

# VIII. Elektronischer Transport

## VIII.1 Ladungsträgerdichte, Stromdichte, Wärmefluss

Ein wichtiges Gebiet in Festkörpern ist der Transport von Ladungsträgern.

Erster Schritt um das Problem anzugehen ist die Beschreibung in der 2. Quantisierung.

Was brauchen wir? Kontinuitätsgl.:  $\rho$  und  $\vec{j}$ !

Ladungsdichte (Beispiel für 1 Band von Elektronen im Volumen (Halbleiter))  
 $-i(\psi - \psi^*) \cdot \vec{v}$

$$\rho(\vec{r}) = e \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = e \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{1}{V} a_{\lambda k}^\dagger a_{\lambda k'} e^{-i(\epsilon_\lambda - \epsilon_{\lambda'}) \cdot t} u_{\lambda k}^\dagger(\vec{r}) u_{\lambda k'}(\vec{r})$$

Selbst wenn wir uns die Densität von  $\rho(\vec{r})$  anschauen, so brauchen wir die Bewegungsgl für  $\langle a_{\lambda k}^\dagger a_{\lambda k'} \rangle$ !

## Stromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \frac{e}{m} \left( \psi^\dagger(\vec{r}) \underbrace{(\vec{p} - e \vec{A})}_{\text{Geschwindigkeit}} \psi(\vec{r}) + \text{h.c.} \right)$$

Geschwindigkeit  
-operator

Wieder Überführung in Sprache mit  $a_{\lambda k}^\dagger, a_{\lambda k}$

$$= \sum_{\substack{k, k' \\ l, l'}} \frac{1}{2} \frac{e}{m} \left( e^{-i(k \cdot r)} a_{jk}^x(k) (\rho - \epsilon t) a_{ll}(k) e^{i(k' \cdot r)} a_{l'k'}^x(k') + \text{h.c.} \right)$$

Verschieden Beiträge

a)  $l \neq l'$  interband Beiträge (Optik)

b)  $l = l'$  intraband Beiträge (Transport)

In der Übungsaufgabe wird gezeigt:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r a_{jk}^x(k) \frac{p}{m_0} a_{ll}(k) = \begin{cases} -\frac{\hbar k}{m_0} + \nabla_k \frac{\epsilon_{ll}}{\hbar} & l=l' \\ i(\omega_{ll} - \omega_{jk}) d_{ll} & l \neq l' \end{cases}$$

mit dem Dipolmoment  $d_{ll} = \frac{1}{\Omega} \int d^3r a_{l_1 k_1}^x(k_1) \cdot a_{l_2 k_2}(k_2)$

Fall  $l=l'$   $\omega_{ll} = \frac{\epsilon_{ll} \omega}{\hbar}$

Beitrag  $m_{ij}$  für  $l=l'$ : (Kittel über 2.4.2)

$$\sum_{k, k'} \frac{1}{2} \frac{e}{m} e^{-i(k \cdot r)} \left( \nabla_k \frac{\epsilon_{ll}}{\hbar} - \epsilon t \right) e^{i(k' \cdot r)} a_{jk}^x(k) a_{l'k'}^x(k')$$

Wichtig ist

$\langle a_{jk}^+ a_{l'k'} \rangle$ , die Größe, die wir brauchen!

Vor der Berechnung von  $\langle a^+ a \rangle$ , sehen wir uns die Wigner Verteilung!

Erinnerung an die klassische Statistik:

Dann gibt es ein Verteilungsfunktions  $\mathcal{P}(q, p)$  (mit  $q$  Ort und  $p$  kanonischer Impuls)

Lösung ist die Wignervert. des Quantenanalogs zur Vert.  $\psi(x,t)$

$$f_k(x,t) = \int_V \langle \psi^+(x+y) \psi(x-y) \rangle e^{2ikx} dy$$

Quasi-Wahrscheinlichkeit,  
denn  $f_k$  mit  
kann negativ sein!  
(QM Größe!)

