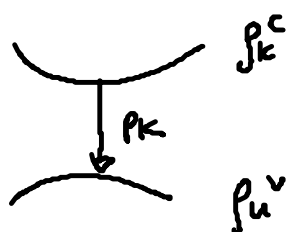


Fortsetzung zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Hamiltonian $H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}$

Heisenberg Gleichung

=> Blochgleichungen $\rho_k = \langle a_{c\mathbf{k}}^\dagger a_{c\mathbf{k}} \rangle$



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

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_k = (\epsilon_{c\mathbf{k}} - \epsilon_{v\mathbf{k}}) \rho_k + \sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}j} \left[S_{\mathbf{q}}^{v\mathbf{k}, c\mathbf{k}-\mathbf{q}} - S_{\mathbf{q}}^{v\mathbf{k}+\mathbf{q}, c\mathbf{k}} \right. \\ \left. + T_{\mathbf{j}-\mathbf{q}}^{v\mathbf{k}, c\mathbf{k}-\mathbf{q}} - T_{\mathbf{j}-\mathbf{q}}^{v\mathbf{k}+\mathbf{q}, c\mathbf{k}} \right]$$

$$i\hbar \dot{\rho}_k^i = \sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}j} \left[S_{\mathbf{q}}^{i\mathbf{k}, i\mathbf{k}-\mathbf{q}} - S_{\mathbf{q}}^{i\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\mathbf{k}} + T_{\mathbf{j}-\mathbf{q}}^{i\mathbf{k}, i\mathbf{k}-\mathbf{q}} - T_{\mathbf{j}-\mathbf{q}}^{i\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\mathbf{k}} \right] \quad i = cv$$

wobei die phonon-assistierten Größen wie folgt definiert sind

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

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

Problem: Gleichungssystem schließt nicht, da neue Größen

aufzählen

⇒ Bewegungsgleichungen für die phasenraumbasierten Größen müssen aufgestellt werden

EI-Ph-WW koppelt die Dynamik von Einteilchen-Dichtematrixelementen $\rho_{i,j}$ an Korrelationssterme höherer Ordnung

$\int \delta^4 \delta^4$. $\int \delta^4$. Deren Dynamik koppelt an Terme höherer

Ordnung (Mehr-Phonon-Prozesse): Hierarchie-Problem!

Notwendig: Näherungen

Lösung über die sog. Korrelationsentwicklung

Faktorisierung und Abbruch nach bestimmter Ordnung.

Annahme: Terme höherer Ordnung sind verbunden mit steigender Anzahl von Teilchen und tragen damit immer weniger zur Dynamik bei.

$$\begin{aligned}\langle A B C \rangle &= \langle (\langle A \rangle + \delta A) (\langle B \rangle + \delta B) (\langle C \rangle + \delta C) \rangle \\ &= \langle A \rangle \langle B \rangle \langle C \rangle + \langle A \rangle \langle \delta B \delta C \rangle \\ &\quad + \langle B \rangle \langle \delta A \delta C \rangle + \langle C \rangle \langle \delta A \delta B \rangle \\ &\quad + \langle \delta A \delta B \delta C \rangle\end{aligned}$$

Gleichungssystem
schließt

⇒ genauer in
der Übung

$$\delta A = A - \langle A \rangle$$

1. Ordnung: Kohärente Phänomene

Vernachlässigung jeglicher Korrelationen zwischen Elektronen und Phononen

$$\langle b_{j\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \approx \overbrace{\langle b_{j\mathbf{q}} \rangle}^{B_{j\mathbf{q}} \text{ kohärente Phononamplitude}} \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \int_{\text{BZ}}$$

Annahme: System ist homogen, d.h. $\sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \approx \langle a_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \int_{\text{BZ}}$

Nichtdiagonale Terme heben sich gegenseitig weg
(random phase approximation)

→ Beitrag führt zur Energieremission

→ Beitrag verschwindet im Gleichgewicht, da dort

$$\langle b_{j\mathbf{q}} \rangle = 0$$

Beitrag wichtig für richtungsabhängige El-Ph-Kopplung
(piezoelektrische Kopplung)

2. Ordnung: Streuung und Dephasierung

Abweichung zum Beitrag der 1. Ordnung

$$\int_{\text{BZ}} \int_{\text{BZ}} a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}'} = \int_{\text{BZ}} a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}'} - B_{j\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}$$

$$\text{mit } \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'} = \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle$$

