3. Dynamische Variable des gekoppelten El-Ph-Systems

beobachtbare Größen im Elektron / Ionsystem:

a) Elektronen: Optik, Transport → Quelle der Maxwellgleichg.

Ladungsdichte: $\rho(r,t) = q\,\underline{\Psi}^+(r,t)\,\underline{\Psi}(r,t)$

$$\rho(r,t) = q\sum_{n_1 n_2} \varphi^*_{n_1}(r)\,\varphi_{n_2}(r)\,a^+_{n_1}(t)\,a_{n_2}(t)$$

Stromdichte: $\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\,\underline{\Psi}^+(r,t)\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)\underline{\Psi}(r,t) + h.a.$

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{n_1 n_2} \varphi^*_{n_1}(\vec{r})\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)\varphi_{n_2}(\vec{r})\,a^+_{n_1}(t)\,a_{n_2}(t) + h.a.$$

$\varphi_n(r)$ sind Eigenfunktionen nach denen Feldoperatoren $\underline{\Psi}^+, \underline{\Psi}$ entwickelt werden, z.B

$$H_0\varphi_n = \varepsilon_n\varphi_n \quad , \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_G(\vec{r})$$

Elektron im Gitter →

φ_n: Blochfunktionen

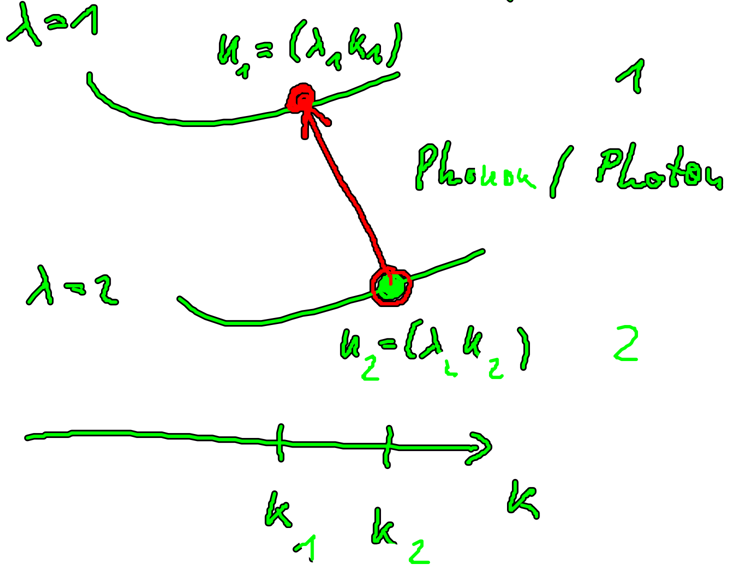
b) Ionen:

Auslenkung $\vec{u}_{ns} = \sum_{jq} \left(\frac{\hbar}{2 N m_s \omega_j(q)} \right)^{1/2} \vec{A}_s(q)\, b^+_{qj} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{a}_n} + h.a.$

$\rightarrow$ beobachtbare Größen gegeben durch $\langle j \rangle, \langle \rho \rangle, \langle u \rangle$

$\langle a^+_{n_1}(t)\, a_{n_2}(t) \rangle$ und $\langle b_{qj}(t) \rangle$, $\langle b^+_{qj} b_{qj} \rangle$

$\downarrow$ $n = (\lambda, k)$



Die beobachtbaren Größen sind durch quantenmechanische Übergänge ($n_1 \neq n_2$) und Besetzungen ($n_1 = n_2$) charakterisiert.

gegeben durch Heisenberggleichungen: ($\hbar \hat{=} 1$)

$$i\hbar\,\partial_t \langle a_1^+ a_2 \rangle = \langle [a_1^+ a_2, H] \rangle$$

$$i\hbar\,\partial_t \langle b_{qj}^+ \rangle = \langle [b_{qj}, H] \rangle$$

für Elektron – Phonon Kopplung:

$$H = \underbrace{\sum_{k\lambda} \varepsilon_{\lambda k}\, a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k}}_{} + \underbrace{\sum_{jq} \hbar\omega_{jq}\, b_{jq}^+ b_{jq}}_{}$$

elektronische Zustände
λ - Band, k - Wellenzahl
(Bloch theorem

$$\varphi_n = \varphi_{\lambda k} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\lambda k}(\vec{r}),$$

