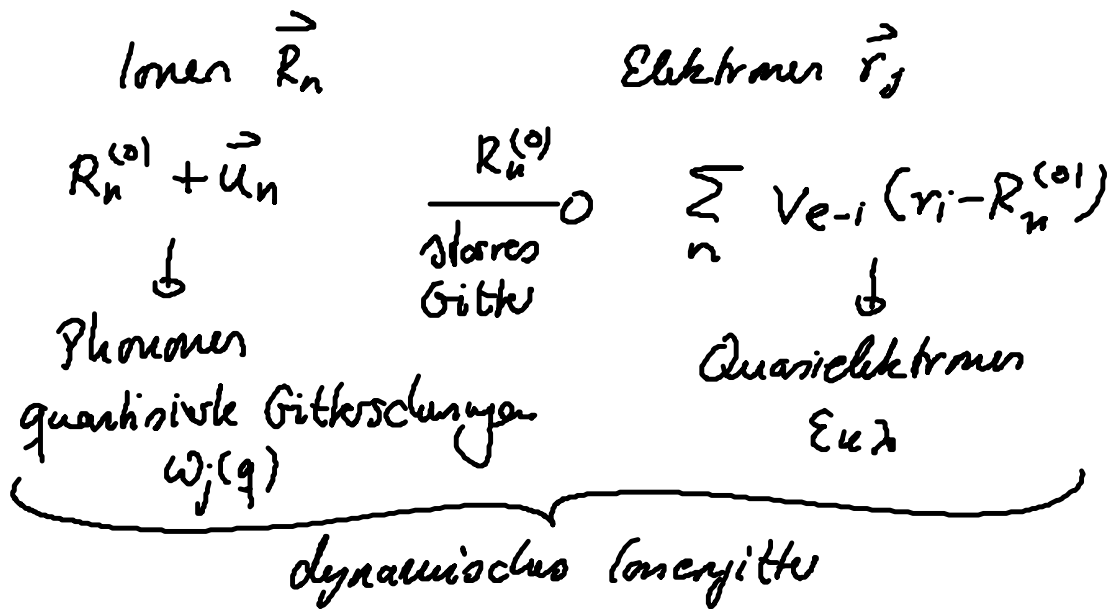


# IV Elektron-Phonon-Wechselwirkung

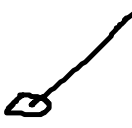
## 1. Einleitung

Entkopplung der Elektronen- und Gitterdynamik (Born-Oppenheimer)

Korrektur in der Größenordnung  $\sqrt{\frac{m_e}{m_i}} \approx 10^{-2}$



## Elektron-Phonon- $\omega\omega$



schwache Kopplung

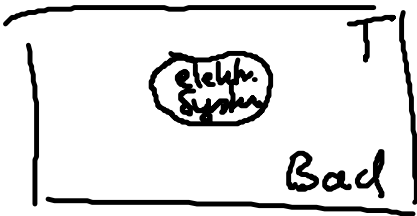
(ohmsche Leitfähigkeit mit Phononen als Bad für Elektronen)

→ Kapitel III

starke Kopplung

(Supraleitung, Phonondynamik wichtig)

→ Kapitel IV



→ Phänomenverteilung

≡ Boseverteilung

$$\langle b_{qj}^\dagger b_{qj} \rangle = n_{qj}$$

$$H_{e-i} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{n=1}^{N_i} V_{e-i}(\vec{r}_i - \vec{R}_n)$$

$$= \underbrace{\sum_i \sum_n V_{e-i}(\vec{r}_i - \vec{R}_n^{(0)})}_{0. \text{ Term von Taylor}} + \underbrace{\sum_i \sum_n \vec{u}_n \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_n} V(\vec{r}_i - \vec{R}_n)}_{1. \text{ Term Taylor}} \Big|_{\vec{R}_n^{(0)}}$$

0. Term von Taylor  
Elektronenbewegung im  
starreren Gitter  $He^{(0)}$   
⇒ Kapitel II

1. Term Taylor  
WW der Elektronen mit  
dem zeitabhängigen Potential  
der Ionen  $u_n(t)$   
⇒ Gitterverzerrungen  
 $He-p$

