

## Bài 7

### Tương tác nhiều hạt trong chất rắn

Huỳnh Thanh Đức

04/11/2022

# Nội dung

- 9 Tương tác điện tử - phonon
  - ▶ Hamiltonian tương tác điện tử - phonon
  - ▶ Phương trình chuyển động
  - ▶ Va chạm điện tử - phonon
- 10 Tương tác Coulomb điện tử - điện tử
  - ▶ Hamiltonian tương tác Coulomb
  - ▶ Phương trình chuyển động
  - ▶ Gần đúng Hartree-Fock
  - ▶ Tái chuẩn hóa năng lượng dải
  - ▶ Exciton
  - ▶ Số hạng tương quan
  - ▶ Va chạm điện tử - điện tử
- 11 Động học của hệ bán dẫn bị kích thích quang

# Tài liệu tham khảo

- M. Kira and S. W. Koch, *Semiconductor Quantum Optics* (Cambridge University Press, 2012).
- H. Haug, S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, 2005).
- W. W. Chow and S. W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals* (Springer, 1999).

## IX. Tương tác điện tử - phonon

# Hamiltonian tương tác điện tử - phonon

Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ hai mô tả hệ điện tử tương tác với phonon:

$$\begin{aligned} H &= H^0 + H^{ph} + H^{e-ph} \\ &= \sum_{\lambda \mathbf{k}} \varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) a_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} a_{\lambda \mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left( b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) \\ &\quad + \sum_{\lambda \lambda' \mathbf{k} \mathbf{q}} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\lambda \lambda'} a_{\lambda \mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\lambda' \mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \end{aligned} \quad (1)$$

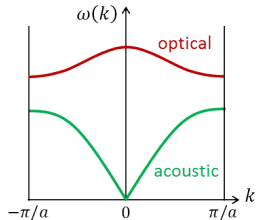
Các toán tử sinh, hủy điện tử tuân theo các hệ thức phản giao hoán

$$\{a_{\lambda \mathbf{k}}, a_{\lambda' \mathbf{k}'}\} = \{a_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger}, a_{\lambda' \mathbf{k}'}^{\dagger}\} = 0, \quad \{a_{\lambda \mathbf{k}}, a_{\lambda' \mathbf{k}'}^{\dagger}\} = \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2)$$

Các toán tử sinh, hủy phonon tuân theo các hệ thức giao hoán

$$[b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}] = [b_{\mathbf{q}}^{\dagger}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = 0, \quad [b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \quad (3)$$

# Hamiltonian tương tác điện tử - phonon



Hệ thức tán sắc của phonon ( $\mathbf{q}$  nhỏ):

- Phonon âm:  $\omega_{\mathbf{q}} \approx c_a |\mathbf{q}|$
- Phonon quang:  $\omega_{\mathbf{q}} \approx \omega_0$

Yếu tố ma trận tương tác điện tử - phonon là

$$g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'} = g_{\mathbf{q}} \langle u_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}} | u_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \quad (4)$$

trong đó  $g_{\mathbf{q}}$  được cho bởi:

- Phonon âm:

$$g_{\mathbf{q}}^2 = \frac{D_a^2 \hbar |\mathbf{q}|}{2\rho_M c_a} \quad (5)$$

- Phonon quang:

$$g_{\mathbf{q}}^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{\mathbf{q}^2} \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (6)$$

## Phương trình chuyển động

Từ phương trình chuyển động (Heisenberg picture) cho  $a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}}$  ta có phương trình chuyển động cho đại lượng trung bình  $\langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle$ :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H^0 + H^{ph} + H^{e-ph}, a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}}] \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})) \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu\mathbf{q}} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\lambda} \left( \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{-\mathbf{q}}^\dagger \rangle \right) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu\mathbf{q}} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda'\mu} \left( \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}-\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}-\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}}^\dagger \rangle \right)\end{aligned}\tag{7}$$

trong đó, các số hạng trung bình 3 toán tử được cho bởi phương trình

$$\frac{d}{dt}\langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H^0 + H^{ph} + H^{e-ph}, a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}}] \rangle$$

## Phương trình chuyển động

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle &= \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_\mu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k}) - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu\mathbf{q}'} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\mu} \langle a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}}) \rangle \\
 &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu\mathbf{q}'} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^{\lambda'\nu} \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}-\mathbf{q}'} (b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + b_{\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}'}^\dagger) \rangle \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu\nu'\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\mathbf{k}'}^{\nu\nu'} \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} a_{\nu'\mathbf{k}'} \rangle
 \end{aligned}$$

Bể phonon cân bằng nhiệt động

$$N_{\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mathbf{q}}/k_B T} - 1}$$

