

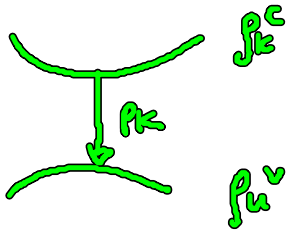
# Fortsetzung zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung

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

Heisenberg Gleichung

=> Blochgleichungen  $p_k = \langle a_{k\nu}^\dagger a_{k\nu} \rangle$

$p_k^i = \langle a_{i\nu}^\dagger a_{i\nu} \rangle$



$$i\hbar \frac{d}{dt} p_k = (\epsilon_{c\nu} - \epsilon_{v\nu}) p_k + \sum_{j \neq k} D_{kj} \left[ S_{jk}^{v k, c k - q} - S_{jk}^{v k, v k} + T_{j-k}^{v k, c k - q} - T_{j-k}^{v k, v k, c k} \right]$$

$$i\hbar \dot{p}_k^i = \sum_{j \neq k} D_{kj} \left[ S_{jk}^{i k, i k - q} - S_{jk}^{i k, v k, i k} + T_{j-k}^{i k, i k - q} - T_{j-k}^{i k, v k, i k} \right] \quad i = cv$$

wobei die phonon-assoziierten Größen wie folgt definiert sind

$$S_{jk}^{\lambda k, \lambda' k'} = \langle b_{j\neq k}^+ a_{\lambda k}^\dagger a_{\lambda' k'} \rangle$$

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

Problem: Gleichungssystem schließt nicht, da neue Größen

aufzuarbeiten

→ Bewegungsgleichungen für die phasenstatistischen Größen müssen aufgestellt werden

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

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

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

Notwendig: Näherungen

Lösung über die seq. 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.

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

bleichungssystem  
schließt

→ genauer in  
der Übung

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

# 1. Ordnung: Kohärentes Phänomen

Vernachlässigung jeglicher Korrelationen zwischen Elektronen und Phononen

$$\langle b_{j\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \approx \overbrace{B_{j\mathbf{q}}}^{\text{B}_{j\mathbf{q}} \text{ kohärentes Phononamplitude}} \langle a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Annahme: System ist kanonisch, d.h.  $\sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \approx \langle a_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$

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

Aberweichung zum Beitrag der 1. Ordnung

$$\delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mathbf{k}\lambda'\mathbf{k}'} = S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mathbf{k}\lambda'\mathbf{k}'} - B_{j\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}$$

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

Annahme: kohärentes Phänomen verschwindet, d.h.  $B_{j\mathbf{q}} = 0$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mu\lambda'\mu'} = \left[ \varepsilon_{\lambda'\mu'} - \varepsilon_{\lambda\mu} - \hbar\omega_j(\mathbf{q}) \right] S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mu\lambda'\mu'} \left. \vphantom{S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mu\lambda'\mu'}} \right\} H_e, H_{ph}$$

$$+ D_{j\mathbf{q}} \sum_{\alpha\beta} \left[ (n_{j\mathbf{q}} + 1) \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\alpha} (\delta_{\beta\lambda'} - \sigma_{\mathbf{k}'}^{\beta\lambda'}) \left. \vphantom{\sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\alpha}} \right\} H_e, H_{ph} \right.$$

$$\left. - n_{j\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{k}'}^{\beta\lambda'} (\delta_{\lambda\alpha} - \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\alpha}) \right]$$

↑  
Korrelationsentwicklung

$$\langle a_{\lambda\mu} a_{\lambda'\mu'} b_{j\mathbf{q}}^{\dagger} b_{j\mathbf{q}'} \rangle$$

$$\approx \langle a_{\lambda\mu}^{\dagger} a_{\lambda'\mu'} \rangle \langle b_{j\mathbf{q}}^{\dagger} b_{j\mathbf{q}'} \rangle \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{\mu\mu'}$$

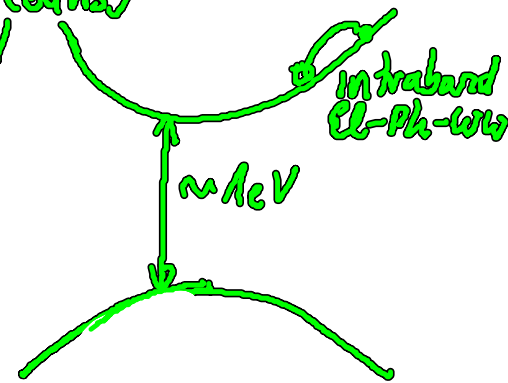
$$\langle a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} a_3 a_4 \rangle \approx \langle a_1^{\dagger} a_4 \rangle \langle a_2^{\dagger} a_3 \rangle$$

