

# 4. Quantenstatistik

## 4.1. Dichtematrix - statistischer Operator

### 4.1.1. Erwartungswerte

(i) (bisher) Reine Zustände

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{\text{st}}$

Wahrscheinlichkeit für das Resultat  $|\alpha\rangle$  im reinen Zustand  $|\psi\rangle$

$$|\langle \alpha | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\text{Projektor}} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_\alpha | \psi \rangle = c_\alpha$$

inhärenter statistischer  
Charakter!

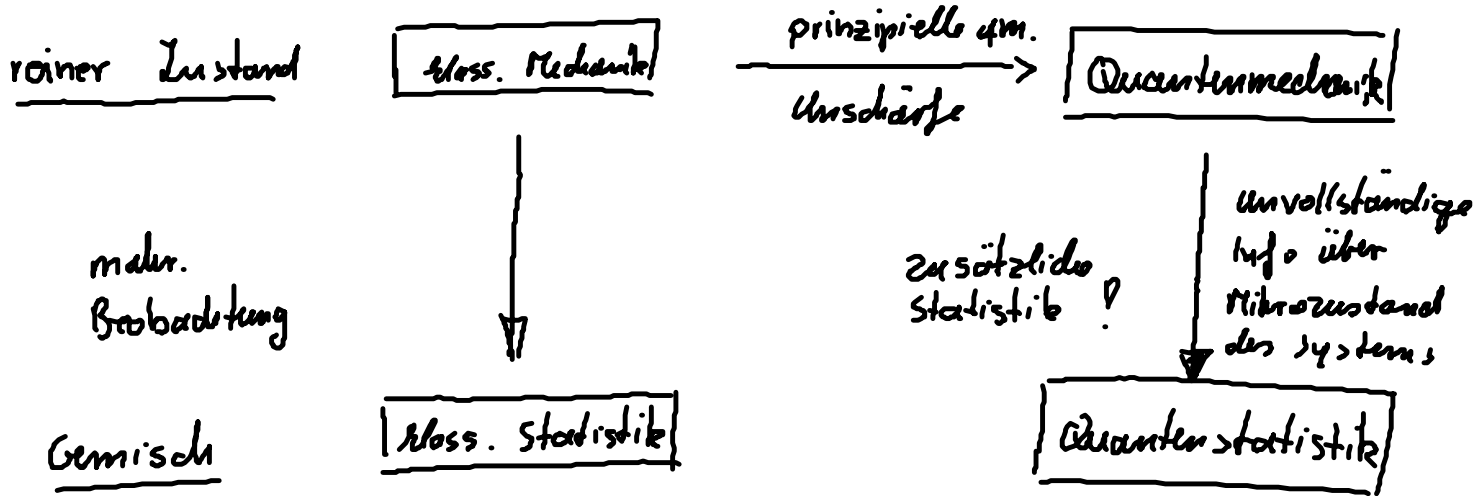
Erwartungswert von  $\hat{M}$  im Zustand  $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \hat{M} \rangle &= \langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \langle \psi | \hat{M} | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi \rangle \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \langle \psi | \alpha' \rangle \langle \alpha | \psi \rangle \underbrace{\langle \alpha' | \hat{M} | \alpha \rangle}_{M_{\alpha\alpha'}} \end{aligned}$$

falls  $|\alpha\rangle$  Eigenbasis

$$= \sum_{\alpha} c_{\alpha} M_{\alpha\alpha}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{M} \rangle &= \sum_{\alpha} \langle \alpha | \psi \rangle \underbrace{\langle \psi | \hat{M} | \alpha \rangle}_{P_{\psi}} \\ &= \text{tr}(P_{\psi} \hat{M}) \end{aligned}$$



(ii) Quantenmechanisches Gemisch

- unvollständige Info über Mikrozustand

also Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p_i$  über möglichen reinen Zustände  $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}^F$

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{M} | \psi_i \rangle \quad \text{wobei } \sum_i p_i = 1$$

$$= \sum_{i,j} p_i \langle \psi_i | \hat{M} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \psi_i \rangle$$

$$= \sum_{i,j} \langle \psi_j | \psi_i \rangle p_i \langle \psi_i | \hat{M} | \psi_j \rangle$$

$$= \sum_j \langle \psi_j | \hat{S} \hat{M} | \psi_j \rangle$$

$$\hat{S} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

↑  
statistischer Operator  
"Ordnungsmatrix"