$\varepsilon_{\lambda k}$: Bandstruktur)

phononische Zustände
j - Mode, q - Wellenzahl

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

Wechselwirkung zw. el. + ph. System

über Absorption + Emission von Phononen

etwas abstrakter: (1 Phononmode)

$$\underline{H} = \sum_{1} \varepsilon_1 a_1^{+} a_1 + \sum_{q} \hbar\omega_q b_q^{+} b_q$$

$$+ \sum_{1,2q} D_{12q}\, a_1^{+} a_2 \left(b_q + b^{+}_{-q}\right)$$

$$D_{12q} = D_{q\lambda}\,\delta_{k_1-k_2,q}\;\delta_{\lambda_1\lambda_2}$$

wenn konkret Experimente angesehen werden, so wird noch die WW mit externem Feld in $\underline{H}$ aufgenommen (später)

4. Die Elektron-Phonon Gleichungshierarchie

Phonon variable:

$$-i\hbar\,\partial_t b_q = [H, b_q] =$$

$$\Big[\sum_{q'} \hbar\omega_{q'} b_{q'}^\dagger b_{q'} + \sum_{q'k\lambda} D_{q'\lambda}\, a^\dagger_{k+q'\lambda}\, a_{k\lambda}\,(b_{q'} + b^\dagger_{-q'}),\, b_q\Big]$$

$$= \sum_{q'} \hbar\omega_{q'}(-\delta_{qq'})\, b_{q'} + \sum_{q'k\lambda} D_{q'\lambda}\, a^\dagger_{k+q'\lambda}\, a_{k\lambda}\, \delta_{q,-q'}$$

$$\boxed{\partial_t b_q = -i\omega_q b_q - i\sum_{k\lambda} \tilde{D}_{q\lambda}\, a^\dagger_{k-q\lambda}\, a_{k\lambda}}$$

$$\left(\tilde{D} = \frac{D}{\hbar}\right)$$

analog: $b_q^{(+)} \to \dot{b}_q^\dagger = \dots$

Jeder elektronische Übergang $k \to k-q$ $(\forall k)$

ändert die Phononendynamik.

→ Gitterverzerrung, Grundlage f. Supraleitung

Um b zu berechnen muß man $a^\dagger_{k-q\lambda} a_{k\lambda}$ kennen...

<u>Elektronenvariablen:</u>

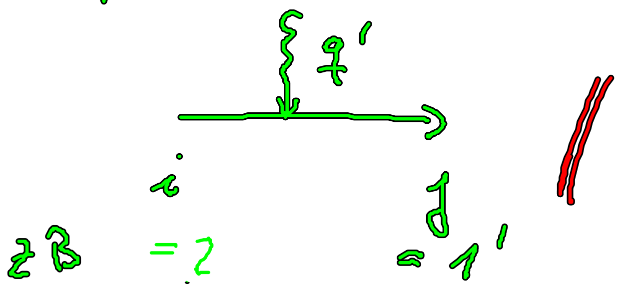
$$-i\hbar \partial_t \, a_1^\dagger a_2 = [H, a_1^\dagger a_2]$$

$$= (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) a_1^\dagger a_2 + \sum_{1'2'q'} D_{1'2'q'} [a^\dagger_{1'} a_{2'}, a_1^\dagger a_2](b_{q'} + b^\dagger_{-q'})$$

$$= (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) a_1^\dagger a_2$$ freie Bewegg. ohne El-Ph. WW

$$\underbrace{+\sum_{1'q'} D_{1'1q'} \left(a^\dagger_{1'} a_2 b_{q'} + a^\dagger_{1'} a_2 b^\dagger_{-q'} \right) - \sum_{2'q'} D_{22'q'} \left(a_1^\dagger a_{2'} b_{q'} + a_1^\dagger a_{2'} b^\dagger_{-q'} \right)}$$

phonon assistierte Übergänge



es gibt wieder ein Hierarchie problem !

$$\rho(r,t) \sim a_1^+ a_2 \rightarrow a_1^+ a_2 \, b^{(+)} \rightarrow \dots$$

muß abgebrochen werden

5. Stoßgleichungen: Quantenkinetik u. Boltzmannkinetik

enthält noch volle $\Delta E \, \Delta t$ Unschärfe

„mehr Quantenmechanik"

ΔE = fest f. El-Ph Stoß

Interferenz von Wellen ist während des Stoßprozesses aufgelöst oder nicht

Korrelationsentwicklung für $\langle a_1^+ a_2 b_q \rangle = \langle a_1^+ a_2 \rangle \langle b_q \rangle + \underline{\langle a_1^+ a_2 b_q \rangle^c}$

Gleichung f. Korrelation ?

