Wechselwirkung optischer mit akustischen Phononen
(b) (d)

führte auf 2 Gleichungen:

$$\frac{d}{dt} b^+_{-q} = i\omega^0_q b^+_{-q} + iV \sum_{q_2} d^+_{-q_2} d^+_{q-q_2} + \dots$$

$$\frac{d}{dt} d^+_{-q} d^+_{-q'} = i(\omega_q + \omega_{q'}) \; d^+_{-q} d^+_{-q'}$$

$$+ 2iV \sum_{q_3} \left(b^+_{-q_3-q} + b_{q_3+q} \right)\left(d^+_{-q_3} d^+_{-q'} + d_{q_3} d^+_{-q'} \right)$$
$$+ 2iV \sum_{q_3} \left(b^+_{-q_3+q'} + b_{q_3-q} \right)\left(d^+_{-q} d^+_{-q_3} + d^+_{-q} d_{q_3} \right)$$

a) das sind 2 gekoppelte Operatorgleichungen für die Dynamik (zeitliche) der Auslenkung (opt. Ph) $\vec{u} \sim (b^+_{-q} + b_q)$ unter dem Einfluß von akust. Phononen $(d^+ d^+)$

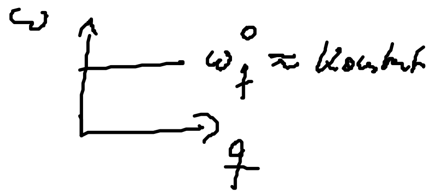
b) man erkennt die Vielteilchenhierarchie:
Operatoren koppeln an höherwertige Operatoren

$b^+ \to d^+ d^+ \to d^+ d\, b \to$ immer weiter

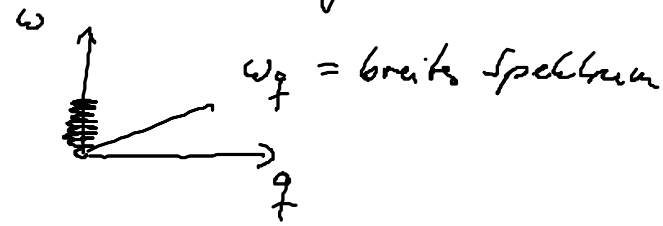
$\Rightarrow$ kein geschlossenes Gleichungssystem

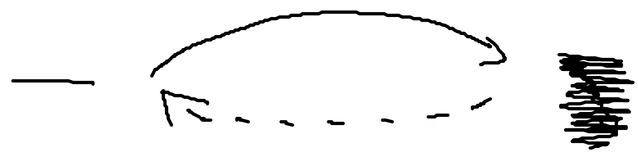
daher Näherungen <u>meist</u> unabdingbar.

<u>hier: System-Bad Kopplung</u>



optische Mode





System mit wenig Freiheitsgraden	Bad mit vielen Freiheitsgraden
Mode kann die Energie abgeben an das Bad	Bad ist fest vorgegeben bei einer Temperatur T ($\to n_q(T)$ Boseverteilg.)

es kommt nur wenig Anregg zurück und eine gedämpfte Oszillation entsteht
(Energie der optischen Mode kann sich auf viele Freiheitsgrade verteilen)

Projektionstechnik

GKSO, z.B. Hartree-Fock als ein Bsp. 1. ÜBl.

Greensche Funktionen

gekoppelte System von Funktionen mit Abbruchbedingg.

Korrelationsentwicklg

hier:

$$\underbrace{\langle AB \rangle \overset{?}{\to} \langle A \rangle \langle B \rangle}_{\text{Entwicklg. um Quantenfluktuationen}}$$

$$\langle \underline{A}\,\underline{B} \rangle = \langle (\langle A \rangle + \delta \underline{A})(\langle B \rangle + \delta \underline{B}) \rangle$$

$$\approx \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle \delta \underline{B} \rangle + \cdots$$

$$+ \underbrace{\langle \delta A \, \delta B \rangle}_{\text{Hoffng, daß solche Produkte von Fluktuationen nicht wichtig sind.}}$$

einfachste Faktorisierung (Korrelationsentwicklung):

$$\langle b^{+}_{-q} \rangle$$

$$\langle d^{+}_{q} d^{+}_{q'} \rangle$$

$$\langle \underbrace{d^{+}_{q} d_{q'}}_{A} \underbrace{b^{+}_{k}}_{B} \rangle \approx \underbrace{\langle d^{+}_{q} d_{q'} \rangle \langle b^{+}_{k} \rangle}_{\text{schließt Gleichungssystem}}$$