Annahme: kohärente Phänomene verschwinden, d.h. $B_{j\mathbf{q}} = 0$

gute Näherung für die Fröhlich-Kopplung $\sim \frac{1}{q}$

$$i\hbar \frac{d}{dt} S_{Jq}^{\lambda k \lambda' k'} = \left[\varepsilon_{\lambda' k'} - \varepsilon_{\lambda k} - \hbar \omega_j(q) \right] S_{Jq}^{\lambda k \lambda' k'} \left. \vphantom{S_{Jq}^{\lambda k \lambda' k'}} \right\} \text{He, Hph} \\ + D_{Jq} \sum_{\alpha \beta} \left[(n_{Jq} + 1) \sigma_k^{\lambda \alpha} (\delta_{\beta \lambda'} - \sigma_{k'}^{\beta \lambda'}) \left. \vphantom{\sum_{\alpha \beta}} \right\} \text{He, Hph} \right. \\ \left. - n_{Jq} \sigma_{k'}^{\beta \lambda'} (\delta_{\lambda \alpha} - \sigma_n^{\lambda \alpha}) \right]$$

↑
Korrelationsentwicklung

$$\langle a_{\lambda k} a_{\lambda' k'} b_{Jq}^{\dagger} b_{Jq'} \rangle$$

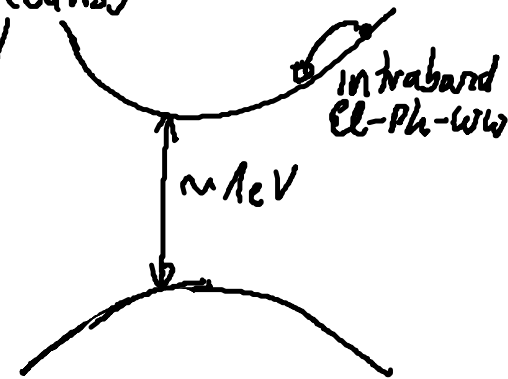
$$\approx \langle a_{\lambda k}^{\dagger} a_{\lambda' k'} \rangle \langle b_{Jq}^{\dagger} b_{Jq'} \rangle \delta_{qq'} \delta_{kk'}$$

$$\langle a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} a_3 a_4 \rangle \approx \langle a_1^{\dagger} a_4 \rangle \langle a_2^{\dagger} a_3 \rangle \\ - \langle a_1^{\dagger} a_3 \rangle \langle a_2^{\dagger} a_4 \rangle$$

5. Quantenkinetik am Beispiel eines Einbandmodells (GaAs)

Annahme: $\lambda = \lambda'$

$\hbar \omega_{LO} \approx 34 \text{ meV}$
daher Interband
Prozesse hier
vernachlässigbar



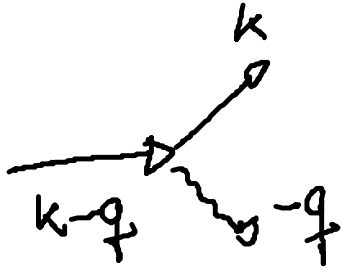
$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_k(t) = \sum_q D_q \left[\langle b_{-q}^{\dagger} a_k^{\dagger} a_{k-q} \rangle \quad (1) \right.$$

$$+ \langle b_q a_k^{\dagger} a_{k-q} \rangle \quad (2)$$

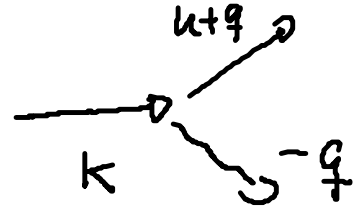
$$\left. - \langle b_{-q}^{\dagger} a_{k+q}^{\dagger} a_k \rangle \quad (3) \right]$$

$$- \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle] \quad (4)$$

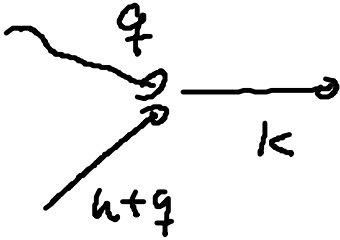
(1)



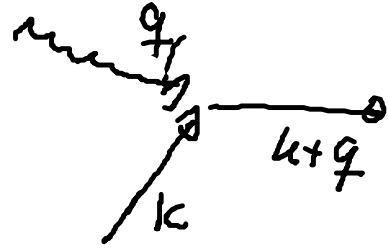
(3)



(2)



(4)



$$i\hbar \frac{d}{dt} S_{-q}^{k+q, k} = (\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \hbar\omega_q) S_{-q}^{k+q, k} + D_q [(n_q + 1) f_{k+q} (1 - f_k) - n_q f_k (1 - f_{k+q})]$$

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T} \hbar\omega_q} - 1} \quad \text{Bose Verteilung}$$

$$\langle b_q^\dagger b_q \rangle$$

im Fall von schwacher El-Ph-WW, wo Phononen als Wärmebad für Elektronen betrachtet werden (keine eigene Dynamik von Phononen)

$$i\hbar \frac{d}{dt} T_{-q}^{k+q, k} = (\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - \hbar\omega_q) T_{-q}^{k+q, k} + D_q [n_q f_{k+q} (1 - f_k) - (n_q + 1) f_k (1 - f_{k+q})]$$