$$-i\hbar \partial_t \langle a_1^+ a_2 b_q \rangle = \underbrace{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \hbar\omega_q) \langle a_1^+ a_2 b_q \rangle}_{\text{Freiteilchen !}}$$

mit H vertauschen

$$+ \sum_{1',2',q'} D_{1'2'q'} \Big(- \langle a_1^+ a_2 a_{1'}^+ a_{2'} \rangle \delta_{q,-q'}$$

$$+ \langle a_{1'}^+ a_2 b_{q'} b_q \rangle \delta_{2'1} + \langle a_{1'}^+ a_2 b_{-q'}^+ b_q \rangle \delta_{2'1}$$

$$- \langle a_1^+ a_{2'} b_{q'} b_q \rangle \delta_{1'2} - \langle a_1^+ a_{2'} b_{-q'}^+ b_q \rangle \delta_{1'2} \Big)$$

bedeutet, wenn jetzt faktorisiert wird, <u>2.</u> Ordnung Störungstheorie in D_{12q}, weil

$$a_1^+ a_2 \sim D\, a_1^+ a_2\, b \sim \underline{DD}\, \underbrace{\overbrace{a_1^+ a_2}^{A}\, \overbrace{b^+}^{B} \overbrace{b}^{C}}_{\text{wenn hier abgebrochen wird.}}$$

Faktorisieren von $\langle \underline{A}\,\underline{B}\,\underline{C} \rangle$:

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

$$\delta\underline{A} = \underline{A} - \langle \underline{A} \rangle$$

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

$$+ \langle \underline{B}\rangle\langle \delta\underline{A}\,\delta\underline{C}\rangle + \langle \underline{C}\rangle\langle \delta\underline{A}\,\delta\underline{B}\rangle$$

$$+ \underbrace{\langle \delta\underline{A}\,\delta\underline{B}\,\delta\underline{C} \rangle}_{\text{weglassen ?!}}$$

$$\langle \delta\underline{B}\,\delta\underline{C} \rangle = \langle (\underline{B} - \langle \underline{B}\rangle)(\underline{C} - \langle \underline{C}\rangle) \rangle$$

$$= \underbrace{\langle \underline{B}\,\underline{C} \rangle - \langle \underline{B}\rangle\langle \underline{C}\rangle}$$

$$\equiv \langle \underline{B}\,\underline{C} \rangle^c$$

<u>am Bsp:</u>

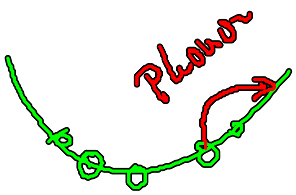
$$\langle a_1^+ a_2\, b^+ b \rangle = \langle a_1^+ a_2 \rangle \langle b^+ \rangle \langle b \rangle$$

$$+ \langle a_1^+ a_2 b^+ \rangle^c \langle b \rangle + \langle a_1^+ a_2 b \rangle^c \langle b^+ \rangle$$

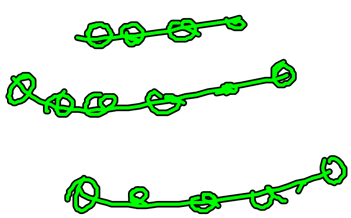
$$+ \langle a_1^+ a_2 \rangle \langle b^+ b \rangle^c + \cancel{\langle a_1^+ a_2 b^+ b \rangle^c}$$

1. Anwendg. Spezialisierg. auf 1Band-Modell: λ-Index verschwindet

5.2. Das Einbandmodell: Quantenkinetik



$\lambda = 1 \rightarrow$ brauchen wir nicht



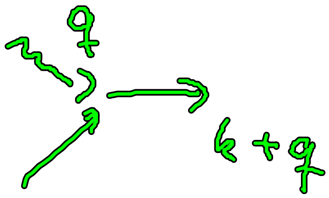
Dynamik von 2 Gleichungen: $\langle a_k^+ a_k \rangle = \sigma_k \hat{=}$ Besetzungszahl der Elektronen im Zustand k

(wird zwischen 0 - 1 sein)

$$-i\hbar\,\partial_t\, G_k(t) = \sum_q D_q \Big(\overset{1}{\langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b_q\rangle^c} + \overset{2}{\langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b^\dagger_{-q}\rangle^c}$$

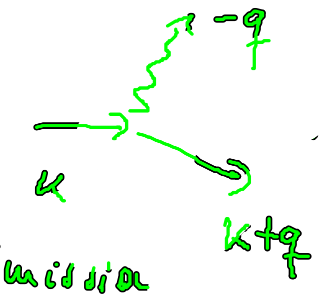
$$- \overset{3}{\langle a^\dagger_k\, a_{k-q}\, b_q\rangle^c} - \overset{4}{\langle a^\dagger_k\, a_{k-q}\, b^\dagger_{-q}\rangle} \Big)$$

