Wechselwirkung optischer mit akustischen Phononen
(b) (d)

führte auf 2 Gleichungen:

$$\frac{d}{dt} b_{-q}^{+} = i\omega_q^0 b_{-q}^{+} + iV \sum_{q_2} d_{-q_2}^{+} d_{q-q_2}^{+} + \ldots$$

$$\frac{d}{dt} d_{-q}^{+} d_{-q'}^{+} = i(\omega_q + \omega_{q'}) d_{-q}^{+} d_{-q'}^{+}$$
$$+ 2iV \sum_{q_3} \left(b_{-q_3-q}^{+} + b_{q_3+q}\right)\left(d_{-q_3}^{+} d_{-q'} + d_{q_3} d_{-q'}^{+}\right)$$
$$+ 2iV \sum_{q_3} \left(b_{-q_3+q'}^{+} + b_{q_3-q}\right)\left(d_{-q}^{+} d_{-q_3} + d_{-q}^{+} d_{q_3}\right)$$

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:

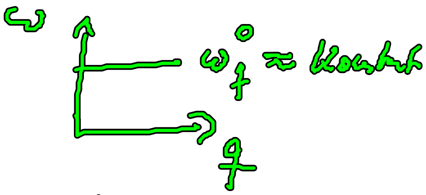
Operatoren koppeln an höherwertige Operatoren

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

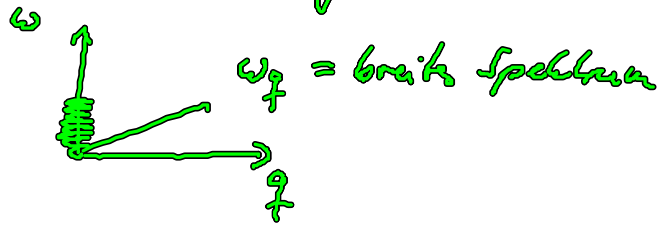
$\Rightarrow$ kein geschlossenes Gleichungssystem

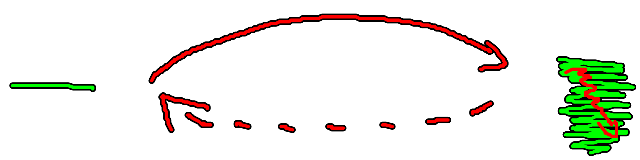
daher Näherungen <u>meist</u> unabdingbar.

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



optische Mode





System mit wenig Freiheitsgraden

Mode kann die Energie abgeben an das Bad

Bad mit vielen Freiheitsgraden

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.

Green'sche Funktionen

gekoppelte Systeme von Funktionen mit Abbruchbedingg.

Korrelationsentwicklg.

hier:

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

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

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

$$+ \underbrace{\langle \delta A\, \delta B\rangle}$$

Hoffnung, daß solche Produkte von Fluktuationen nicht wichtig sind.

einfachste Faktorisierung (Korrelationsentwicklung):

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

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

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

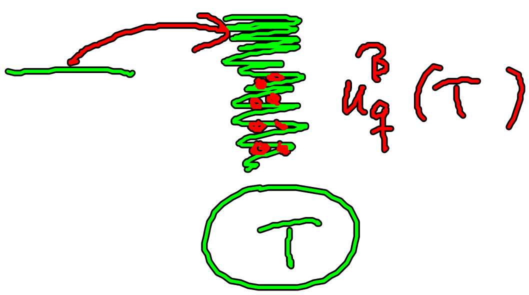
Badnäherung. akustische Phonon sind im Gleichgewicht und werden durch optische Phonon nicht gestört:

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

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

ist gegeben durch eine Bose verteilg.

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



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

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

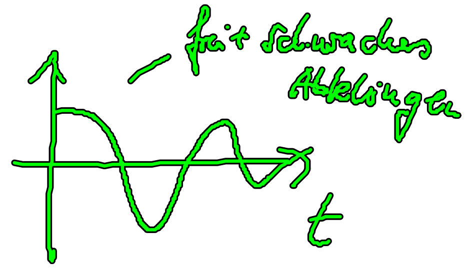
$$\frac{d}{dt}\langle b^+_{-q}\rangle = i\omega^0_q \langle b^+_{-q}\rangle + iV\sum_{q_2}\langle d^+_{-q_2}\, d^+_{q_2-q}\rangle$$

diese Gleichungen sind geschlossen lösbar.