Gần đúng trường trung bình:

$$\langle a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}} \rangle \approx \langle a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \langle b_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}} \rangle = 0$$

$$\langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}-\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} \rangle \approx \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \rangle \langle b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} \rangle = 0$$

$$\langle a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{-\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} \rangle \approx \langle a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \langle b_{-\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} \rangle \approx \langle a_{\nu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle N_{\mathbf{q}} \delta_{-\mathbf{q}',\mathbf{q}}$$

$$\langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}-\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}'}^\dagger \rangle \approx \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle (N_{\mathbf{q}} + 1) \delta_{-\mathbf{q}',\mathbf{q}}$$

$$\langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} a_{\nu'\mathbf{k}'} \rangle \approx \langle a_{\nu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'}$$



## Phương trình chuyển động

Phương trình chuyển động cho số hạng trung bình 3 toán tử trở thành

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle &= \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\mu(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k}) - \hbar\omega_{\mathbf{q}})\langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\mu} \langle a_{\nu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle N_{\mathbf{q}} \\ &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'\nu} \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle (N_{\mathbf{q}} + 1) \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu\nu'} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\nu'} \langle a_{\nu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\nu'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle\end{aligned}\tag{8}$$

Phương trình trên có dạng

$$\dot{y}(t) = i\omega y(t) + b(t)\tag{9}$$

Nghiệm của nó là:

$$y(t) = y(-\infty) + e^{i\omega t} \int_{-\infty}^t b(t') e^{-i\omega t'} dt'\tag{10}$$

## Phương trình chuyển động

Với điều kiện đầu  $y(-\infty) = 0$  và giả sử  $b(t)$  biến đổi chậm (gần đúng Markov)

$$\Rightarrow y(t) \approx b(t) \int_{-\infty}^t e^{i\omega(t-t')} dt' = b(t) \int_0^{\infty} e^{i\omega t'} dt' = b(t) \mathcal{D}(\omega) \quad (11)$$

trong đó

$$\mathcal{D}(\omega) = \int_0^{\infty} e^{i\omega t} dt \simeq \frac{i}{\omega + i\gamma}$$

Áp dụng vào (8) ta nhận được

$$\begin{aligned} \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\lambda'\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle \approx \frac{i}{\hbar} \mathcal{D} \left( \frac{\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})}{\hbar} - \omega_{\mathbf{q}} \right) & \left[ \sum_{\nu} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\mu} \langle a_{\nu\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle N_{\mathbf{q}} \right. \\ & \left. - \sum_{\nu} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'\nu} \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle (N_{\mathbf{q}} + 1) + \sum_{\nu\nu'} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\nu'} \langle a_{\nu\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\nu'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \right] \quad (12) \end{aligned}$$

## Phương trình chuyển động

Thay (12) vào (7) ta rút ra phương trình chuyển động cho các yếu tố ma trận mật độ rút gọn  $\rho_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}) = \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle$  :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}) = & \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})) \rho_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu\mathbf{q}} \left\{ \mathcal{D} \left( \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\lambda'-} \right) g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\lambda} \sum_{\nu} \left( g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\mu} \rho_{\lambda'\nu}(\mathbf{k}) N_{\mathbf{q}} \right. \right. \\ & - g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'\nu} \rho_{\nu\mu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) (N_{\mathbf{q}} + 1) + \sum_{\nu'} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\nu'} \rho_{\lambda'\nu}(\mathbf{k}) \rho_{\nu'\mu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \Big) \\ & + \mathcal{D} \left( \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\lambda'+} \right) g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\lambda} \sum_{\nu} \left( g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\mu} \rho_{\lambda'\nu}(\mathbf{k}) (N_{\mathbf{q}} + 1) - g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'\nu} \rho_{\nu\mu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) N_{\mathbf{q}} \right. \\ & - \sum_{\nu'} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\nu'} \rho_{\lambda'\nu}(\mathbf{k}) \rho_{\nu'\mu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \Big) - \mathcal{D} \left( \omega_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda\mu-} \right) g_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda'\mu} \sum_{\nu} \left( g_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu\lambda} \rho_{\mu\nu}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) N_{\mathbf{q}} \right. \\ & - g_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\nu} \rho_{\nu\lambda}(\mathbf{k}) (N_{\mathbf{q}} + 1) + \sum_{\nu'} g_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu\nu'} \rho_{\mu\nu}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rho_{\nu'\lambda}(\mathbf{k}) \Big) \\ & - \mathcal{D} \left( \omega_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda\mu+} \right) g_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda'\mu} \sum_{\nu} \left( g_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu\lambda} \rho_{\mu\nu}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) (N_{\mathbf{q}} + 1) - g_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\mu\nu} \rho_{\nu\lambda}(\mathbf{k}) N_{\mathbf{q}} \right. \\ & \left. \left. - \sum_{\nu'} g_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu\nu'} \rho_{\mu\nu}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rho_{\nu'\lambda}(\mathbf{k}) \right) \right\} \end{aligned}$$

trong đó

$$\omega_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu\nu\pm} = \frac{\varepsilon_\mu(\mathbf{k})}{\hbar} - \frac{\varepsilon_\nu(\mathbf{k}')}{\hbar} \pm \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$$