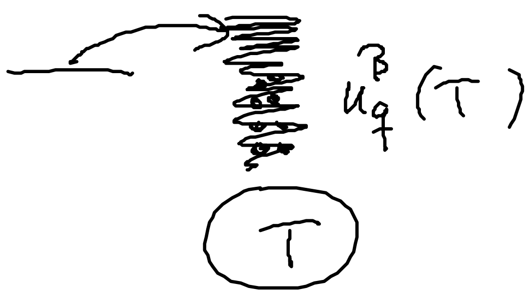
Badnähg. akustische Phonon sind im Gleichgewicht und werden durch optische Phononen nicht gestört:

$$\langle d^+ \rangle = 0$$

$$\langle d_q^+ d_{q'} \rangle = n_q^B \, \delta_{qq'}$$

ist gegeben durch eine Bose verteilg.

$$n_q^B = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_q}{kT}} - 1}$$



$$\frac{d}{dt} \langle d_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle = i(\omega_q + \omega_{q'}) \langle d_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle$$

$$+ 2iV \left(\langle b_{q'-q}^+ \rangle + \langle b_{q-q'} \rangle \right) \left(1 + n_{q'}^B + n_q^B \right)$$

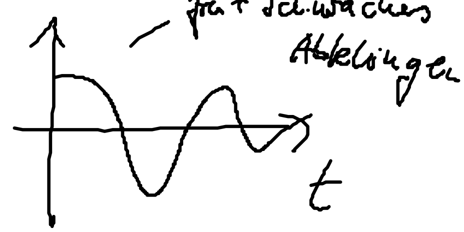
$$\frac{d}{dt}\langle b^+_{-q}\rangle = i\omega^0_q \langle b^+_{-q}\rangle + iU \sum_{q_2} \langle d^+_{-q_2}\, d^+_{q_2-q}\rangle$$

diese Gleichungen sind geschlossen lösbar.

$$\langle d^+_{-q}\, d^+_{-q'}\rangle = \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{i(\omega_q+\omega_{-q'})(t-t')}\, 2iU \langle b^+_{q'-q}(t')\rangle (1+u^B_q+u^B_{q'})$$

$\langle b\rangle$ weggelassen, wird ein nicht energieerhaltender Prozeß sein

b^+ ist hoffentlich gutes Quasiteilchen



$$\langle b^+_{q'-q}\rangle \approx \underbrace{e^{i\omega^0_{q'-q} t}}_{\substack{\text{freie Bewegg.}\\ \text{f. } U\to 0}} \underbrace{\langle \tilde{b}^+_{q'-q}(t)\rangle}_{\substack{\text{Korreliert.}\\ \text{akust. Moden}}}$$

$$\langle d^+_{-q}\, d^+_{-q'}\rangle = 2iU \sum_{q'} \int_0^{\infty} ds\, e^{i(\omega_q+\omega_{q'})s}\, e^{i\omega_{q'-q}(t-s)} \langle \tilde{b}^+_{q'-q}(t-s)\rangle$$

$$(1+u_q+u_{q'})$$

$$(t-t'=s)$$

s weglassen

s wird weggelassen, weil man $\tilde{b}$ als zeitlich schwach veränderlich auf der Skala der freien Oszillatoren ansieht, erst hier passiert E-Erhaltung! (später)

$\hat{=}$ die Zeitretardierung weglassen,

$\rightarrow$ „Markoffnäherung"

Lösen des s-Integrals gilt:

$$\int_0^\infty ds\; e^{i \underbrace{(\omega_q + \omega_{q'} - \omega^0_{q-q'})}_{\Delta\omega} s} e^{-\alpha s} =$$

Konvergenzerzeugender Faktor $\alpha \rightarrow 0$ am Ende

$$= \frac{\alpha}{\Delta\omega^2 + \alpha^2} + \frac{i\,\Delta\omega}{\Delta\omega^2 + \alpha^2}, \quad \alpha \rightarrow 0$$

$$= \pi\, \delta(\Delta\omega) \qquad + i \text{ Hauptwertintegral}$$

$\downarrow$ Lebensdauer von $\langle b^+ \rangle$: $i\omega^0_q \rightarrow i\omega^0_q - \underline{\gamma}$

$\downarrow$ Frequenzverschiebung von $\omega^0_q \rightarrow \omega^0_q + \underline{\delta\omega}$

Ausdruck davon, daß Fluktuation und Dissipation verbunden sind

$$\langle \dot{b}^+_{-q} \rangle = -i\omega^0_q \langle b^+_{-q} \rangle - \gamma \langle b^+_{-q} \rangle$$

($\delta\omega \to$ weglassen)

