

weiter zu VI Elektron-Phonon-Wechselwirkung

2. Quantisierung der Elektron-Phonon-WW

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

mit dem Elektron-Phonon-Matrix-Element

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

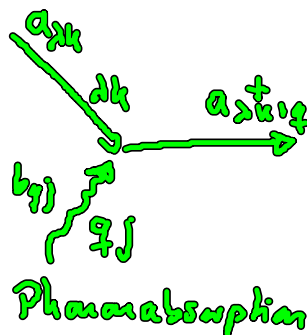
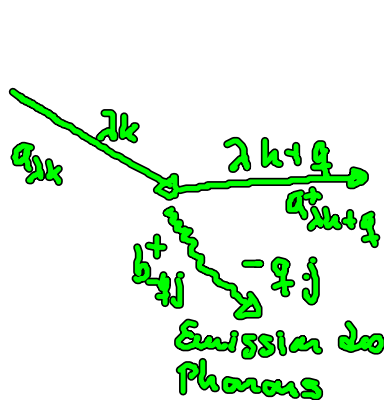
Ionenschwingungen, die an Elektronen an koppeln, müssen eine Komponente in Ausbreitungsrichtung haben, d.h. rein transversale Phononen koppeln nicht (TA, TO Moden \rightarrow Effekte höherer Ordnung)

Interpretation des Elektron-Phonon-Hamiltonians:

$$\underbrace{(b_{qj}^\dagger + b_{qj})}_{\text{Phonon-Emission}} a_{\lambda k}^\dagger + a_{\lambda k}$$

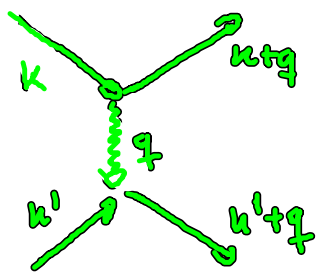
Phonon-Emission

Phonon-Absorption



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

\Rightarrow Elektronen haben eine endliche Lebensdauer im Blochzustand k , d.h. Elektron-Phonon-WW wird einen Beitrag zum elektrischen Widerstand leisten (\Rightarrow Kapitel VIII)



Das von einem Elektron emittierte Phonon kann von einem anderen Elektron absorbiert werden, so dass dieses Phonon eine effektive Elektron-Elektron-WW verursacht

Diese WW kann auch attraktiv sein \Rightarrow Supraleitung [Kapitel IX]

⇒ Elektronische Eigenzustände und Energien werden modifiziert
(Gitterpolarisation) ⇒ neues Quantenteilchen Polariton

⇒ Elektron +
umgebende
Polarisationswolke

- Unterschiedliche Arten der Elektron-Phonon-WW: Polarisationswolke

i) Deformationspotential-Kopplung an akustische und optische
Phononen

ii) piezoelektrische Kopplung an akustische Phononen

iii) polare Kopplung an optische Phononen (Fröhlich Kopplung)

zu i) Deformationspotential

$$D_{qj} = - \frac{i\sqrt{F}}{\sqrt{2m\omega_j(q)}} D |q| \quad \text{mit} \quad V_q \rightarrow D \quad \text{für} \quad q \rightarrow 0$$

Fourier-Transformierte des Elektro-Ion-
Potentials als konstant angenommen
für lange Wellenlänge

nur longitudinale Phononen tragen
bei

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

D ≙ Deformationskonstante
(erhält man aus dem Experiment)

zu ii) Piezoelektrische Kopplung

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

M hängt von der Richtung von Wellenvektor ab

M ist eine Konstante, die ein
Maß für den Druck auf den Kristall darstellt.

Bei Verschiebung des Gitters wird ein elektrisches Feld generiert

(oder umgekehrt)

Periodische Dichteschwankungen (akustische Phonone) erzeugen elektrische Felder, falls der Kristall kein Kristallgitterpotential hat.

IV-Halbleiter (Ge, Si) sind nicht piezoelektrisch.

III-V-Halbleiter (GaAs) sind leicht piezoelektrisch.

II-VI-Halbleiter (CdS) sind stark — " —

Ein akustisches Phonon kann mit einem Elektron gleichzeitig über Deformationspotential und piezoelektrische Kopplung wechselwirken

$$D_{qj} = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(q)}} [D|q| + iM_{\alpha}(\vec{e}_q)]$$

$\alpha \ni$ Polarisations
von den akustischen
Phononen (LA, TA)

zu II) Polare Kopplung (Fröhlich)

Polare Kopplung zwischen Elektronen und optischen Phononen kann in ionischen Kristallen groß sein

Falls positive und negative Ionen in gegensätzliche Richtung oszillieren, wird eine Polarisierung aufgebaut \rightarrow langreichweitiges elektrisches Feld, an dem die Elektronen streuen

$$D_{qj} = i \frac{1}{q} \epsilon_0 \sqrt{\frac{\pi\omega(q)}{2\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