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

(Vorsicht: Operator der Ladungsdichte wird mit  $\hat{\rho}$  bezeichnet.)

es gilt:  $\text{tr} \hat{\rho} = 1$

$$\left. \begin{array}{l} \hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho} \\ \text{tr} \hat{\rho}^2 < 1 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{(Gleichheit für reinen} \\ \text{Zustand: dort ein } p_i = 1 \text{ sonst } p_i = 0) \end{array}$$

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho} \text{ ist hermitesch}$$

Mittelwert eines Projektionsoperators  $| \psi_n \rangle \langle \psi_n |$

$$\text{tr} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{\rho} = \sum_i p_i | \langle \psi_n | \psi_i \rangle |^2 = \sum_i p_i |c_n|^2$$

$\hat{=}$  Wahrscheinlichkeit den Zustand  $| \psi_n \rangle$  bei Messung zu erhalten

Bem.: reine Zustände  $\rightarrow$  Kohärente Überlagerung von Wahrscheinlichkeitsamplituden

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_{\alpha \alpha'} \underbrace{\langle \psi | \alpha \rangle}_{\text{qm. Phasen}} \langle \alpha | M | \alpha' \rangle \underbrace{\langle \alpha' | \psi \rangle}_{\text{qm. Phasen}}$$

$\Rightarrow$  Interferenzterme falls  $M$  nicht diagonal in  $|\alpha\rangle$

Gemisch  $\rightarrow$  inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen  
 $\rightarrow$  keine Interferenz

### 4.1.2. Liouville von Neumann Gleichung

Zeitentwicklung der Dichtematrix  $\hat{\rho}$  im Schrödingerbild  
(Operatoren zeitunab.  
Zustände zeitab.)

$$\textcircled{*} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i\rangle = \hat{H} |\psi_i\rangle$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi_i| = \langle\psi_i| \hat{H}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \sum_i p_i (|\dot{\psi}_i\rangle \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle \langle\dot{\psi}_i|)$$

$$\textcircled{*} = -\frac{i}{\hbar} \sum_i p_i (\hat{H} |\psi_i\rangle \langle\psi_i| - |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \hat{H})$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]}$$

$\uparrow$

Liouville von Neumann Gleichung

Vorsicht: nicht verwechseln mit  
Bewegungsgleichung für  
Operatoren (dort anderes  
Vorzeichen)

- Quantenmechanisches Analogon zur Liouville Gleichung  
der klass. Mechanik

Bemerkung: • Für 1 Teilchen im 2-Niveau System (Basis besteht aus 2 Zuständen)

ist  $\hat{\rho}$  eine  $2 \times 2$  Matrix d.h. L.v. Neumann Gleichung liefert 4 Gleichungen

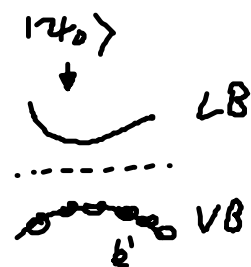
• Für Vielteilchensystem (HL mit 2 Bänder) wird Basis im Fockraum benötigt

### 4.1.3. Verteilungsfunktion der Elektronen/Löcher im HL

Betrachte  $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$  also Mittelwert der Besetzungszahl op.  
im gemischten Zustand  $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$

$|\varphi_i\rangle \in \mathcal{H}^F$ : mögliche Verteilung der Elektronen auf erlaubte Zustände  $k$  (reiner Zustand)

Bsp.: HL: Grundzustand bei  $T=0$



$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \text{tr} \hat{\rho} a_k^\dagger a_k$$

$$= \sum_i p_i \langle \varphi_i | a_k^\dagger a_k | \varphi_i \rangle$$

$$= \sum_i p_i n_k^i$$

$n_k^i \rightarrow$  Besetzung von  $k$  im Zustand  $|\varphi_i\rangle$   $n_k^i = 0, 1$

$$= f^e(k)$$

Maximum von  $f^e(k) : n_k^i = 1 \quad \forall i$

$$\Rightarrow f^e(k) = \sum_{i=1}^{\nu} p_i = 1$$

Minimum  $f_k^e = 0$

$\rightarrow f^e(k)$  ist die Wahrscheinlichkeit ein Elektron bei  $k$  zu finden