## Va chạm điện tử - phonon

Xét trường hợp mô hình bán dẫn hai dải, sử dụng hình thức luận điện tử - lỗ trống, các phương trình chuyển động có thể gần đúng viết dưới dạng

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p_{\mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar} (E_g + \varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h) p_{\mathbf{k}} - \frac{p_{\mathbf{k}}}{T_2(\mathbf{k})} \\ \frac{d}{dt}n_{\mathbf{k}}^{\mu} &= \Gamma_{\text{in}}^{\mu}(\mathbf{k})(1 - n_{\mathbf{k}}^{\mu}) - \Gamma_{\text{out}}^{\mu}(\mathbf{k})n_{\mathbf{k}}^{\mu} \quad \text{với } \mu = e, h\end{aligned}\tag{13}$$

trong đó

$$p_{\mathbf{k}} = \rho_{cv}(\mathbf{k}), \quad n_{\mathbf{k}}^e = \rho_{cc}(\mathbf{k}), \quad n_{\mathbf{k}}^h = 1 - \rho_{vv}(\mathbf{k})$$

$$\begin{aligned}T_2^{-1}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu=e,h} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}}^2 \left[ \mathcal{D} \left( \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu}}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}}{\hbar} - \omega_{\mathbf{q}} \right) (N_{\mathbf{q}} + 1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{D} \left( \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu}}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}}{\hbar} + \omega_{\mathbf{q}} \right) (N_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}) \right]\end{aligned}$$

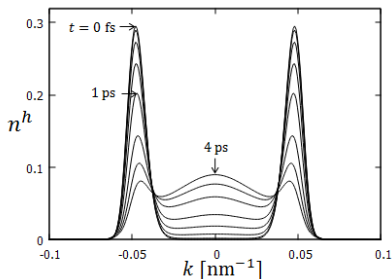
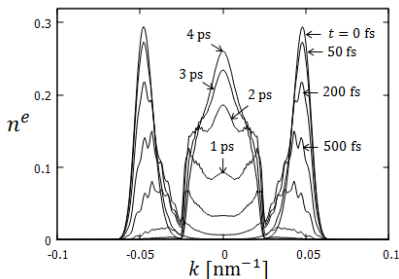
$$\Gamma_{\text{in}}^{\mu}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}}^2 \left[ \delta \left( \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu}}{\hbar} - \omega_{\mathbf{q}} \right) (N_{\mathbf{q}} + 1) + \delta \left( \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu}}{\hbar} + \omega_{\mathbf{q}} \right) N_{\mathbf{q}} \right] n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}$$

$$\Gamma_{\text{out}}^{\mu}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}}^2 \left[ \delta \left( \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu}}{\hbar} - \omega_{\mathbf{q}} \right) N_{\mathbf{q}} + \delta \left( \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}}{\hbar} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu}}{\hbar} + \omega_{\mathbf{q}} \right) (N_{\mathbf{q}} + 1) \right] (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu})$$

## Va chạm điện tử - phonon: Hồi phục về cân bằng

Tính toán mô phỏng quá trình va chạm điện tử với phonon quang dọc (LO) cho hệ bán dẫn GaAs một chiều. Giả sử bể phonon ở trạng thái cân bằng nhiệt động, tức là tuân theo phân bố Bose-Einstein, tại nhiệt độ  $T = 50$  K. Tán sắc năng lượng của LO phonon là  $\hbar\omega_q = 36$  meV.

Tại thời điểm  $t = 0$  phân bố không cân bằng của các điện tử và lỗ trống được tạo ra bởi kích thích quang.



Tiến triển theo thời gian của phân bố điện tử và lỗ trống

Khi động năng điện tử hoặc lỗ trống nhỏ hơn năng lượng LO phonon thì tốc độ hồi phục sẽ chậm lại.