1



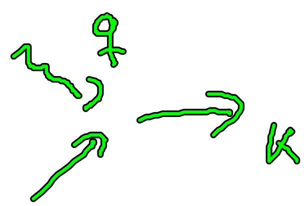
Absorption

2



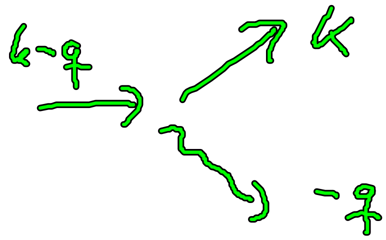
Emission

3



Absorption

4



Emission

nach Faktorisierung:

$$\partial_t \langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b_q\rangle^c = \tilde{D}_q \Big(n_q \left[\sigma_k - \sigma_{k+q} \right] + (\sigma_k - 1)\,\sigma_{k+q} \Big)$$

$$+ i\left(\nu_{k+q} - \nu_k - \omega_q \right) \langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b_q\rangle^c$$

diese Gleichung gibt es für alle 4 der Korrelationen, Das System der Gleichungen σ_k , $\langle a^+ a\, b^{(+)} \rangle$

ist jetzt geschlossen

$$\nu_k = \frac{\varepsilon_k}{\hbar} \quad , \quad n_q = n_q^B \hat{=} \text{ Boseverteilg. der Phononen}$$

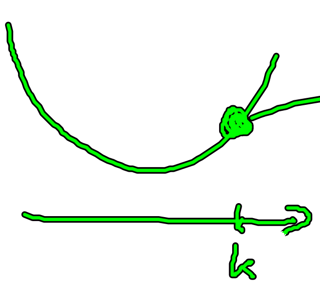
$g = \langle a^+ a\, b \rangle$ kann formal gelöst werden und

in $\dot{\sigma}_k$ eingesetzt werden

$$\dot{g} = i \Delta \varepsilon\, g + f(t)$$

$$g = \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{i \Delta \varepsilon (t - t')} f(t')$$

Die Gleichung für $\sigma_k(t) = \langle a_k^+(t)\, a_k(t) \rangle$



Besetzungszahl des elektronischen Zustands k

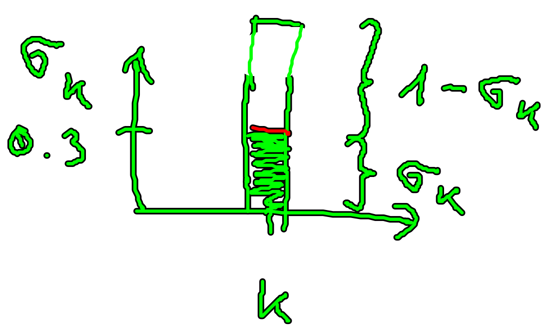
t t

$$\dot{\sigma}_k = -\int_{-\infty} dt'\, f_{aus}(t,t')\,\sigma_k(t') + \int_{-\infty} dt'\, f_{ein}(t,t')\,(1-\sigma_k(t'))$$

Bemerkung:

a) σ_k wird durch $(-)$ abgebaut und durch $(+)$ aufgebaut, man spricht von Ein- und Ausstreuung

b) die Ausstreuung ist proportional zu σ_k, also zu Besetzung σ_k die Einstreuung ist proportional zur Nichtbesetzung $(1-\sigma_k)$



$\Rightarrow$ Folge des Paulipinzips, es wird sicher gestellt, daß die Besetzung nicht über 1 geht,

z.B. $\sigma_k = 1 \rightarrow 1-\sigma_k = 0$

Einstreuung $\rightarrow 0$

c) die Gleichung beinhaltet eine Zeitretardierung

$$\sigma_k(t) \sim \int_{-\infty}^{t} dt' \, \sigma_k(\underline{\underline{t'}})$$

typischer Nichtmarkoff-Effekt

physikalisch hängt dieser memory-Effekt

mit der Zeit-Energie-Unschärfe zusammen:

$$f_{aus} = 2 \sum_q |\tilde{D}_q|^2 \left(1 - \sigma_{k+q}(t')\right) \cdot$$

$$\left\{ \cos\left(\nu_{k+q} - \nu_k - \omega_q\right)(t-t') \, n_q \right.$$

$$\left. + \cos\left(\nu_{k+q} - \nu_k + \omega_q\right)(t-t') \, (n_q+1) \right\}$$

Die Ausstreurate beschreibt Prozeße der

Phononabsorption (n_q) und der

Phononemission ($n_q + 1$).

$|D_q|^2$ zeigt die 2. Ordnung Störungstheorie an, die Zeitentwicklung ist in $\cos(t-t')$.