp:

Zweiband Hl. Bsp. mit optischer Koppelung

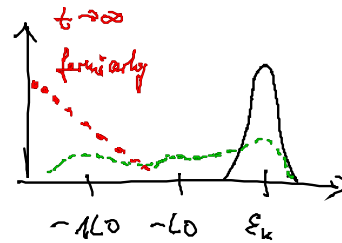


↳ für $t \rightarrow \infty$ sollte sich eine Fermifunktion mit $T = T_{\text{phonon}}$ ausbilden und μ das ist aus der Ladungszahl ergibt

Mischlösungen f. LO Phonon



$\omega_{LO} = \text{konstant}$



Kinematik, Boltzmann, E-Erhaltung
 → Resonanz wegen $\Delta E = 0$

Quasikinetik, Energiezeit Unschärfe
 → Auswaschen wegen $\Delta E \neq 0$

11. Strom und Leitfähigkeit

Problem: Ladung transport unter Einfluss Felds \vec{E}_L : $+ \left| \begin{array}{c} \text{Feldlinien} \\ \rightarrow \\ \vec{E}_L \end{array} \right| -$
und Elektron-Phonon-Stöße

11.1. Strom als beobachtbare Größe: Einbandmodell f. Metalle

Stromdichte operator f. Elektronen:

$$\vec{j}_{ee} = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \sum_{u_1, u_2} \varphi_{u_1}^*(\vec{r}) \left\{ \vec{p} - q\vec{A} \right\} \varphi_{u_2}(\vec{r}) a_{u_1}^\dagger a_{u_2}(t) + h.c. \Bigg\}$$

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

\swarrow Klein (Dipol) \searrow transversal

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

\swarrow Coulomb-WW \vee \searrow $\neq 0$ und \vec{p} \vec{E}_L beschreiben

Qz $u_1 = \{k_{x1}, \lambda_1\} \Rightarrow$ Einband λ_1 weglassen

WF: $\varphi_{u_1} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} u_{\cancel{\lambda_1}}(\vec{r})$

gemitt: quantisiert EW $\langle \vec{p} \rangle \sim \langle a_{k_1}^\dagger(t) a_{k_2}(t) \rangle$

$$\downarrow \langle \vec{j} \rangle_{qm} = \frac{1}{2} \frac{q}{mV} \sum_{k_1, k_2} e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} u_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{p} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} u_{k_2}(\vec{r}) \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle_{qm} + h.a.$$

u : nackte Elektronenwellenfunktion im Vakuum

$\vec{p} = \hbar \vec{k}$
 Spins (Hilfs-)gleichungen

$$\circledast = \frac{\hbar}{i} \left(\vec{\nabla}_r e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} \right) u_{k_2} + \frac{\hbar}{i} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} \left(\vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r}) \right)$$

$$\langle \vec{j} \rangle_{qm} = \frac{1}{2} \frac{q}{mV} \left\{ \sum_{k_1, k_2} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle \left(\vec{k}_2 \frac{\hbar}{i} u_{k_1}^*(\vec{r}) u_{k_2}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{i} u_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r}) \right) \right\} + h.a.$$

in der Messung wird über Raumbereiche gemittelt, z.B. Kristalle

\vec{r} weiter mitteln die über ein Volumen umhüllt: kleine Elementarzelle

$$\langle \langle \vec{j} \rangle_{qm} \rangle_{\mathcal{R}}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} d^3r' \langle \vec{j} \rangle_{qm}(\vec{R}_0 + \vec{r}') \quad \boxed{\dots}$$

Volumen einer Zelle $\vec{R}_0 = \vec{r}$

mitteln über $e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} u_{k_1}^*(\vec{r}) u_{k_2}(\vec{r})$ und

$e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} u_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r})$