## Va chạm điện tử - phonon: Hồi phục về cân bằng

Đôi khi các số hạng hồi phục của phân bố và hủy pha của độ phân cực được mô tả hiện tượng luận bằng cách đưa vào thông số thời gian hồi phục  $T_1$  và thời gian dephasing  $T_2$ , tức là

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p_{\mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar} \left( E_g + \varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h \right) p_{\mathbf{k}} - \frac{p_{\mathbf{k}}}{T_2} \\ \frac{d}{dt}n_{\mathbf{k}}^{\mu} &= -\frac{1}{T_1^{\mu}} (n_{\mathbf{k}}^{\mu} - f_{\mathbf{k}}^{\mu}) \quad \text{với } \mu = e, h\end{aligned}\tag{14}$$

trong đó  $f_{\mathbf{k}}^{\mu} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} - \varepsilon_{\text{cp}})/k_B T} + 1}$  là phân bố Fermi-Dirac có cùng mật độ như phân bố  $n_{\mathbf{k}}^{\mu}$  tại thời điểm tức thời

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\mu} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^{\mu}\tag{15}$$

## X. Tương tác Coulomb điện tử - điện tử

## Hamiltonian tương tác Coulomb

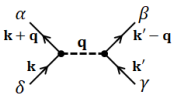
Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ hai cho hệ nhiều điện tử tương tác Coulomb là

$$H = H^0 + H^{\text{Coul}} = \sum_{\lambda \mathbf{k}} \varepsilon_{\lambda \mathbf{k}} a_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda \mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{q}} \sum_{\alpha \beta \gamma \delta} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{\alpha \beta \gamma \delta} a_{\alpha \mathbf{k} + \mathbf{q}}^\dagger a_{\beta \mathbf{k}' - \mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma \mathbf{k}} a_{\delta \mathbf{k}'} \quad (16)$$

Các toán tử sinh, hủy điện tử tuân theo các hệ thức phản giao hoán

$$\{a_{\lambda \mathbf{k}}, a_{\lambda' \mathbf{k}'}\} = \{a_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger, a_{\lambda' \mathbf{k}'}^\dagger\} = 0, \quad \{a_{\lambda \mathbf{k}}, a_{\lambda' \mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (17)$$

Các yếu tố ma trận Coulomb là

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{\alpha \beta \gamma \delta} = \langle \psi_{\alpha \mathbf{k} + \mathbf{q}} \psi_{\beta \mathbf{k}' - \mathbf{q}} | V_{ee} | \psi_{\gamma \mathbf{k}} \psi_{\delta \mathbf{k}'} \rangle = \quad (18)$$


$$= \int \frac{d^3 r}{V} \int \frac{d^3 r'}{V} e^{-i \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} u_{\alpha \mathbf{k} + \mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) u_{\beta \mathbf{k}' - \mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{\gamma \mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{\delta \mathbf{k}'}(\mathbf{r}')$$

trong đó

$$V_{ee}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}|} \quad (19)$$

Biến đổi Fourier của thế Coulomb là

$$V_{ee}(\mathbf{q}) = \int \frac{d^3 r}{V} V_{ee}(\mathbf{r}) e^{-i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \frac{e^2}{\epsilon V} \int d^3 r \frac{1}{|\mathbf{r}|} e^{-i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon V} \frac{1}{\mathbf{q}^2} \quad (20)$$



# Hamiltonian tương tác Coulomb

Biến đổi Fourier ngược:

$$V_{ee}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{ee}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (21)$$

Thay (21) vào (18) và đổi ký hiệu  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_i + \mathbf{r}$  ta được

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{\alpha\beta\gamma\delta} &= \int \frac{d^3r}{V} \int \frac{d^3r'}{V} \sum_{\mathbf{q}'} V_{ee}(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} u_{\alpha\mathbf{k} + \mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) u_{\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{\beta\mathbf{k}' - \mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') u_{\gamma\mathbf{k}'}(\mathbf{r}') \\ &\simeq \frac{1}{N^2} \sum_{i,j}^N \sum_{\mathbf{q}'} V_{ee}(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad \text{Gần đúng sóng dài: } q \ll \frac{2\pi}{a} \\ &\quad \times \int_{V_{\text{cell}}} \frac{d^3r}{V_{\text{cell}}} u_{\alpha\mathbf{k} + \mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) u_{\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \int_{V_{\text{cell}}} \frac{d^3r'}{V_{\text{cell}}} u_{\beta\mathbf{k}' - \mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') u_{\gamma\mathbf{k}'}(\mathbf{r}') \end{aligned}$$

Sử dụng hệ thức  $\sum_i^N e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_i} = N \delta_{\mathbf{q}', \mathbf{q}}$

ta thu được các yếu tố ma trận Coulomb:

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{\alpha\beta\gamma\delta} = V_{ee}(\mathbf{q}) \langle u_{\alpha\mathbf{k} + \mathbf{q}} | u_{\delta\mathbf{k}} \rangle \langle u_{\beta\mathbf{k}' - \mathbf{q}} | u_{\gamma\mathbf{k}'} \rangle \quad (22)$$

