

Weiter zu 5.1 Quantenkinetische Stoßgleichung
(Nicht-Markovsche Dynamik)

$$\dot{\rho}_k(t) = - \int_{-\infty}^t dt' f_{\text{aus}}(t, t') \rho_k(t') + \int_{-\infty}^t dt' f_{\text{ein}}(t, t') (1 - \rho_k(t'))$$

Zeitretardierung \rightarrow quantenmechanische Energie-Zeit-Unschärfe
(Gedächtniseffekte)

Ausstreuterm:

$$f_{\text{aus}}(t, t') = \frac{2}{\hbar^2} \sum_q |V_q|^2 [1 - \rho_{k+q}(t')] \left\{ \begin{array}{l} \cos \left[\frac{1}{\hbar} (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar \omega_q) (t - t') \right] n_q \\ + \cos \left[\frac{1}{\hbar} (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar \omega_q) (t - t') \right] (n_q + 1) \end{array} \right\}$$

Einstreuterm:

$$f_{\text{ein}}(t, t') = \frac{2}{\hbar^2} \sum_q |V_q|^2 \rho_{k+q}(t') \left\{ \begin{array}{l} \cos \left[\frac{1}{\hbar} (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar \omega_q) (t - t') \right] (n_q + 1) \quad \text{Phonon-Emission} \\ + \cos \left[\frac{1}{\hbar} (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar \omega_q) (t - t') \right] n_q \quad \text{Phonon-Absorption} \end{array} \right\}$$

\nearrow
2 cos kommt zustande
durch Kombination von S_1, S_2
und T_1, T_2

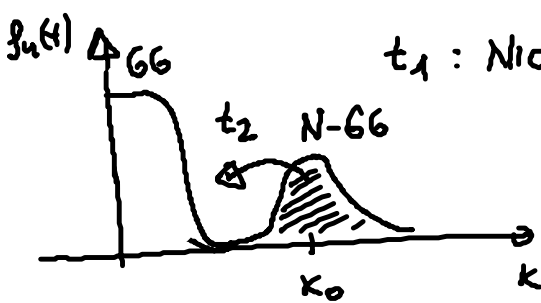
\uparrow
Zeitretardierung
Energie-Zeit-Unschärfe
 $\cos(\frac{1}{\hbar} \Delta t \Delta E)$
während des Stoßes Δt
Energieerhaltung nicht erfüllt

Zur Erinnerung:

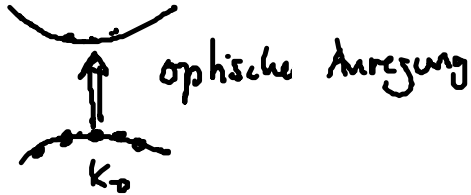
$$\dot{f}_{1k} = -\frac{i}{\hbar} \sum_q D_q \left[S_q^{k, k-q} + \dots \right]$$

$$\parallel$$

$$-\frac{i}{\hbar} D_q \left[\overbrace{n_q f_{k+q} (1-f_k)}^{\text{fein}} - \underbrace{(n_q+1) f_k (1-f_{k+q})}_{\text{aus}} \right]$$

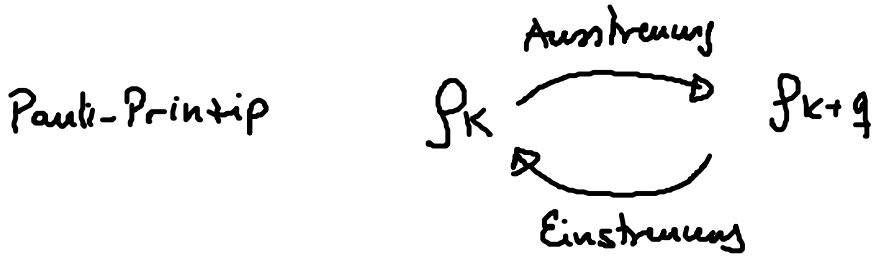


t_1 : Nicht-Gleichgewichts-Verteilung (z.B. optisch induziert)



$t_2 > t_1$: Thermolisierung in den Gleichgewichtszustand; Fermi-Verteilung mit der Temperatur des Wärmebads

Einstreuung $\sim (1-f_k)$ Nichtbesetzung von $|k\rangle$
 $\sim f_{k+q}$ Besetzung des Ausgangszustands $|k+q\rangle$