Korrekturen über Zelle

was wohl hier über mitteln, mit Beachtung

$$u(\vec{r} \pm \vec{R}_0) = u(\vec{r})$$

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

$$\langle u_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} d^3r' u_{k_1}^*(\vec{r}') \vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r}')$$

$$\text{damit } \langle \vec{j} \rangle_{qm, \mathcal{R}} = \frac{1}{2} \frac{q}{mV} \sum_{k_1, k_2} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_0} \langle a_{k_1}^\dagger(t) a_{k_2}(t) \rangle \dots$$

wenn wir räumlich homogene Leitoren suchen, so kann \vec{j} nicht von \vec{r} abhängen, kann nur erfüllt sein, wenn

$$\langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle = \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_1} \rangle \delta_{k_1 k_2} \hat{=} \text{räumliche Homogenität}$$

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

"..." von oben

$$\langle \vec{j} \rangle_{\vec{r}} = \frac{1}{2} \frac{q}{V} \sum_k \sigma_k(t) \left\{ \frac{\hbar k}{m} \langle u_k^*(\vec{r}) u_k(\vec{r}) \rangle + \frac{\hbar}{im} \langle u_k^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r u_k(\vec{r}) \rangle \right\} + \text{ka.}$$

= 1 HA: $\frac{\vec{\nabla} \epsilon_k}{\hbar} = \frac{\hbar k}{m}$

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

↑
parabolisch Bänder: $\frac{\vec{\nabla} \epsilon_k}{\hbar} = \frac{\hbar k}{m^*}$
 $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

Stromdichte ist prop. zu Ladung mal Summe über alle Elektronenimpulse \vec{k} gewichtet mit Besetzung, wobei $\frac{\hbar k}{m^*} \hat{=} \text{Geschwindigkeit}$
 v^{-1} sagt dafür dass \rightarrow ein Strom durch ist ...

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

11.2 Elektron-Feld - WW

Ziel: $\hat{D}_\alpha = ?$ mit $H = H_0 + H_{el-ph} + H_{ext}(\vec{E}_L)$

$$H_{ext}^L = \sum_i q \underbrace{\phi_{ext}(\vec{r}_i)}_{1. \text{ Ordnung}} \xrightarrow{2. \text{ Ordnung}} q \sum_{1,2} \langle 1 | \phi_{ext}(\vec{r}) | 2 \rangle a_1^\dagger a_2$$

f. 1 Band $|1\rangle \hat{=} |k_1\rangle$, wobei: $\phi_{ext} = -\vec{r} \cdot \vec{E}$

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

$$= q \sum_{k_1, k_2} \frac{1}{V} \int dV e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} u_{k_1}^*(\vec{r}) \underbrace{(-\vec{r} \cdot \vec{E}_L)}_{=} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} u_{k_2}(\vec{r}) a_{k_1}^\dagger a_{k_2}$$

Auswahl k_1, k_2 in d. Block flkt ≈ 0 , weil am \vec{r} -Punkt

verwende: $\underbrace{-\vec{r} \cdot \vec{E}_L}_{=} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} = i \vec{E}_L \cdot \vec{p}_{k_2} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}}$

und partielle Integration bzgl. \vec{k}_2 -----

$$= \frac{q}{V} \sum_{k_1, k_2} \int dV e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} u_{k_1}^*(\vec{r}) u_{k_2}(\vec{r}) \left\{ i \vec{E}_L \cdot \vec{p}_{k_2} a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \right\}$$

$$\int dV = \sum_n \int_{Zelle} d\Omega_n$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{g}{V} \sum_{k_1, k_2} \sum_n e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_n} \int d\Omega_n u_0^*(\vec{R}_n + \vec{r}_n) u_0(\vec{R}_n + \vec{r}_n) \cdot \{ \dots \} \\
&= g \sum_{k_1, k_2} \underbrace{\frac{1}{N \rho_0}}_{V^{-1}} \sum_n e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_n} \Omega_0 \cdot \{ \dots \} \\
&\quad \delta_{k_1, k_2}
\end{aligned}$$

$$H_{\text{int}}^L = -ig \sum_k \vec{E}_L \cdot \vec{V}_k a_k^\dagger a_k$$

Wechselwirkungsterm u. Bloch electron im angelegten Feld
 ↓ zeigt auf das k , auf welches \vec{V}_k angewendet wird.