## Phương trình chuyển động

Từ phương trình chuyển động Heisenberg (Heisenberg picture) cho  $a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}}$  ta rút ra phương trình chuyển động cho đại lượng trung bình  $\langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle$ :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H^0 + H^{\text{Coul}}, a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}}] \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})) \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\alpha\beta\gamma} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}^{\alpha\beta\gamma\lambda} \langle a_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\beta\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma\mathbf{k}'} a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\alpha\gamma\delta} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\alpha\lambda'\gamma\delta} \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\alpha\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\delta\mathbf{k}'} \rangle\end{aligned}\tag{23}$$

Gần đúng giá trị trung bình 4 toán tử như tích của 2 giá trị trung bình 2 toán tử (gần đúng Hartree-Fock):

$$\begin{aligned}\langle a_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\beta\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma\mathbf{k}'} a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle &\simeq -\langle a_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \langle a_{\beta\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} \\ \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\alpha\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\delta\mathbf{k}'} \rangle &\simeq \langle a_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\gamma\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\delta\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\end{aligned}\tag{24}$$

## Phương trình chuyển động: Gần đúng Hartree-Fock

Thay (24) vào (23) ta nhận được

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle a_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda' \mathbf{k}} \rangle &= \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})) \langle a_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda' \mathbf{k}} \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} \left[ \Sigma_{\mu \lambda}(\mathbf{k}) \langle a_{\mu \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda' \mathbf{k}} \rangle - \Sigma_{\lambda' \mu}(\mathbf{k}) \langle a_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger a_{\mu \mathbf{k}} \rangle \right] \end{aligned}$$

trong đó

$$\Sigma_{\mu \nu}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha \beta \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}}^{\alpha \mu \beta \nu} \langle a_{\alpha \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\beta \mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \quad (25)$$

Định nghĩa đại lượng ma trận mật độ rút gọn  $\rho_{\lambda \lambda'}(\mathbf{k}) = \langle a_{\lambda' \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda \mathbf{k}} \rangle$ , phương trình chuyển động trong gần đúng Hartree-Fock là

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\lambda \lambda'}(\mathbf{k}) &= -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})) \rho_{\lambda \lambda'}(\mathbf{k}) \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} (\Sigma_{\lambda \mu}(\mathbf{k}) \rho_{\mu \lambda'}(\mathbf{k}) - \rho_{\lambda \mu}(\mathbf{k}) \Sigma_{\mu \lambda'}(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (26)$$

và  $\Sigma_{\mu \nu}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha \beta \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}}^{\alpha \mu \beta \nu} \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta \alpha}$  là năng lượng riêng trao đổi.

## Phương trình chuyển động: Tái chuẩn hóa năng lượng dải

Xét mô hình bán dẫn hai dải và sử dụng hình thức luận điện tử - lỗ trống, phương trình chuyển động (26) trở thành

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p_{\mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar} (E_g + e_{\mathbf{k}}^e + e_{\mathbf{k}}^h) p_{\mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar} \Sigma_{cv}(\mathbf{k})(n_{\mathbf{k}}^e + n_{\mathbf{k}}^h - 1) \\ \frac{d}{dt}n_{\mathbf{k}}^{\mu} &= -\frac{2}{\hbar} \text{Im} [\Sigma_{cv}(\mathbf{k})p_{\mathbf{k}}^*] \quad \text{với} \quad \mu = e, h\end{aligned}\tag{27}$$

trong đó

$$p_{\mathbf{k}} = \rho_{cv}(\mathbf{k}), \quad n_{\mathbf{k}}^e = \rho_{cc}(\mathbf{k}), \quad n_{\mathbf{k}}^h = 1 - \rho_{vv}(\mathbf{k})$$

$$\Sigma_{cv}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{ee}(\mathbf{q}) p_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$$

Năng lượng điện tử, lỗ trống và khe dải tái chuẩn hóa được cho bởi:

$$e_{\mathbf{k}}^e = \varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_c(0) - \sum_{\mathbf{q}} V_{ee}(\mathbf{q}) n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e$$

$$e_{\mathbf{k}}^h = -\varepsilon_v(\mathbf{k}) + \varepsilon_v(0) - \sum_{\mathbf{q}} V_{ee}(\mathbf{q}) n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^h$$

$$E_g = \varepsilon_c(0) - \varepsilon_v(0) + \sum_{\mathbf{q}} V_{ee}(\mathbf{q})$$

## Exciton

Giả sử tán sắc năng lượng có dạng parabolic  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ ,  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^h = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$ .