Nur Ein-Phonon-Prozesse werden berücksichtigt

$$E_{k+q} - E_k \pm \hbar\omega_q \quad \begin{matrix} \Leftarrow \text{Phonon-Absorption} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \Leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \\ \Leftarrow \text{Emission} \end{matrix}$$

Absorption von Phononen

$$\sim n_q$$

Emission

$$\sim (1+n_q)$$

↑ spontan ↑ induziert

5.2 Boltzmann-Gleichung (Markov Dynamik)

Im Rahmen der Markov-Näherung kann die DGL für $S_{\vec{q}}^{k+q, k}$ analytisch gelöst werden.

$$\dot{g}(t) = -i\Delta\omega g(t) + f(t)$$

↗ Inhomogenität

Formale Lösung durch Aufintegrieren

$$g(t) = \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\Delta\omega(t-t')} f(t')$$
$$= - \int_{\infty}^0 ds e^{-i\Delta\omega s} f(t-s)$$

$s = t - t'$

untere Grenze: $t - (-\infty) \Rightarrow +\infty$

obere Grenze: $t - t \Rightarrow 0$

$$= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^{\infty} ds e^{i\Delta\omega s} \underline{e^{-\gamma s}} f(t-s)$$

Konvergenz-erzeugender Faktor γ
Dämpfungskonstante wichtig
für die Integration
physikalisch: Streuterm höherer
Ordnung, die zu Dämpfung
führen

$$\approx f(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-i\Delta\omega s} e^{-\gamma s}$$

↖ Markov-Näherung

$$f(t-s) \approx f(t)$$

$$= -f(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{-i\Delta\omega - \gamma} \quad \Bigg| \quad \frac{i}{i}$$

$$= f(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{-1}{\Delta\omega - i\gamma}$$

führt zu einer Energie-Resonanzierung

$$\underbrace{\pi \delta(\Delta\omega)}_{\text{Hauptwertintegral}} - i \underbrace{P\left(\frac{1}{\Delta\omega}\right)}_{\text{wird i.R. vernachlässigt}}$$

$$g(t) \approx f(t) \pi \delta(\Delta\omega)$$

Energieerhaltung

Markov-Näherung: Vernachlässigung der Gedächtniseffekte,
d.h. $f(t-s) \approx f(t)$

$\hat{=}$ Vernachlässigung der Energie-Zeit-Unschärfe

Gute Näherung für hohe Teilchendichten und hohe Abschirmung der Coulomb WW.

Mit Markov-Näherung folgt für die phonon-assistierte Größen

$$\begin{aligned} \dot{S}_q^{k+q, k} &= -i \Delta\omega S_q^{k+q, k} + Q(t) \quad \text{Lutzmeyerformel} \\ &= Q(t) \pi \delta(\omega) \\ &= \underbrace{-\frac{i}{\hbar} D_q \left[(n_q + 1) f_{k+q} (1 - f_k) - n_q f_k (1 - f_{k+q}) \right]}_{Q(t)} \times \\ &\quad \times \pi \delta(\omega_k - \omega_{k+q} + \omega_q^{\text{ph}}) \end{aligned}$$

Einsetzen in die DGL für f_k liefert die

Boltzmann-Stoßgleichung (kinetische Gleichung,
beinhaltet die Energieerhaltung)

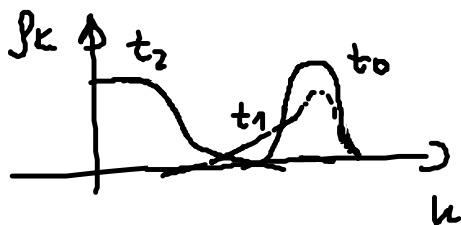
$$\dot{f}_k(t) = -\Gamma_{\text{aus}}^k f_k(t) + \Gamma_{\text{ein}}^k(t) (1 - f_k(t))$$

$$\Gamma_{\text{aus}}^k(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 \left\{ n_q \delta[(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_q)/\hbar] + (n_q + 1) \delta[(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q)/\hbar] \right\} (1 - f_{k+q}(t))$$

$$\Gamma_{\text{ein}}^k(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 \left\{ \delta[(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_q)/\hbar] (n_q + 1) + \delta[(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q)/\hbar] n_q \right\} f_{k+q}(t)$$

Interpretation der Ergebnisse

1) Quantenkinetik (Nicht-Markovsche Dynamik)