5.1. Quanterkinetische Störgleichung (Nicht-Markovsche Dynamik)

Die DGL für die plattformisierten Größen S, T kann formal aufintegriert werden

$$\dot{g}(t) = -i \Delta \omega g(t) + f(t)$$

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

Einsetzen in $f_k(t)$ ergibt

$$\dot{f}_k(t) = - \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' f_{\text{aus}}(t, t') f_k(t')}_{\text{Ausstreuterm}} + \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' f_{\text{ein}}(t, t') (1 - f_k(t'))}_{\text{Einstreuterm}}$$

$\sim f_k$

$\sim (1 - f_k)$

\Rightarrow Pauli-Blocking

stellt sicher, daß die Besetzung nie größer als 1 ist

Die Gleichung beinhaltet Zeitretardierung

$$f_k(t) \sim \int_{-\infty}^t dt' f_{ik}(t', t)$$

Man spricht von Gedächtniseffekten oder Nicht-Markovsche Dynamik.

Dies hängt mit der Energie-Zeit-Unschärfe zusammen.

Teilchen "erinnern sich" während eines Stoßes an bereits vergangene Stöße. \Rightarrow Energieerhaltung ist nicht zu jedem Zeitpunkt erfüllt.

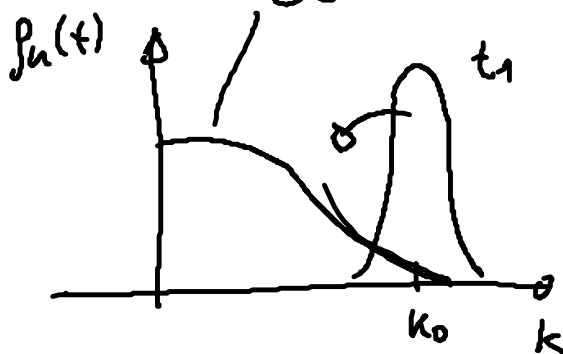
$$f_{aus}(t, t') = \frac{2}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 (1 - f_{k+q}(t'))$$

$$\left\{ \cos \left[\left(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar \omega_q \right) \frac{1}{\hbar} \right] (t-t') n_q + \cos \left[\left(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar \omega_q \right) \frac{1}{\hbar} \right] (t-t') (n_q + 1) \right\}$$

$$f_{ein}(t, t') = \frac{2}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 f_{k+q}(t')$$

$$\left\{ \cos \left[\left(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar \omega_q \right) \frac{1}{\hbar} \right] (t-t') (n_q + 1) + \cos \left[\left(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar \omega_q \right) \frac{1}{\hbar} \right] (t-t') n_q \right\}$$

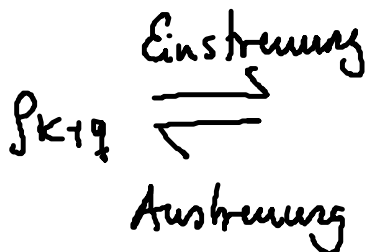
GG: Fermiverteilung t_2



t_1 Nichtgleichverteilung

t_2 : Thermalisierung in den GG-Zustand

$$t_1 < t_2$$



Pauli-Prinzip

Nur Ein-Phonon-Prozesse berücksichtigt

$$\epsilon_{k+q} - \epsilon_k \pm \hbar \omega_q$$

5.2 Boltzmann-Gleichung (Markov-Approximation)

$$\dot{g}(t) = -i \Delta\omega g(t) + f(t)$$

Im Rahmen der Markov-Approx. ist es möglich, diese DGL analytisch zu lösen.

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

$$s = t - t' \quad = - \int_{+\infty}^0 ds e^{-i\Delta\omega s} f(t-s)$$

$$= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^{\infty} ds e^{-i\Delta\omega s} e^{-\gamma s} f(t-s)$$

$$\approx \lim_{\gamma \rightarrow 0} f(t) \int_0^{\infty} ds e^{-i\Delta\omega s} e^{-\gamma s} \quad \text{Dämpfungskonstante } \gamma$$

Markov-Approx

$$f(t-s) \approx f(t)$$

$$= f(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{-1}{-i\Delta\omega - \gamma} \quad \left| \begin{array}{l} -1 \\ i \end{array} \right.$$

$$= f(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{-i}{\Delta\omega - i\gamma}$$

$$\pi \delta(\Delta\omega) - i \mathcal{P} \left(\frac{1}{\Delta\omega} \right)$$

$$= f(t) \pi \delta(\Delta\omega)$$

↗
Energie-Erhaltung

↖
wird i.R.
vernachlässigt

Näherung: Vernachlässigung von Gedächtniseffekten

$$f(t-s) \approx f(t)$$

$\hat{=}$ Energieerhaltung wird vorausgesetzt