Xét giới hạn  $n_{\mathbf{k}}^e = n_{\mathbf{k}}^h \simeq 0$ , phương trình (27) có dạng

$$i\hbar \frac{d}{dt} p_{\mathbf{k}}(t) = \left( E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \right) p_{\mathbf{k}}(t) - \sum_{\mathbf{k}'} V_{ee}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') p_{\mathbf{k}'}(t) \quad (28)$$

trong đó  $m_r = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$  là khối lượng rút gọn.

Biến đổi Fourier phương trình (28) vào không gian thực ta được phương trình Wannier phụ thuộc thời gian cho exciton

$$i\hbar \frac{d}{dt} p(\mathbf{r}, t) = \left[ E_g - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_r} - V_{ee}(\mathbf{r}) \right] p(\mathbf{r}, t) \quad (29)$$

Phương trình Wannier dừng có dạng

$$- \left[ \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_r} + V_{ee}(\mathbf{r}) \right] \psi_n^X(\mathbf{r}) = E_n^b \psi_n^X(\mathbf{r}) \quad (30)$$

$E_n^b$  là năng lượng liên kết exciton.

# Exciton

Với thế Coulomb  $V_{ee}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon|\mathbf{r}|}$  phương trình Wannier (30) có nghiệm

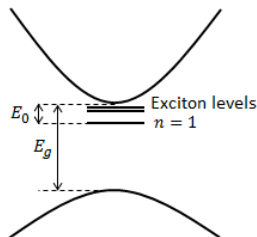
$$E_n^b = -\frac{E_0}{n^2} \quad \text{với } n = 1, 2, 3... \quad (31)$$

trong đó

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_r a_0^2} \quad \text{và} \quad a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon}{e^2 m_r}$$

Năng lượng liên kết, bán kính exciton  
và năng lượng khe dải của một số vật liệu

	GaAs	GaSb	InP	InAs
$E_0$ [meV]	4.2	1.7	3.2	1.2
$a_0$ [nm]	13	16	15	14
$E_g$ [eV]	1.52	0.81	1.42	0.45



## Xa hơn gần đúng Hartree-Fock

Ta minh họa phương trình chuyển động (23) dưới dạng

$$\frac{d}{dt} \text{[diagram: oval with 2 dots]} = i\omega \text{[diagram: oval with 2 dots]} + V \text{[diagram: circle with 4 dots]} \quad (32)$$

Trong gần đúng Hartree-Fock, trung bình bốn toán tử được gần đúng bởi tích của hai trung bình hai toán tử

$$\text{[diagram: circle with 4 dots]} \cong \text{[diagram: oval with 2 dots]} \text{[diagram: oval with 2 dots]}$$

Định nghĩa số hạng tương quan là phần đóng góp vượt ra khỏi gần đúng Hartree-Fock:

$$\delta \text{[diagram: circle with 4 dots]} = \text{[diagram: circle with 4 dots]} - \underbrace{\text{[diagram: oval with 2 dots]} \text{[diagram: oval with 2 dots]}}_{\text{Hartree-Fock}} \quad (33)$$

Correlations

Phương trình chuyển động tính đến số hạng tương quan là

$$\frac{d}{dt} \text{[diagram: oval with 2 dots]} = i\omega \text{[diagram: oval with 2 dots]} + V \underbrace{\text{[diagram: oval with 2 dots]} \text{[diagram: oval with 2 dots]}}_{\text{Hartree-Fock}} + \delta \text{[diagram: circle with 4 dots]} \quad (34)$$

Correlations

# Số hạng tương quan

Phương trình chuyển động cho số hạng tương quan là:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \delta \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} &= \frac{d}{dt} \left[ \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} - \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \right] \\&= \frac{d}{dt} \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} - \frac{d}{dt} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \\&= i\omega \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} + V \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} - i\omega \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} - V \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \\&= i\omega \delta \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} + V \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} - V \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \bullet \text{---} \end{array}\end{aligned} \tag{35}$$



## Số hạng tương quan

Làm gần đúng các số hạng trung bình 6 toán tử và 4 toán tử bằng tích của các trung bình 2 toán tử, ta được phương trình cho số hạng tương quan

$$\frac{d}{dt} \delta \text{ (4 dots) } = i\omega \delta \text{ (4 dots) } + V \text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) } \quad (36)$$

Áp dụng gần đúng Markov, nghiệm của phương trình (36) có dạng

$$\delta \text{ (4 dots) } \equiv V \mathcal{D}(\omega) \text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) } \quad (37)$$