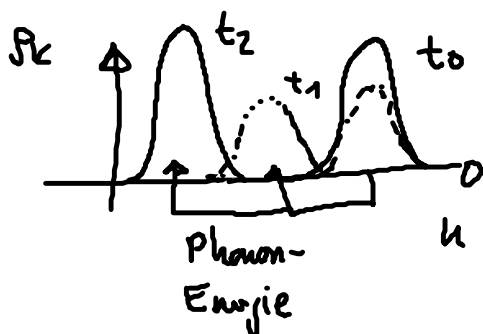


t_0 : Nicht-Gleichgewicht

t_2 : Gleichgewicht

Zeitskala: Pikosekunden

2) Kinetik (Markov-Dynamik)



t_0 : Nicht-Gleichgewicht

$t_2 > t_1 > t_0$

$t_1 \sim ps$

Energie-Erhaltung

Relaxation in Richtung der Fermi-Verteilung in festen Energie-Schritten bestimmt durch die Phonon-Energie

Gleichmäßige Fermi-Fkt. kann nicht erreicht werden.

5.3 Boltzmann-Gleichung für Elektron-Elektron-Streuung

$$i\hbar \dot{p}_k = \langle [p_k, \underline{H}_{e-e}] \rangle$$

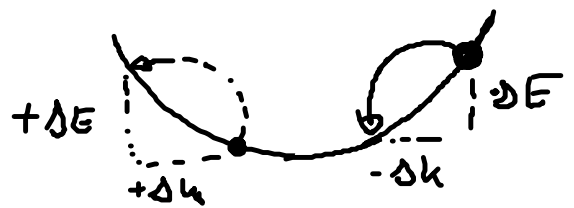
$$= \sum_{ABC} \left[V_{BC}^{kA} \{ \langle a_n^\dagger a_B \rangle \langle a_A^\dagger a_C \rangle - \langle a_n^\dagger a_C \rangle \langle a_A^\dagger a_B \rangle \} \right. \\ \left. - V_{kC}^{AB} \{ \langle a_A^\dagger a_k \rangle \langle a_B^\dagger a_C \rangle - \langle a_A^\dagger a_C \rangle \langle a_B^\dagger a_k \rangle \} \right] \\ + \sum_{ABC} \left[V_{BC}^{kA} \langle a_n^\dagger a_A^\dagger a_C a_B \rangle^c - V_{kC}^{AB} \langle a_A^\dagger a_B^\dagger a_C a_k \rangle^c \right]$$

$A, B, C \cong$ Bandindex, Wellenvektor

Bewegungsgleichungen für die neuen Korrelationsgrößen $\langle \dots \rangle^c$

Korrelationsentwicklung bis zu 2. Ordnung (2. Ordnung Born Näherung), d.h. 3-Teilchengrößen (6-Operatoren im Erwartungswert) werden vernachlässigt.

Markov-Näherung \rightarrow formale Lösung für $\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle^c$.
Einsetzen in die Bewegungsgl. für $p_k \rightarrow$
Boltzmann-Gleichung

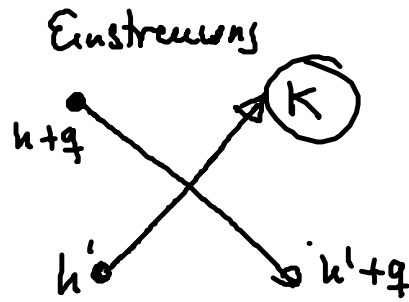
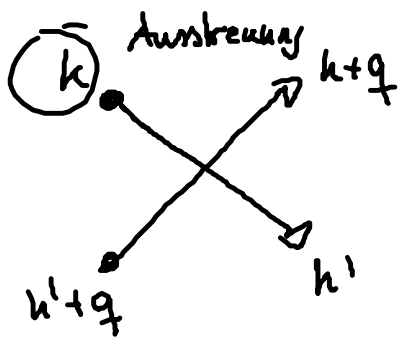


Impuls- und Energie erhalten sind

$$\dot{p}_k \Big|_{He-e} (+) = \frac{4\pi}{\hbar^2} \sum_{k'q} \left[\underbrace{2V(q)}_{\text{direkter Term}} - \underbrace{V(q)V(k'-k)}_{\text{Austausch-Term}} \right] \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k'+q} - \epsilon_{k'} - \epsilon_{k+q})$$