2. Quantisierung der Elektron-Phonon-WW

$$H \rightarrow \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}, t) H(\vec{r}, p) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\psi^+(r, t) = \sum_{\ell} \underbrace{\varphi_{\ell}^*(r)}_{\text{Blochfkt.}} \underbrace{a_{\ell}^+(t)}_{\text{Leitungsoperator}}$$

$$\varphi_{\ell}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot r} u_{\ell}(r)$$

$$u_{\ell}(r) = \sum_{j, q} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_j(q)}} A_j^*(q) (b_{-qj}^{\dagger} + b_{qj}) e^{iq \cdot R_n}$$

$$\langle e^{-i(k \cdot r - R_n)} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(r - R_n)} V_k$$

Blochfkt. einsetzen, nach Einheitszelle zurückrechnen  
 → Kronecker, Impulserhaltung

$$\Rightarrow H_{e-r} = \sum_{j, q} \sum_{k, \lambda} D_{qj} (b_{-qj}^{\dagger} + b_{qj}) a_{\lambda, k+q}^{\dagger} a_{\lambda, k}$$

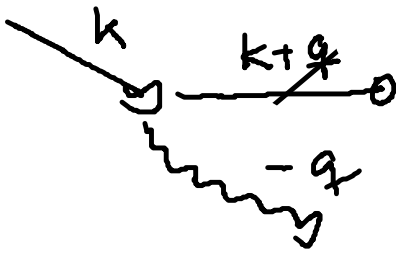
Elektron-Phonon-Matrix-Element

$$D_{qj} = - \frac{i\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2m\omega_j(q)}} V_q \vec{A}(j, q) \cdot \vec{q}$$

Ionenschwingung, die an Elektronen angeschlossen,  
 muss eine Komponente in Ausbreitungsrichtung  
 haben, d.h. rein transversale Phononen koppeln  
 nicht (TA, TO-Moden ⇒ Effekte höherer Ordnung)

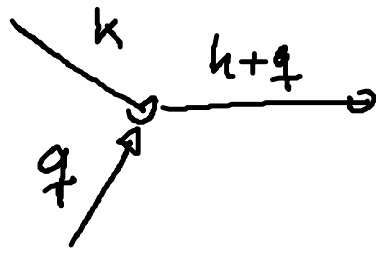
Interpretation der Terme

$$b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k$$



Phononemission

$$b_q^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k$$



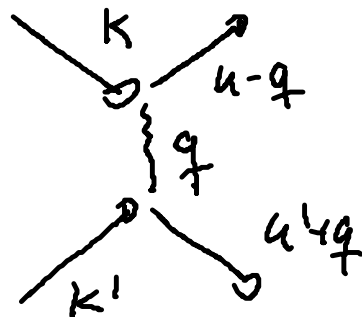
Phononabsorption

Austerkung der Ionen  $\rightarrow$  Übergänge von Elektronen mit Wellenvektor  $k$  zu  $k+q$  unter Absorption eines Phonons mit  $q$  oder Emission eines Phonons mit  $-q$

$\Rightarrow$  Elektronen haben eine endliche Lebensdauer im Blochzustand  $k$  ( $\Rightarrow$  elektrischer Widerstand)

$\Rightarrow$  Das von einem Elektron emittierte Phonon kann von einem anderen Elektron wieder absorbiert werden, so dass dieses Phonon eine effektive Elektron-Elektron-WW überträgt.

Diese WW kann auch attraktiv sein  
 $\Rightarrow$  Supraleitung  
 (Bildung von Cooper-Paaren)



$\Rightarrow$  Elektrische Eigenzustände und Energien werden modifiziert  $\Rightarrow$  neues Quasiteilchen Polaron  $\hat{=} \text{Elektron} + \text{umgebende Polarisationswolke}$

Unterschiedliche Arten der  $\omega$ :

i) Deformationspotential - Kopplung an akustische und optische Phononen

$$V_q \rightarrow D \quad \text{für } q \rightarrow 0$$

$$\vec{A}_j(q) \rightarrow \vec{e}_q \quad \text{für } q \rightarrow 0$$

$$D_{qj} = \frac{-i\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2m\omega_j(q)}} D|q|$$

nur longitudinale Phononen tragen bei

ii) piezoelektrische Kopplung (akustische Phononen)

Bei Verschiebung des Gitters wird ein elektrisches Feld generiert, falls der Kristall kein Inverses Zentrum (besonders stark bei  $\text{II-VI}$ -Halbleitern)

$$D_{qj}^\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_j(q)}} M_\alpha(\vec{e}_q)$$

hängt nur von der Richtung von Wellenvektor

$\alpha \hat{=} \text{Polarisation von den akustischen Phononen}$

iii) Polare Kopplung (Fröhlich-Kopplung)

- Optische Phononen

besonders stark bei ionischen Kristallen.

