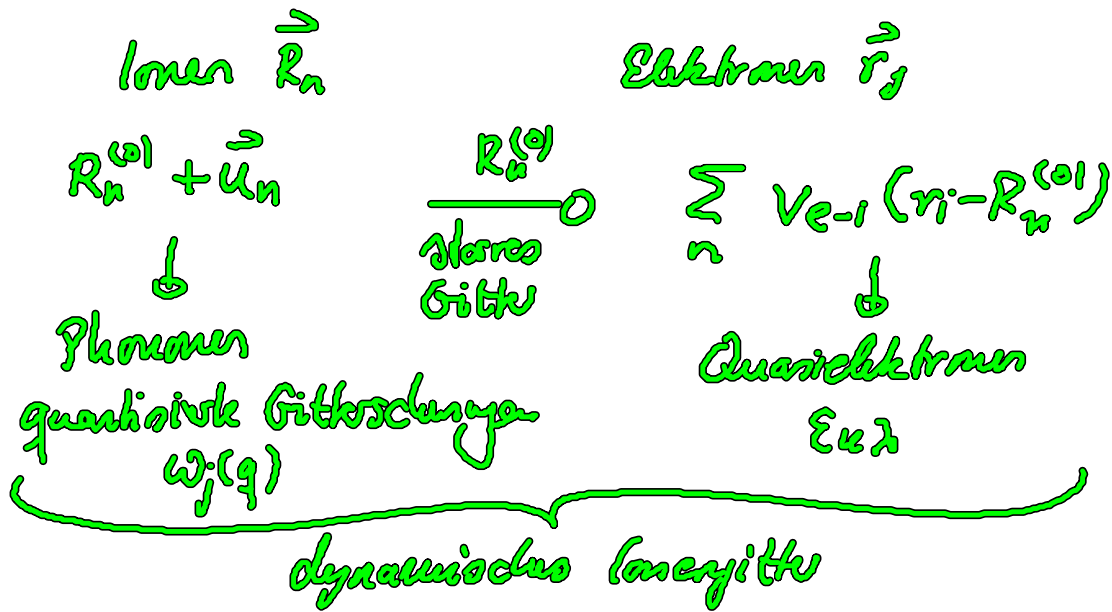


IV Elektron-Phonon-Wechselwirkung

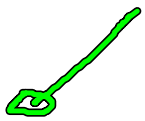
1. Einleitung

Entkopplung des Elektronen- und Gitterdynamik (Born-Oppenheimer)

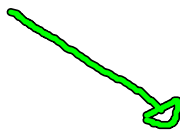
Korrektur in der Größenordnung $\sqrt{\frac{m_e}{m_i}} \approx 10^{-2}$



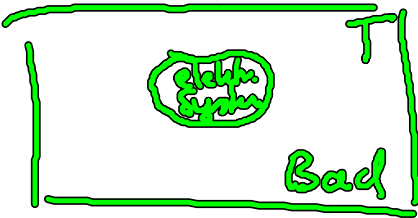
Elektron-Phonon- $\omega\omega$



schwache Kopplung
(ohmsche Leitfähigkeit
mit Phononen als Bad
für Elektronen)
→ Kapitel III



starke Kopplung
(Supraleitung, Phonodynamik wichtig)
→ Kapitel IV



→ Phononenverteilung

≡ Boseverteilung

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

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

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

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

⇒ Kapitel II

1. Term Taylor
WW der Elektronen mit
den zeitabhängigen Potentials
des Ionen $u_n(t)$

⇒ Gitterverzerrungen
 $He-p$

2. Quantisierung der Elektron-Phonon-WW

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

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

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

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

$$V_{e-i}(r-R_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(r-R_n)} V_k$$

Blochfkt. einsetzen, nach Einheitszellen ordnen
 \rightarrow Kerner, Impulserhaltung

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

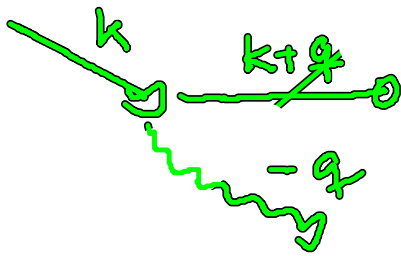
Elektron-Phonon-Matrix-Element

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

Ionenschwingung, die an Elektronen ankommt,
 muss eine Komponente in Ausbreitungsrichtung
 haben d.h. nur transversale Phononen koppeln
 nicht (TA, TO-Moden \rightarrow Effekte höherer Ordnung)