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

5. Quantenkinetik am Beispiel eines Einbandmodells (GaAs)

Annahme:  $\lambda = \lambda'$

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



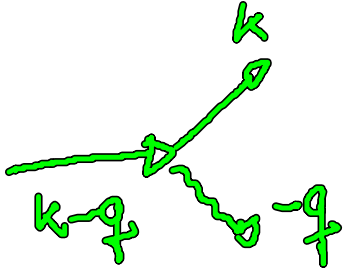
$$i\hbar \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}(t) = \sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}} \left[ \langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle \quad \textcircled{1} \right.$$

$$+ \langle b_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \quad \textcircled{2}$$

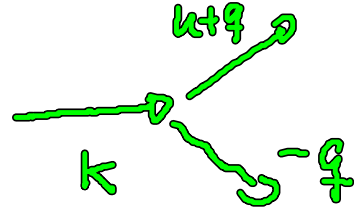
$$\left. - \langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle \quad \textcircled{3} \right]$$

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

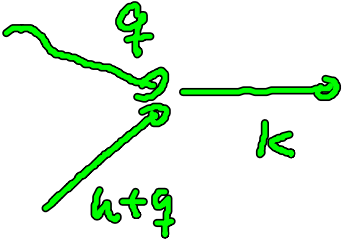
①



③



②



④



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

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

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

im Fall von schwacher El-Ph- $\omega$ , 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. Quantenkinetische 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

$$\dot{f}_k(t) = - \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' f_{\text{aus}}(t, t') f_k(t')}_{\substack{\text{Ausstreuterm} \\ \sim f_k}} + \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' f_{\text{ein}}(t, t') (1 - f_k(t'))}_{\substack{\text{Einstreuterm} \\ \sim (1 - f_k)}} = 0$$

Die Gleichung beinhaltet Zeitretardierung

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

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 Stoße  $\Rightarrow$  Energieerhaltung ist nicht zu jedem Zeitpunkt erfüllbar.

$\Rightarrow$  Pauli-Blockierung stellt sicher, daß die Besetzung nie größer als 1 ist

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

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

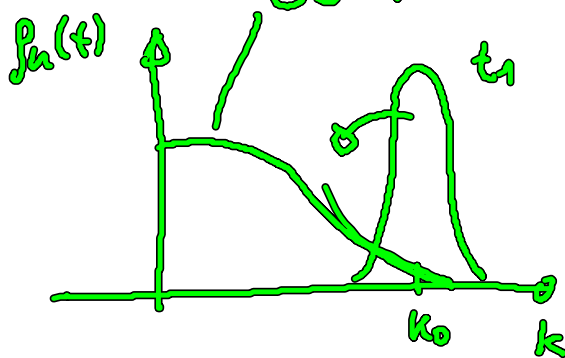
$$\left. + \cos \left[ (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q) \frac{1}{\hbar} \right] (t-t') (n_q + 1) \right\}$$

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

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

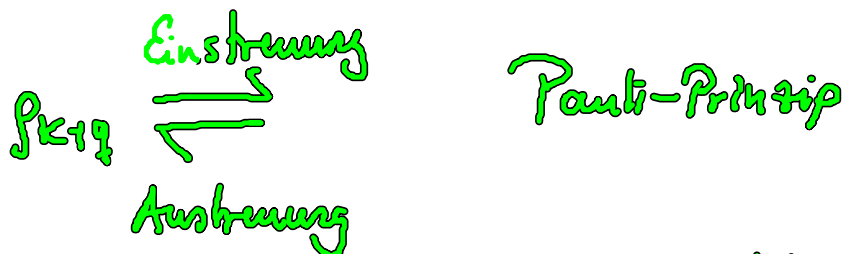
$$\left. + \cos \left[ (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q) \frac{1}{\hbar} \right] (t-t') n_q \right\}$$

66: Fermiverteilung  $t_2$



$t_2$ : Thermalisierung in der 66-Zustand

$$t_1 < t_2$$



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

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



⇒ Energieerhaltung wird vorausgesetzt