Beispiel für ein Boson  
als Alternative

$$= \int_V \sum_{k_1, k_2} \frac{e^{-i\tilde{k}(x+y)} \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle e^{i\tilde{k}(x-y) + 2ikx}}{V} dy$$

$$= \sum_{k_1, k_2} \frac{e^{i(\tilde{k}' - \tilde{k})x}}{V} \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle \underbrace{\int dy e^{i(2k - \tilde{k}' + \tilde{k})y}}_{\frac{(2\pi)^3 \delta(2k - \tilde{k}' + \tilde{k})}{V \delta_{2k, \tilde{k}' + \tilde{k}}}}$$

$$= \sum_{k'} e^{i(2k' - 2k)x} \langle a_{k'}^\dagger a_{k' + k} \rangle$$

$$\| f_k(x,t) = \sum_{k'} e^{ik'x} \langle a_{k-k'}^\dagger a_{k'+k} \rangle \|$$

Die Wignervert. hat inhärente Eigenschaften:

(a)  $\| f_k = \frac{1}{V} \int dx f_k(x,t) \|$

Beweis:

$$\begin{aligned} f_k &= \frac{1}{V} \int dx \sum_{k'} e^{ik'x} \langle a_{k-k'}^\dagger a_{k'+k} \rangle \\ &= \sum_{k'} \delta_{k',0} \langle a_{k-k'}^\dagger a_{k'+k} \rangle \\ &= \langle a_{k-k}^\dagger a_{k+k} \rangle = f_k \end{aligned}$$

(b)  $\| h(k) = \sum_{k'} f_k(x,t) \|$

Beweis:  $h(k) = \sum_{k'} \sum_{k''} e^{ik'x} \langle a_{k-k'}^\dagger a_{k'+k''} \rangle$

$$= \sum_k \xi_k e^{-i(kx + i\frac{k}{2}t)} e^{i(kx + i\frac{k}{2}t)} < a_{k-\frac{k}{2}}^+ a_{k+\frac{k}{2}} >$$

$$= < \psi^\dagger(k,t) \psi(k,t) > \text{ged.}$$

(c) Man kann über die Wigner-Funktion, Poisson-Klammer über Eigenschaften der Schrödinger-Gleichung zeigen:

z. B. räumlich homogenes System (gilt auch bei Strom)

$$\sum_k e^{ik'x'} < a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} > = f_k(k',t) = f_k(k,t) = \sum_k e^{ik'x'} < a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} >$$

$$\sum_k \begin{pmatrix} e^{ik'x'} & i k' x' \\ -e^{ik'x'} & i k' x' \end{pmatrix} < a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} > = 0$$

$$\Rightarrow < a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} > \propto \delta_{k',0}$$

Also bei räumlicher Homogenität muss

$$< a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} > = \delta_{k,k'} < a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} >$$

Seri!

Ziel: (i) Bei räumlicher Homogenität Transportgleichung unter Einfluss von externem Feld und Strom für  $< a_{k-\frac{k'}{2}}^+ a_{k+\frac{k'}{2}} >$

[ (ii) Allgemeine Gleichung für  $f_k(x)$  Boltzmann-Gleichung (nicht hier) ]

## Zusammen:

Strommechanismus:  
z.B. Elektron-Phonon  
Streuung

Elektr. E-Feld  
Kopplg.

Beitrag  
zu

Bezugswert. von  $a_k^+$ ,  $a_k$

Streudiagramm

## VIII. 2 Phononstreuung elektronischer Dichte

Wir sehen uns den Einfluss der Phononstreuung an  
Ein Band System an:

Hamiltonian

$$H_0 = \hbar \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_q \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q$$

$$H_{\text{elek-ph}} = \hbar \sum_{k,q} a_{k+q}^\dagger a_k (D_q b_q^\dagger + D_q^* b_q)$$