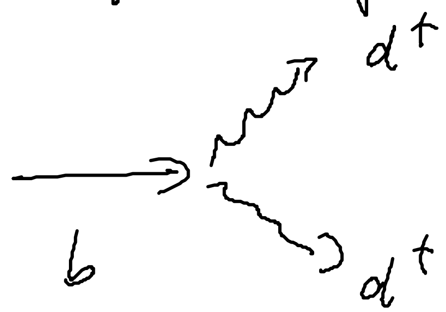
$$\gamma = 2\pi \sum_{q'} V^2 \, \delta(\omega_{q'} + \omega_{q-q'} - \omega^0_q)(1 + n^B_q + n^B_{q'})$$

a) durch die WW mit akust. Phononen wird die Bewegg. der optischen Mode gedämpft ($e^{-\gamma t}$)

b) γ ist formal ähnlich Fermis Golden Regel

$\sim V^2$ dem WW-Element

$\sim$ Energieerhaltung bei Phononstoß



: mit Impuls und E-Erhaltung

$$\omega^0_q = \omega_{q'} + \omega_{q-q'}$$

$$\underbrace{\vec{q} = \vec{q}\,' + \vec{q} - \vec{q}\,'}$$

überall q' die es gibt und
die Impuls- und Energieerhaltend
sind, wird summiert

aktuelles Gebiet z.B. ist die Untersuchung
nicht markoffsche Prozeße die
nicht energieerhaltend auf kurze Zeit-
skala sind $\int ds\, e^{i\Delta\omega s}\, \underset{\neq 0}{b^{+}(t-s)}$

c) typische Werte: 10^{-11} s für γ^{-1}

V Elektron - Phonon - Wechselwirkung

1) allgemeine Bemerkung zum Stand

Ionen $(\vec{R}_n)$ Elektronen $(\vec{r})$

$$\underbrace{\vec{R}_n^{\,0} + \vec{u}_{ns}(t)}_{\text{Phononen } (\omega_j(q))} \quad \xrightarrow[\text{starres Gitter}]{\vec{R}_n^{\,0}} \quad \underbrace{\sum_n W_{\text{ion-el}}(\vec{r} - \vec{R}_n^{\,0}) \text{ als Potential f. Elektronen}}_{\text{Quasielektronen } (\varepsilon_{k\lambda})}$$

dynamisch Ionengitter ($u \neq 0$)

Elektron – Phonon – Kopplung

Schwache Kopplung

$\downarrow$

ohmsche Leitfähigkeit

(Phononen als Bad f. Elektronen)

starke Kopplung

$\downarrow$

Supraleitung

(Phononen haben eigene Dynamik)

2. Quantisierung der Elektron – Phonon Wechselwirkung

$$H_{el-ion} = \sum_{ns} \vec{\nabla}_{R_n} W_{e-i}(\vec{r} - \vec{R}_n^{\,0}) \cdot \vec{u}_{sn}$$

steht schon am Beginn der VL

a) $H \rightarrow \int d^3 \underline{\psi}^+(r,t)\, H(r,p)\, \underline{\psi}(r,t)$ f. Elektronen

$$\psi^+ = \sum_\ell \varphi_\ell^*(\vec r)\, a_\ell^+(t)$$

$\varphi_\ell(\vec r)$ sind Bloch funktionen

b) $$u_{sn}^\alpha(t) = \sum_{j,q} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s N \omega_j(q)}}\, A_s^\alpha \Big(b_{-qj}^+ + \underbrace{b_{qj}}_{\substack{+\text{h.a.} \\ (q\to -q)}}\Big) e^{i\vec{R}_n\cdot\vec q}$$

aus Quantisierg der Gitterschwingungen.

c) Entwicklg. des periodischen Gitterpotentials in eine Fourierreihe:

$$w_{e-i}(\vec r - \vec R_n) = \frac{1}{\sqrt N}\sum_k e^{i\vec k\cdot(\vec r - \vec R_n)}\, W_k$$

(Fourierdarstellg.)

$$\underline{H_{el-ion}} = i \sum_{\substack{kqj \\ 1,2,\alpha \\ ns}} (2N^2 m_s \omega_j)^{-1/2}\, \hbar^{1/2}\, W_k\, a_1^+ a_2$$

$1 \mathrel{\hat=} \ell_1 = (k_1, \lambda_1)$

$2 \mathrel{\hat=} \ell_2$

$$\Big(\langle 1| \, b^{+}_{qj} \, e^{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{R}_n - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \, A^{\alpha *}_{S} q^{\alpha} \, |2\rangle$$

Blochfunktion

$$- \langle 1| \, b_{qj} \, e^{i(\vec{k}+\vec{q})\vec{R}_n - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \, A^{\alpha}_{S} q^{\alpha} |2\rangle \Big)$$