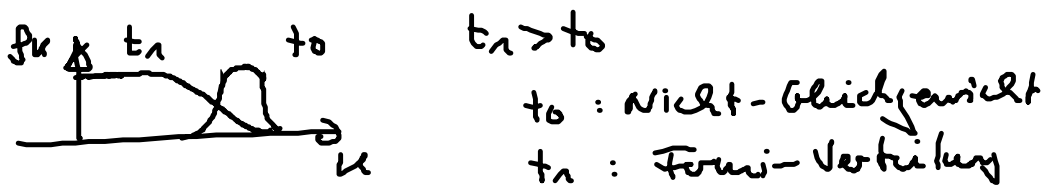
Energie-Erhaltung

$$\left\{ \begin{aligned} & - f_k(t) f_{k'+q}(t) [1 - f_{k+q}(t)] [1 - f_{k'}(t)] \quad \text{Ausstreuung} \\ & + [1 - f_k(t)] [1 - f_{k'+q}(t)] f_{k+q}(t) f_{k'}(t) \quad \text{Einstreuung} \end{aligned} \right\}$$



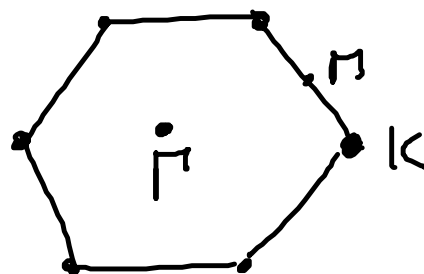
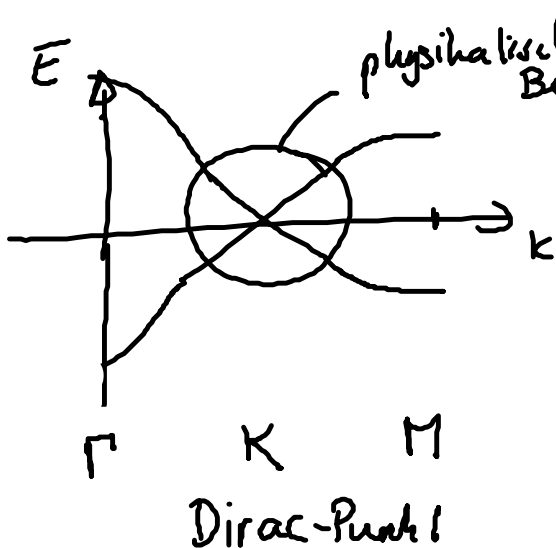
Pauli-Blocking $\sim (1 - f)$ sorgt dafür, dass in Zustände, die bereits voll sind, nicht mehr eingestrahlt wird.

\Rightarrow Zeitliche Umverteilung der elektronischen Besetzung
 \rightarrow Gleichgewichtsverteilung (Fermi-Verteilung)

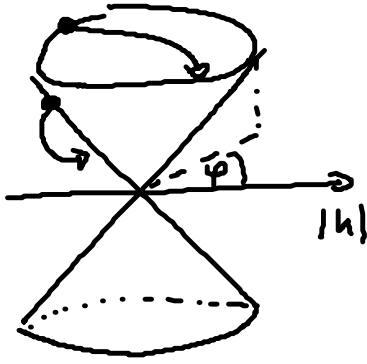


5.4. Relaxationsdynamik in Graphen

Besonderheit: Lineare Bandstruktur ohne Bandlücke in der Nähe der Dirac-Punkte




Graphen ist eine 2-dim Nanostruktur

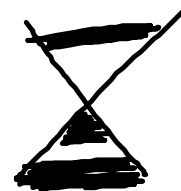


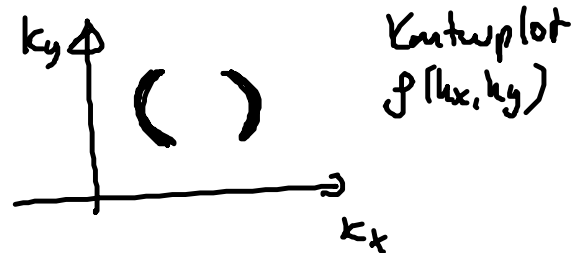
$$\vec{u} = (|\hbar|, \varphi) = (k_x, k_y)$$

Streuprozesse entlang des Kegels
mit $\Delta\phi = 0$ und quer dazu
 $\Delta\phi \neq 0$

1) Optische Anregung

t_0  Optisches Pumpen
Pulsbreite 10 fs
Anregungsenergie 1.5 eV

t_1  Nicht-Gleichgewicht
Ist anisotrop, d.h.