Bezugswert. ist die Heisenberg Bewegung (Ähnlichkeit mit  
 $\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} [A, H]$ , Elektron-Elektron Teil)

$$\partial_t \langle a_k^\dagger a_k \rangle |_{H_0} = 0 \quad \text{für Dichte}$$

$$\partial_t \langle a_k^\dagger a_k \rangle |_{H_{\text{elek-ph}}} = i \sum_q (D_q \langle b_q^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle + D_q^* \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle - D_q \langle b_q^\dagger a_k^\dagger a_{k+q} \rangle + D_q^* \langle b_q a_k^\dagger a_{k+q} \rangle)$$

Bezugswert für assistierte Streuung aufstellen!

$$\begin{aligned}
 \partial_t \langle b_1^\dagger a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle &= i(\epsilon_{k_1+k_2} - \epsilon_k + \omega_k) \langle b_1^\dagger a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle \\
 &+ i \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}}^\dagger \langle a_{k_1+k_2+\vec{q}}^\dagger a_k \rangle - i \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}}^\dagger \langle a_{k_1+k_2}^\dagger a_{k_1+\vec{q}}^\dagger a_{k_2} \rangle \\
 &+ i \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}} \langle b_1^\dagger b_1^\dagger a_{k_1+k_2+\vec{q}}^\dagger a_k \rangle - i \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}} \langle b_1^\dagger b_1^\dagger a_{k_1+\vec{q}}^\dagger a_{k_2} \rangle \\
 &+ i \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}}^\dagger \langle b_1^\dagger b_1 a_{k_1+k_2+\vec{q}}^\dagger a_k \rangle - i \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}}^\dagger \langle b_1^\dagger b_1 a_{k_1+\vec{q}}^\dagger a_{k_2} \rangle
 \end{aligned}$$

### Folgende Matrizen

1) Zweite Ordnung Born  $\langle b_1^{(H)} b_2^{(H)} a_3^\dagger a_4 \rangle \approx \langle b_1^{(H)} b_2 \rangle \langle a_3^\dagger a_4 \rangle$

2) Homogenitätsannahme  $\langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle = \delta_{k_1, k_2} \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_1} \rangle$

3) Bodannahme  $\langle b^\dagger b^\dagger \rangle = \langle b b \rangle = 0$

so wie  $\langle b_{k_1}^\dagger b_{k_2} \rangle = -\delta_{k_1, k_2} \langle b_{k_1}^\dagger b_{k_1} \rangle$

4) Achten Foch

$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle = \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \langle a_3^\dagger a_4 \rangle$$

$$- \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle$$

$$\partial_t \langle b_1^\dagger a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle = i(\epsilon_{k_1+k_2} - \epsilon_k + \omega_k) \langle b_1^\dagger a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle$$

$$+ i D_{\vec{q}}^\dagger \langle a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle (1 - \langle a_{k_1+k_2}^\dagger a_{k_1+k_2} \rangle)$$

$$+ i D_{-\vec{q}}^\dagger \langle b_1^\dagger b_1 \rangle (\langle a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle - \langle a_{k_1+k_2}^\dagger a_{k_1+k_2} \rangle)$$

$$\text{n.t. } \sigma_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$$

$$- \sigma_k \sigma_{k_1+k_2} + \sigma_k \sigma_{k_2}$$

$$\partial_t \langle b_1^\dagger a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle = i(\epsilon_{k_1+k_2} - \epsilon_k + \omega_k) \langle b_1^\dagger a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle \quad (A)$$

$$+ i D_{\vec{q}}^\dagger \sigma_k (1 - \sigma_{k_1+k_2}) (1 + n_{\vec{q}})$$

$$- i D_{\vec{q}}^\dagger \sigma_{k_1+k_2} (1 - \sigma_k) n_{\vec{q}}$$

Analys der komplex konjugierte Seite:

$$\partial_t \langle b_1 a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle = i(\epsilon_k - \epsilon_{k_1+k_2} - \omega_k) \langle b_1 a_{k_1+k_2}^\dagger a_k \rangle \quad (B)$$

$$+ i D_9^* \sigma_{k+3} (1 - \sigma_k) u_4$$

$$- i D_9^* \sigma_k (1 - \sigma_k) (1 + u_4)$$

Nicht stark, wie wenn wir Gleichung für  $\sigma_k$ !