(iq entsteht durch partielle Integration

$$\sum_n \vec{\nabla}_{R_n} W \cdot \vec{u} = i\vec{q} \sum_n W \vec{u} \qquad)$$

$$\vec{u} \sim e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}$$

<u>Vereinfachg.:</u>

1. Blochfunktion einsetzen

$$\varphi_1 = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1\vec{r}} \, u_{\lambda_1 k_1}(\vec{r})$$

$\langle 2|$ analog

2. da $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ langsam

auf Zelle veränderlich ist:

$$\int d^3r\, \varphi_1^*(\vec r) \ldots = \sum_n \int d\Omega_n\, e^{i\vec k_1 \cdot \vec R_n}\, u_{k_1\lambda_1}(\vec r)\, \frac{1}{\sqrt{V}} \ldots$$

$\langle 1 | \cdots | 2 \rangle$

3. $\sum_{R_n}$ machen → Kroneckersymbol, $\int d\Omega\, u^*_{\lambda_1} u_{\lambda_2} \underset{k \approx 0}{=} \delta_{\lambda_1\lambda_2}$

$$\Rightarrow D_{q\lambda j} = \left(-i \sum_s \left(2 m_s\, \omega_j(q)\right)^{-1/2} \hbar^{1/2} W_q\, \vec A_s \cdot \vec q \right)$$

$$\boxed{\Rightarrow \underline{H}_{el-ion} = \sum_{\lambda k q} D_{q\lambda j} \left(b^+_{-qj} + b_{qj}\right) a^+_{\lambda q+k}\, a_{\lambda k}}$$

ist der Wechselwirkungshamiltonian zwisch Elektron u. Phonone in 2. Quantisierg.

WW Matrixelement ist $D_{q\lambda j}$

<u>Bemerkungen</u>

a) der Gesamt H: $\underline{H} = \underline{H}_{el} + \underbrace{\underline{H}_{ion}}_{\underline{H}_{ph}} + \underline{H}_{el-ion}$

des verkoppelten El-Phonon Systems

b) $D_{q\lambda j} \sim \vec{q}\cdot\vec{A}$:

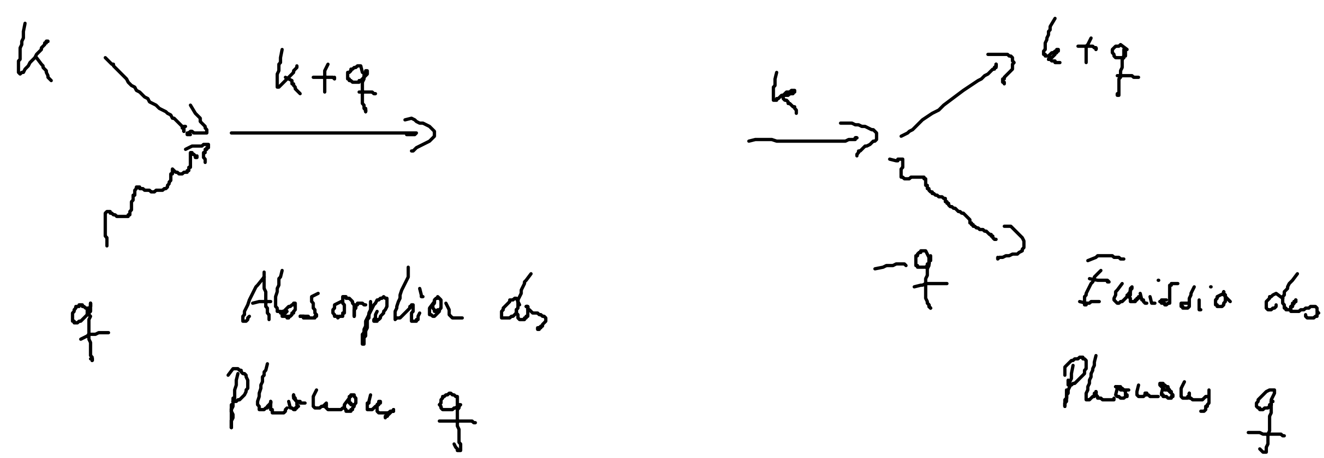
Kopplung zwischen longitudinalen Phononen und Elektronen (zumindest anteilig!)

c) Interpretation der Terme

$$\left(\underline{b^{\dagger}_{-qj}} + \underline{b_{qj}}\right) a^{\dagger}_{\lambda\, q+k}\, a_{\lambda k}$$

beschreiben Phononemission bzw Absorption

durch ein Wechsel eines elektronischen Zustands:



Absorption des Phonon q

Emission des Phonons q

Impulserhaltung bereits im Hamiltonian