⇒ Aufbau einer Polarisation und damit eines elektrischen Felds, an dem die Elektronen streuen

$$D_{qj} = i \sqrt{e_0^2 \hbar \omega_j(q) \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)} \frac{1}{q}$$

mit dielektrische Konstante  $\epsilon_0$

und dem Brechungsindex  $\epsilon_\infty = \sqrt{n}$

### 3. Dynamische Observablen des gekoppelten Elektron-Phonon-Systems

Für Elektronen

• Ladungsdichte  $\rho(r,t) = q |\psi(r,t)|^2$

→ 2. Quantisierung  $q \sum_{n_1, n_2} \varphi_{n_1}^*(r) \varphi_{n_2}(r) a_{n_1}^\dagger(t) a_{n_2}(t)$

Dynamik der Gesamt-Elektronenzahl

$$\int d^3r \langle \rho(r,t) \rangle = q \sum_{n_1, n_2} \delta_{n_1, n_2} \langle a_{n_1}^\dagger a_{n_2} \rangle(t)$$

$$= q \sum_n \langle a_{n_1}^\dagger a_{n_2} \rangle$$

Fragestellung: Wie ändert sich die Besetzung, wenn El-Ph-WW vorliegt?

$f_{k,\lambda}^\lambda$  Besetzungswahrscheinlichkeit des Zustandes  $|k, \lambda\rangle$

$$n_i \in \{k, \lambda\}$$

• Stromdichte  $\vec{j}(r,t) = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \psi^\dagger(r,t) [\vec{p} - q\vec{A}] \psi(r,t) + h.c.$

$$\rightarrow \frac{1}{2} \frac{q}{m} \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1}^*(r) [\vec{p} - q\vec{A}] \psi_{n_2}(r) a_{n_1}^\dagger a_{n_2}(t) + h.a.$$

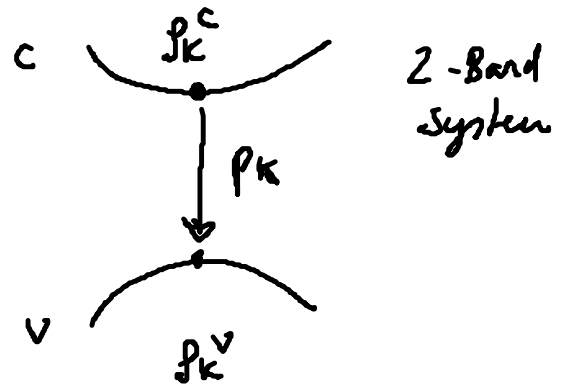
→ Optik und Transport-Eigenschaften  
im Kristall

Wichtige Größe: Übergangswahrscheinlichkeit (mikroskopische Polarisation)

$$P_K = \langle a_{v,K}^\dagger a_{c,K} \rangle$$

$$P_K^\lambda = \langle a_{K\lambda}^\dagger a_{K\lambda} \rangle$$

Zeitliche Entwicklung anschauen  
Einfluss der el-ph-We



Für Ionen

$$u_{ij}^\alpha \sim (b_{-ij}^\dagger + b_{ij})$$

Wichtige Größe:  $n_{ij} = \langle b_{ij}^\dagger b_{ij} \rangle$  Phononen-Besetzungszahl

Die Dynamik ist bestimmt durch die Heisenberg-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O} = [\hat{O}, H] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}$$

↖ explizite Zeitabhängigkeit

$$H = \sum_{k\lambda} \epsilon_{\lambda k} a_{\lambda k}^{\dagger} a_{\lambda k} + \sum_{j\gamma} \hbar\omega_{j\gamma} (b_{j\gamma}^{\dagger} b_{j\gamma} + \frac{1}{2})$$

He  
elektronische Zustände  
 $\lambda = \text{Band}, k = \text{Wellenvektor}$   
Elektronen Bandstruktur

Hph  
phononische Zustände  
 $j \equiv \text{Phonon-Mode}, \gamma = \text{Wellenvektor}$   
 $\hbar\omega_{j\gamma}$  Bandstruktur

$$+ \sum_{j\gamma} \sum_{\lambda k} D_{j\gamma} (b_{-q\gamma}^{\dagger} + b_{q\gamma}) a_{\lambda k + q}^{\dagger} a_{\lambda k}$$

He-ph  
WW zwischen Elektronen und  
Phononen über Absorption/Emission  
von Phononen

Dazu kommen noch die Elektron-Licht und Elektron-Elektron  
Kapitel V Kapitel VII