=> Lösung der Gleichung in Markovnäherung  
Vernachlässigung von Schwächungseffekt:

Formel Lösung der Gleichung

$$\langle b_9^+ a_k^+ a_{k+3} \rangle(t) = i D_9 \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\epsilon_{k+3} - \epsilon_k + u_4)(t-t')} \underbrace{(\sigma_k(t') (1 - \sigma_{k+3}(t') (1 + u_4)) - \sigma_{k+3}(t') (1 - \sigma_k(t')) u_4)}_{\substack{\text{Grenzwert} \\ \text{des homogenen} \\ \text{Problems} \\ \text{Stark Oszill.}}} \underbrace{- \sigma_{k+3}(t') (1 - \sigma_k(t')) u_4}_{\substack{\text{Langsam veränderliche Größe} \\ \text{Tip: Schwach veränderliche Größe}}}$$

Markovnäherung!

$$= i D_9 (\sigma_k(t) (1 - \sigma_{k+3}(t)) (1 + u_4) - \sigma_{k+3}(t) (1 - \sigma_k(t)) u_4) \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\epsilon_{k+3} - \epsilon_k + u_4)(t-t')}$$

$$= \int_0^\infty ds e^{i(\epsilon_{k+3} - \epsilon_k + u_4)s}$$

$$\langle b_9^+ a_k^+ a_{k+3} \rangle = \pi i D_9 \delta(\epsilon_{k+3} - \epsilon_k + u_4) \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' e^{i(\epsilon_{k+3} - \epsilon_k + u_4)(t-t')}}_{\substack{\frac{1}{2} (2\pi) \delta(\epsilon_{k+3} - \epsilon_k + u_4) \\ \text{Feynman'sche}}} (\sigma_k(t) (1 - \sigma_{k+3}(t)) (1 + u_4) - \sigma_{k+3}(t) (1 - \sigma_k(t)) u_4)$$

quadratisch

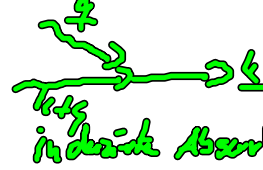
$$\langle b_9^+ a_{k+3}^+ a_k \rangle = \pi i D_9^* \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k+3} - u_4) (\sigma_k (1 - \sigma_{k+3}) u_4$$

Jetzt auch die Zinsen wie in der Skizze für  $\sigma_k$  einzeichnen  
 Einsetzen ergibt

$-\sigma_{k+1}(1-\sigma_k)(1+r_k)$   
 Einsetzen  $\propto \sigma_{k+1}$  Ausstrahlen  $\propto \sigma_k$

$$\partial_t \sigma_k |_{\text{ERP}} = + \sum_{\xi} 2\pi |D_{\xi}|^2 \delta(\xi - \xi_{k+1} - \omega_k) [\sigma_{k+1}(1-\sigma_k) \eta_{\xi} - \sigma_k(1-\sigma_{k+1})(1+r_k)]$$

$\xi_k > \xi_{k+1}$



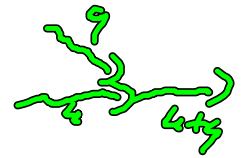
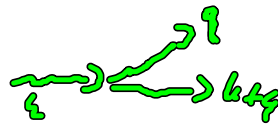
individuelle Absorbtion



spontane Emission

$$+ \sum_{\xi} 2\pi |D_{\xi}|^2 \delta(\xi - \xi_{k+1} + \omega_k) (\sigma_{k+1}(1-\sigma_k)(1+r_k) - \sigma_k(1-\sigma_{k+1}) \eta_{\xi})$$

$\xi_k < \xi_{k+1}$



Umkehrung

$$\partial_t \sigma_k = \underbrace{\Gamma_{k+1 \rightarrow k} \sigma_{k+1}}_{\text{Einströmen}} - \underbrace{\Gamma_{k \rightarrow k+1} \sigma_k}_{\text{Ausströmen}}$$