Thay (37) vào (34) ta nhận được phương trình

$$\frac{d}{dt} \text{ (2 dots) } = i\omega \text{ (2 dots) } + V \underbrace{\text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) }}_{\text{Hartree-Fock}} + V^2 \mathcal{D}(\omega) \underbrace{\text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) } \text{ (2 dots) }}_{\text{Correlations}} \quad (38)$$

## Va chạm điện tử - điện tử

Trong mô hình bán dẫn 2 dải, dưới hình thức luận điện tử - lỗ trống, các phương trình chuyển động gần đúng có dạng

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p_{\mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar}(E_g + e_{\mathbf{k}}^e + e_{\mathbf{k}}^h)p_{\mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar}\Sigma_{cv}(\mathbf{k})(n_{\mathbf{k}}^e + n_{\mathbf{k}}^h - 1) - \frac{p_{\mathbf{k}}}{T_2(\mathbf{k})} \\ \frac{d}{dt}n_{\mathbf{k}}^{\mu} &= -\frac{2}{\hbar}\text{Im}[\Sigma_{cv}(\mathbf{k})p_{\mathbf{k}}^*] + \Gamma_{\text{in}}^{\mu}(\mathbf{k})(1 - n_{\mathbf{k}}^{\mu}) - \Gamma_{\text{out}}^{\mu}(\mathbf{k})n_{\mathbf{k}}^{\mu}, \quad \mu = e, h\end{aligned}\tag{39}$$

trong đó

$$\begin{aligned}T_2^{-1}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\hbar} \sum_{\mu=e,h} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} V_{ee}(\mathbf{q}) (V_{ee}(\mathbf{q}) - V_{ee}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) D \left( \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} + \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\mu} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \right) \\ &\quad \times \left[ n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} \left( 1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \right) \left( 1 - n_{\mathbf{k}'}^{\mu} \right) + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} n_{\mathbf{k}'}^{\mu} \left( 1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} \right) - p_{\mathbf{k}'}^* p_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \sum_{\mu=e,h} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} V_{ee}^2(\mathbf{q}) D \left( \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \right) \\ &\quad \times \left[ n_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} \left( 1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \right) \left( 1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}} \right) + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}} \left( 1 - n_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} \right) - p_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^* p_{\mathbf{k}'} \right]\end{aligned}$$

# Va chạm điện tử - điện tử

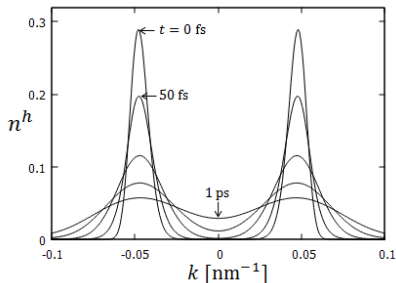
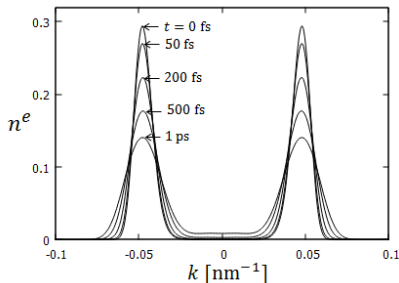
$$\Gamma_{\text{in}}^{\mu}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \left[ V_{\text{ee}}(\mathbf{q}) (V_{\text{ee}}(\mathbf{q}) - V_{\text{ee}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \delta \left( \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\mu} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} \right) n_{\mathbf{k}'}^{\mu} \left( 1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} \right) \right. \\ \left. + V_{\text{ee}}^2(\mathbf{q}) \delta \left( \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} + \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} \right) n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}} \left( 1 - n_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} \right) \right] n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}$$

$$\Gamma_{\text{out}}^{\mu}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \left[ V_{\text{ee}}(\mathbf{q}) (V_{\text{ee}}(\mathbf{q}) - V_{\text{ee}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \delta \left( \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\mu} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} \right) (1 - n_{\mathbf{k}'}^{\mu}) n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\mu} \right. \\ \left. + V_{\text{ee}}^2(\mathbf{q}) \delta \left( \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} + \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\mu} \right) (1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\bar{\mu}}) n_{\mathbf{k}'}^{\bar{\mu}} \right] (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu})$$

## Va chạm điện tử - điện tử: Hồi phục về cân bằng

Tính toán mô phỏng quá trình va chạm điện tử - điện tử cho hệ bán dẫn GaAs một chiều với thế Coulomb 1 chiều hiệu dụng có dạng

$$V_{ee}^{1D}(r) = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{|r| + b}$$