Wechselwirkungen

#### 4. Bloch-Gleichungen

zeitliche Entwicklung der Dichtematrixeinträge

$(\rho_{ik}^{\dagger}, \rho_{ik}) \Rightarrow$  gekoppeltes System von DGL

H + Heisenberg-Gleichung + fundamentale Vertauschungs-

relationen

$$[a_{\lambda}, a_{\lambda'}]_{\mp} = [a_{\lambda}^{\dagger}, a_{\lambda'}^{\dagger}] = 0$$

$$[a_{\lambda}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{\mp} = a_{\lambda} a_{\lambda'}^{\dagger} \mp a_{\lambda'}^{\dagger} a_{\lambda} = \delta_{\lambda\lambda'}$$



$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h} \Big|_{He} = [a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h}, He]_{-}$$

$$= a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h} \sum_{h' \lambda'} \cancel{\epsilon_{\lambda' h'}} a_{\lambda' h'}^{\dagger} a_{\lambda' h'} - \sum_{h' \lambda'} \epsilon_{\lambda' h'} a_{\lambda' h'}^{\dagger} a_{\lambda' h'} a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h}$$

$$\boxed{\epsilon_{\nu h} a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h}} - \sum_{h' \lambda'} \epsilon_{\lambda' h'} a_{\lambda' h'}^{\dagger} a_{\nu h}^{\dagger} a_{\lambda' h'} a_{c h}$$

$$- \sum_{h' \lambda'} \epsilon_{\lambda' h'} a_{\nu h}^{\dagger} a_{\lambda' h'}^{\dagger} a_{c h} a_{\lambda' h'}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h} \rangle \Big|_{He}$$

$$\boxed{-\epsilon_{c h} a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h}} + a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h} \sum_{h' \lambda'} \cancel{\epsilon_{\lambda' h'}} a_{\lambda' h'}^{\dagger} a_{\lambda' h'}$$

$$= (\epsilon_{c h} - \epsilon_{\nu h}) \langle a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h} \rangle$$

$$i\hbar \dot{p}_{1c} \Big|_{H_{ph}} = \langle [a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h}, \sum_{j \neq h} (b_{j j}^{\dagger} b_{j j} + \frac{1}{2})]_{-} \rangle = 0$$

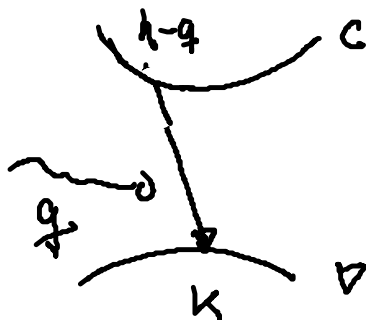
$$i\hbar \frac{d}{dt} p_{1c} \Big|_{He-ph} = \sum_{j \neq h} p_{j j} \left[ \langle b_{-j j}^{\dagger} a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h-j} \rangle - \langle b_{-j j}^{\dagger} a_{\nu h+j}^{\dagger} a_{c h} \rangle \right. \\ \left. + \langle b_{j j} a_{\nu h}^{\dagger} a_{c h-j} \rangle - \langle b_{j j} a_{\nu h+j}^{\dagger} a_{c h} \rangle \right]$$

phononassistierter Größen

$$S_{j'q}^{\lambda k \lambda' k'} = \langle b_{qj} a_{\lambda k}^{\dagger} a_{\lambda' k'} \rangle$$

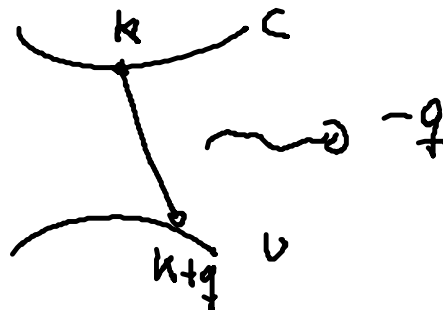
$$T_{j-q}^{\lambda k \lambda' k'} = \langle b_{-qj}^{\dagger} a_{\lambda k}^{\dagger} a_{\lambda' k'} \rangle$$

S



Phononabsorption

T



Phononemission

Insgesamt

$$i\hbar \frac{d}{dt} p_k = (\epsilon_{cv} - \epsilon_{vc}) p_k + \sum_{j'q} D_{j'q} \left[ S_{j'q}^{v k c k-q} - S_{j'q}^{v k+q c k} + T_{j'-q}^{v k c k-q} - T_{j'-q}^{v k+q c k} \right]$$