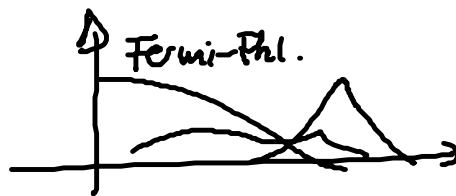


Elektron-Licht-Kopplung ist anisotrop, d.h. Elektronen werden bevorzugt in bestimmte Winkel gepumpt.

2) Elektron-Elektron & Elektron-Phonon-Streuung

\Rightarrow isotrope Verteilung wird durch Elektron-Phonon-Prozess innerhalb der ersten 50 fs erreicht [Prozesse quer zum Kegel mit $\Delta\phi \neq 0$ wichtig]

⇒ Coulomb- und Phonon-induzierte Mikabandprozesse führen zu einer Thermalisierung der angeregten Elektronen ($\sim 100 \text{ fs}$)

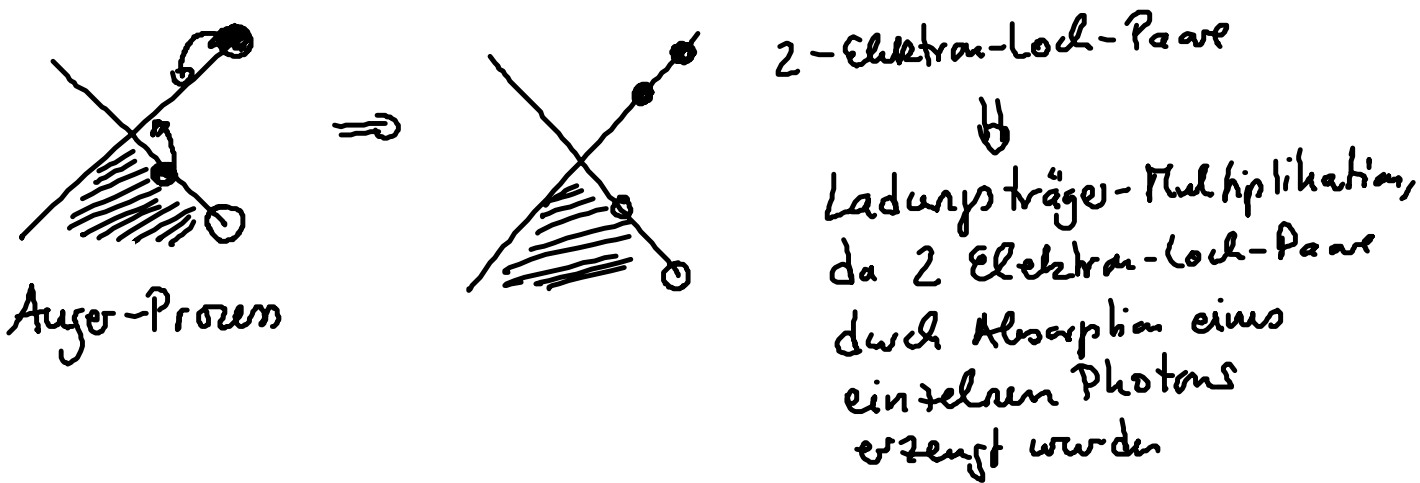
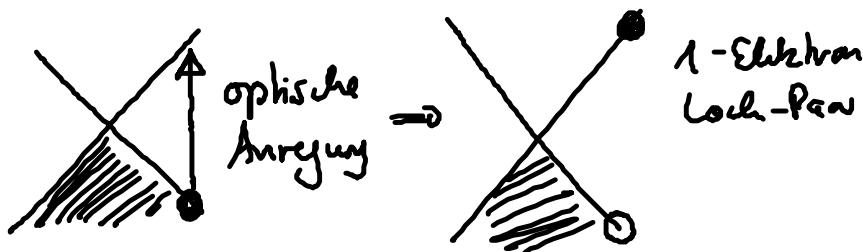


⇒ Abkühlung durch Elektron-Phonon-Streuung (Temperaturanpassung an das Gitter)

$\sim 1 \text{ ps}$



⇒ Auger-Prozesse sehr wichtig



⇒ mögliche Anwendung in Solarzellen oder Verstärkern