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

$\langle b\rangle$ weggelassen, wird ein nicht energieerhaltend Prozeß ein

b^+ ist hoffentlich gutes Quasiteilchen



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

$$\langle d^+_{-q}\, d^+_{-q'}\rangle = 2iV\sum_{q'}\int_0^\infty ds\, e^{i(\omega_q+\omega_{q'})s}\, e^{i\omega_{q'-q}(t-s)}\langle \tilde b^+_{q'-q}(t-s)\rangle \left(1+n_q+n_{q'}\right)$$

$(t-t'=s)$

weglassen

s wird weggelassen, weil man $\tilde{b}$ als zeitlich schwach veränderlich auf der Skala der freien Oszillation 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 $\alpha \to 0$ am Ende

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

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

$\downarrow$ Lebensdauer von $\langle b^+\rangle$: $i\omega_q^0 \to i\omega_q^0 - \underline{\gamma}$

$\downarrow$ Frequenzverschiebung von $\omega_q^0 \to \omega_q^0 + \underline{\delta\omega}$

Ausdruck davon, daß Fluktuation und Dissipation verbunden sind

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

($\delta\omega \rightarrow$ weglassen)

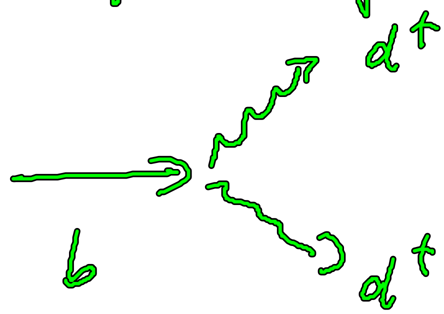
$$\gamma = 2\pi \sum_{q'} V^2 \, \delta(\omega_{q'} + \omega_{q-q'} - \omega^0_q)(1+n^B_q+n^B_{q'})$$

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

b) γ ist formal ähnlich Fermis Goldener Regel

$\sim V^2$ des WW-Element

$\sim$ Energieerhaltung bei Phononstoß



: mit Impuls und E-Erhaltung

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

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

über alle 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 Zeitskalen sind

$$\int ds\, e^{i\Delta\omega s}\ \underbrace{\sigma^{+}(t-s)}_{\neq 0}$$

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

V Elektron - Phonon - Wechselwirkung

1) allgemeine Bemerkung zum Stand

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

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

dynamisch bei Gitter ($u \neq 0$)

Elektron - Phonon - Kopplung

schwache Kopplung	starke Kopplung
↓	↓
ohmsche Leitfähigkeit	Supraleitung
(Phononen als Bad f. Elektronen)	(Phononen haben eigene Dynamik)

2. Quantisierung der Elektron - Phonon Wechselwirkung

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

stellt sich an Beginn der VL

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

$$\Psi^+ = \sum_{l} \varphi_l^*(\vec{r})\, a_l^+(t)$$

$\varphi_l(\vec{r})$ sind Blochfunktionen

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

aus Quantisierung der Gitterschwingungen. $\quad$ + h.a. $(\vec{q} \to -\vec{q})$

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.)

$$\underline{H_{el-ion}} = i \sum_{\substack{k\,q\,j \\ 1,2,\alpha \\ n\,s}} (2N^2 m_s \omega_j)^{-1/2}\, \hbar^{1/2}\, W_k\; a_1^+ a_2$$

$1 \mathrel{\hat{=}} l_1 = (k_1, \lambda_1)$

$2 \mathrel{\hat{=}} l_2$

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

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

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

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

Vereinfachg.:

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, $\underset{k\approx 0}{\int d\Omega\, u^*_{\lambda_1} u_{\lambda_2}} = \delta_{\lambda_1\lambda_2}$

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

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

ist der Wechselwirkungshamiltonian zwischen 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 entkoppelten El-Phonon Systems

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

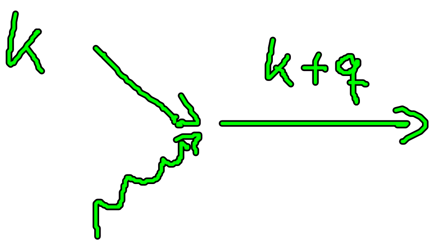
Kopplung zwischen longitudinalen Phononen und Elektronen (zumindest anteilig !)

c) Interpretation der Terme

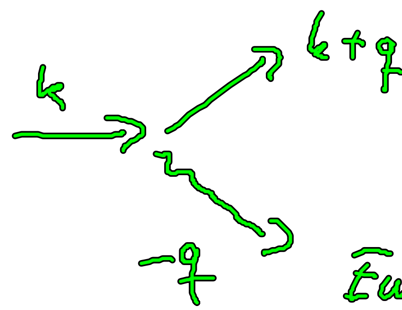
$$\left(b^{+}_{-q j} + b_{q j} \right) a^{+}_{\lambda q + k} \, a_{\lambda k}$$

beschreiben Phononemission bzw Absorption

durch einen Wechsel eines elektronischen Zustands:



Absorption des Phonons q



Emission des Phonons q

Impulserhaltung bereits im Hamiltonian