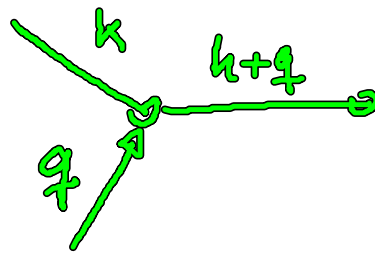
Interpretation der Terme

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



Phononemission

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



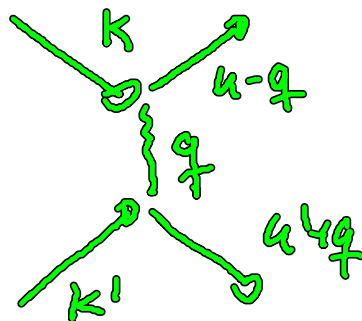
Phononabsorption

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

Unterschiedliche Arten der WW:

i) Deformationspotential - Kopplung an akustische und optische Phonon

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

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

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

nur longitudinale Phononen tragen bei

ii) piezoelektrische Kopplung (akustische Phononen)

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

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

k 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

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

mit dielektrischer Konstante ϵ_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-Elektronendichte

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

$$= q \sum_n \langle a_n^\dagger a_n \rangle$$

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

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

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

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

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

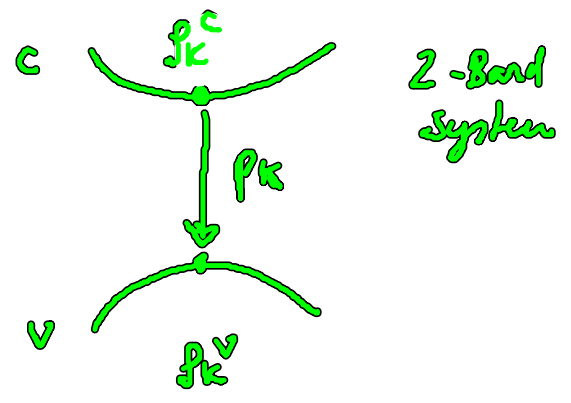
→ Optik und Transport-Eigenschaften im Kristall

Wichtige Größe: Überlappamplitude (mikroskopische Polarisation) wahrscheinlichkeit

$$\rho_k = \langle a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \rangle$$

$$\rho_k^\lambda = \langle a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} \rangle$$

Zeitliche Entwicklung anschauen
Einfluss der EL-Ph-WW



Für Ionen

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

Wichtige Größe: $n_{qj} = \langle b_{qj}^\dagger b_{qj} \rangle$ Phonon-Beschutzszahl

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
 $\lambda = \text{Band}, k = \text{Wellenvektor}$
 $\epsilon_{\lambda k}$ Bandstruktur

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

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

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

Dazu kommen noch die Elektron-Photon und Elektron-Elektron
Wechselwirkungen
Kapitel I
Kapitel II

4. Bloch-Gleichungen

zeitliche Entwicklung der Dichtematrixeinträge

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

H + Heisenberg-Gleichung + fundamentale Vertauschungs-
relationen

$$[a_i, a_i^\dagger]_{\mp} = [a_i^\dagger, a_i^\dagger] = 0$$

$$[a_i, a_i^\dagger]_{\mp} = a_i a_i^\dagger \mp a_i^\dagger a_i = \delta_{ii}$$

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

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

$\delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\nu \lambda} - a_{\nu k}^\dagger a_{\lambda \lambda'}$

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

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

$\delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\nu k} - a_{c k} a_{\lambda \lambda'}$

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

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

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

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

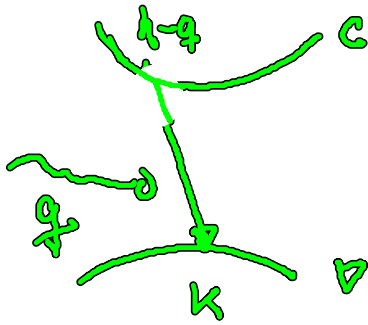
$$i\hbar \frac{d}{dt} p_k \Big|_{H_{e-ph}} = \sum_{q,j} p_{qj} \left[\langle b_{-qj}^\dagger a_{\nu k}^\dagger a_{c k-q} \rangle - \langle b_{-qj}^\dagger a_{\nu k+q} a_{c k} \rangle \right. \\ \left. + \langle b_{qj} a_{\nu k}^\dagger a_{c k-q} \rangle - \langle b_{qj} a_{\nu k+q} a_{c k} \rangle \right]$$

photonassistierter Größen

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

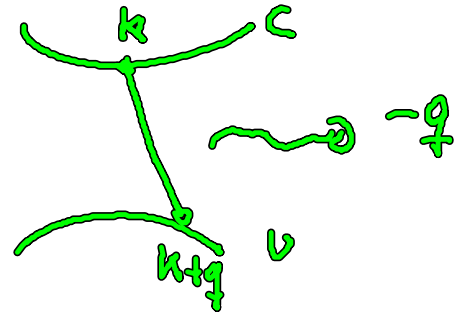
$$T_{j'-q}^{\lambda k \lambda' k'} = \langle b_{-qj}^\dagger a_{\lambda k}^\dagger a_{\lambda' k'} \rangle$$

S



Photonabsorption

T



Photonemission

Insgesamt

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