- im reinen Zustand  $f^e(k) = 0$  oder  $f^e(k) = 1$
- im Gemisch  $f^e(k) \in (0, 1)$
- im Gleichgewicht ist  $f(k)$  die Fermifunktion

( $\rightarrow$  später in GG Statistik)

Analog:  $\langle d_k^\dagger d_k \rangle = f^h(k)$

Bemerkung: Falls Spin als extra Quantenzahl betrachtet wird

$$\rightarrow f^e(k) = \frac{1}{2} \sum_s \langle a_{ks}^\dagger a_{ks} \rangle$$

## 4.2. Semiklassische Wechselwirkung mit Licht

- WW mit optischem Lichtfeld verursacht Abweichung der Elektronenverteilung vom Gleichgewicht

$\rightarrow$  zusätzlicher Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{opt}}$

Betrachte: Dipolkopplung an elektr. Feld

$$\hat{H}_{\text{opt}} = e \underline{r} \underline{E}(\underline{r}, t) \quad \text{wobei } \underline{E}(\underline{r}, t) \text{ z.B. Laserpulse}$$

extern aufgeprägt und klass. (Maxwell gl.) beschrieben

aber  $e \underline{r}$  als QM Dipol Operator behandelt

=> halbklassisch

### 4.2.1. Polarisation des Halbleiters

Quantenmechanisch beschriebene Dipoldichte

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

$\hat{\psi}^\dagger, \hat{\psi}$  sind Feldoperatoren

-> Definiere Polarisation  $P$   
als Erwartungswert des Dipoldichteoperators  $\hat{P}$

$$\begin{aligned} \rightarrow P(\underline{r}, t) &= \langle \hat{P} \rangle \\ \text{reelle gröÙe} & \\ &= \langle e \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}, t) \underline{r} \hat{\psi}(\underline{r}, t) \rangle \end{aligned}$$

• Blochdarstellung

$$\hat{\psi}(\underline{r}, t) = \sum_{n\underline{k}} a_{n\underline{k}} \psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

Blochwelle

$$\hat{P}(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{n\underline{k}' \\ n'\underline{k}'}} a_{n\underline{k}}^+ a_{n'\underline{k}'} \underbrace{\psi_{n\underline{k}}^*(\underline{r}) e_{\underline{r}} \psi_{n'\underline{k}'}}_{e^{i\underline{k}'\underline{r}}}$$

• Fouriertrafo  $\hat{P}(\underline{q}, t) = \int d^3r \hat{P}(\underline{r}, t) e^{-i\underline{q}\underline{r}}$

• Def: Dipolmatrixelement  $\mu_{nn'}$

$$\mu_{nn'}(\underline{k}) = \frac{1}{V_{EZ}} \int d^3r u_{n\underline{k}}^{(n)} e_{\underline{r}} u_{n'\underline{k}}(\underline{r})$$

(oft auch mit  $a_{nn'}$  bezeichnet)

• Näherung: schwache  $\underline{k}$  Abhängigkeit der Blochfunktionen  $u_{n\underline{k}}$

...  
längliche  
Rechnung

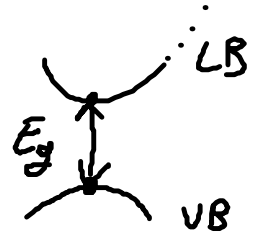
$$\Rightarrow P(\underline{q}, t) = - \sum_{nn'\underline{k}} \mu_{nn'}(\underline{k}) \langle a_{n\underline{k}}^+ a_{n'\underline{k}+\underline{q}} \rangle$$

Näherung für optischen Grenzfall:

(1)  $\underline{q} \approx 0$  (Impuls der Photonen klein gegenüber Quasimpuls der Elektronen)



(2) Bandkantenoptik  $\hbar\omega \approx E_g$



→ nur Interbandübergänge (zwischen LB und VB)

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

konstantes Dipolmatrixelement

Elektron-Loch Bild:

$$\Rightarrow P^{\text{inter}}(q, t) = P(0, t) \equiv P(t) = \sum_{\underline{k}} \mu \left( \underbrace{\langle d_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \rangle}_{p(\underline{k}, t)} + \underbrace{\langle a_{\underline{k}}^+ d_{\underline{k}}^+ \rangle}_{p^*(\underline{k}, t)} \right)$$

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

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

$\equiv$  mikroskopische Interband  
Polarisation eines Zustandes  $\underline{k}$