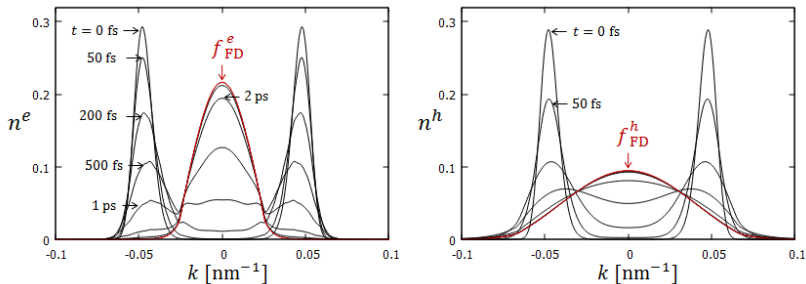


Tiến triển theo thời gian của phân bố điện tử và lỗ trống

Mật độ điện tử càng cao thì tốc độ hồi phục càng nhanh.

# Hồi phục về cân bằng do va chạm Coulomb và phonon

Tính toán mô phỏng quá trình hồi phục do cả hai cơ chế va chạm cho hệ bán dẫn GaAs một chiều. Bề phonon quang dọc được giữ ở cân bằng nhiệt động tại nhiệt độ  $T = 50$  K.



Tiến triển theo thời gian của phân bố điện tử và lỗ trống

Va chạm điện tử - điện tử và điện tử - phonon dẫn đến sự hồi phục của phân bố ban đầu về phân bố cân bằng nhiệt động Fermi-Dirac.

## XI. Động học của hệ bán dẫn bị kích thích quang

## Hamiltonian

Xét hệ chất rắn tương tác với ánh sáng có tính đến tương tác nhiều hạt Coulomb và điện tử - phonon. Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ 2 là

$$H = H^0 + H^{e-L} + H^{\text{Coul}} + H^{ph} + H^{e-ph} \quad (40)$$

trong đó

$$H^0 = \sum_{\lambda \mathbf{k}} \varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) a_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} a_{\lambda \mathbf{k}}$$

$$H^{e-L} = e\mathbf{E}(t) \cdot \sum_{\lambda \lambda' \mathbf{k}} \boldsymbol{\xi}_{\lambda \lambda'}(\mathbf{k}) a_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} a_{\lambda' \mathbf{k}} + ie\mathbf{E}(t) \cdot \sum_{\lambda \mathbf{k} \mathbf{k}'} \nabla_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} a_{\lambda \mathbf{k}'}$$

$$H^{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{q}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_1 \mathbf{k} + \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\lambda_2 \mathbf{k}' - \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\lambda_3 \mathbf{k}} a_{\lambda_4 \mathbf{k}'}$$

$$H^{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2})$$

$$H^{e-ph} = \sum_{\lambda \lambda' \mathbf{k} \mathbf{q}} g_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\lambda \lambda'} a_{\lambda \mathbf{k} + \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\lambda' \mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger})$$

## Phương trình Bloch bán dẫn tổng quát

Phương trình chuyển động cho ma trận mật độ rút gọn  $\rho_{\lambda\lambda'} = \langle a_{\lambda'\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{k}} \rangle$  là

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = & -\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k}))\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \\ & - i \sum_{\mu} (\Omega_{\lambda\mu}(\mathbf{k})\rho_{\mu\lambda'}(\mathbf{k}) - \rho_{\lambda\mu}(\mathbf{k})\Omega_{\mu\lambda'}(\mathbf{k})) + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t) \cdot \nabla_{\mathbf{k}}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \\ & + \left. \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \right|_{e-ph}^{\text{col}} + \left. \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \right|_{e-e}^{\text{col}} \end{aligned} \quad (41)$$

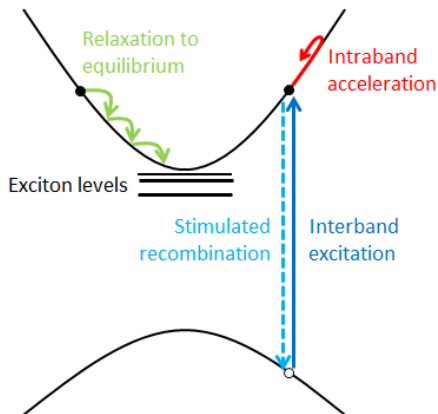
trong đó:

$$\Omega_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \left( e\mathbf{E}(t) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\mu\nu}(\mathbf{k}) - \sum_{\alpha\beta\mathbf{q}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\alpha\mu\beta\nu} \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right) \quad (42)$$

$\left. \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \right|_{e-ph}^{\text{col}}$  và  $\left. \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \right|_{e-e}^{\text{col}}$  là các số hạng va chạm điện tử - phonon và điện tử - điện tử.



# Động học của hệ bán dẫn bị kích thích quang



Giản đồ minh họa các quá trình động học trong chất rắn