$\epsilon_0 \hat{=}$ statische Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon_{\infty} = \sqrt{n^2}$$

\uparrow
Brechungsindex

Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante

3. Dynamische Observablen des gekoppelten Elektron-Phonon-Systems

Für Elektronen

• Ladungsdichte $\rho(r,t) = q |\psi(r,t)|^2$
 $\rightarrow q \sum_{n_1 n_2} \psi_{n_1}^*(r) \psi_{n_2}(r) a_{n_1}^\dagger a_{n_2}(t)$
 2. Quantisierung \uparrow

Block-Funktionen, nach denen die Feldoperatoren entwickelt werden

$$\psi(r,t) = \sum_{n_1} \psi_{n_1}(r) a_{n_1}(t)$$

$$n_1 = \{\lambda, k\}$$

Dynamik der Gesamt-Elektronenzahl

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

$$= q \sum_{n_1} \underbrace{\langle a_{n_1}^\dagger a_{n_1} \rangle}_{\rho_k^{\lambda\lambda}} = n$$

mikroskop. Besetzungswahrscheinlichkeit im Zustand $|k, \lambda\rangle$

$$0 \leq \rho_k^{\lambda\lambda} \leq 1$$

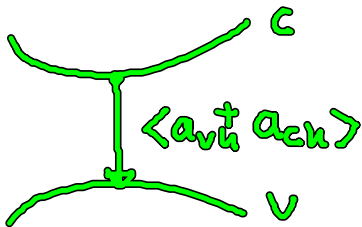
Fragenstellung: Wie ändert sich die Besetzungswahrscheinlichkeit, wenn Elektron-Phonon-WW vorliegt?

• Stromdichte $\vec{j}(r,t) = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \psi^\dagger(r,t) [\vec{p} - q\vec{A}] \psi(r,t) + h.a.$
 $\vec{j} = nq\vec{v} = n \frac{q}{m} \vec{p}$
 mittlere Driftgeschwindigkeit $+ h.a.$
 $= \frac{1}{2} \frac{q}{m} \sum_{n_1 n_2} \psi_{n_1}^*(r) [\vec{p} - q\vec{A}] \psi_{n_2}(r) \underbrace{a_{n_1}^\dagger a_{n_2}(t)}$

zu berechnende mikroskopische Größe

$$\rho_k^{vc} \equiv p_k = \langle a_{vk}^\dagger a_{ck} \rangle$$

Übergangsamplitude (mikroskopische Polarisation) taucht in $\vec{j}(r,t)$ auf



Zweiband-System

Dynamik von p_k wird durch Elektron-Phonon-WW verändert

Für Ionen

• Ausbreitung des Ionen $\vec{u}_{Ions} \sim (b_{qj}^+ + b_{qj})$

zu bestimmender mikroskop. Größe $n_{qj} = \langle b_{qj}^+ b_{qj} \rangle$

Phonon-Beschutzungsanzahl

Die beobachtbaren Größen werden durch quantenmechanische Übergänge ($\lambda \neq \lambda'$) und Besetzungswahrscheinlichkeiten ($\lambda = \lambda'$) charakterisiert.

$$p_k = \langle a_{k\lambda}^+ a_{k\lambda'} \rangle \quad \text{mit } \lambda \neq \lambda'$$

$$p_k^\lambda = \langle a_{k\lambda}^+ a_{k\lambda} \rangle$$

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

zeitliche Dynamik unter
Einfluss der Elektron-Phonon-WW

Dynamik wird bestimmt durch die Heisenberg-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O} = [\hat{O}, H] + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \hat{O}}_{\text{explizite Zeitabhängigkeit}}$$

Hamilton-Operator:

$$H = \underbrace{\sum_{k\lambda} \epsilon_{\lambda k} a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k}}_{H_e} + \underbrace{\sum_{jq} \hbar \omega_{jq} (b_{jq}^+ b_{jq} + \frac{1}{2})}_{H_{ph}}$$

H_e : elektronische Zustände
 $\lambda \ni$ Band
 $k \ni$ Wellenvektor
 $\epsilon_{\lambda k} \ni$ Bandstruktur

H_{ph} : phononische Zustände
 $j \ni$ Phonon-Modus
 $q \ni$ Wellenvektor
 $\hbar \omega_j(q) \ni$ phononische Bandstruktur

$$+ \underbrace{\sum_{jq} \sum_{\lambda\lambda'} D_{qj} (b_{-q}^+ + b_{qj}) a_{\lambda k}^+ a_{\lambda' k}}_{H_{e-ph}}$$

H_{e-ph} : WW zwischen Elektronen und Phononen

Hinzu kommt noch Elektron-Elektron-WW (Kapitel VII) und Elektron-Licht-Kopplung (Kapitel VIII)

4. Bloch-Gleichungen

Gekoppeltes System von DGLs

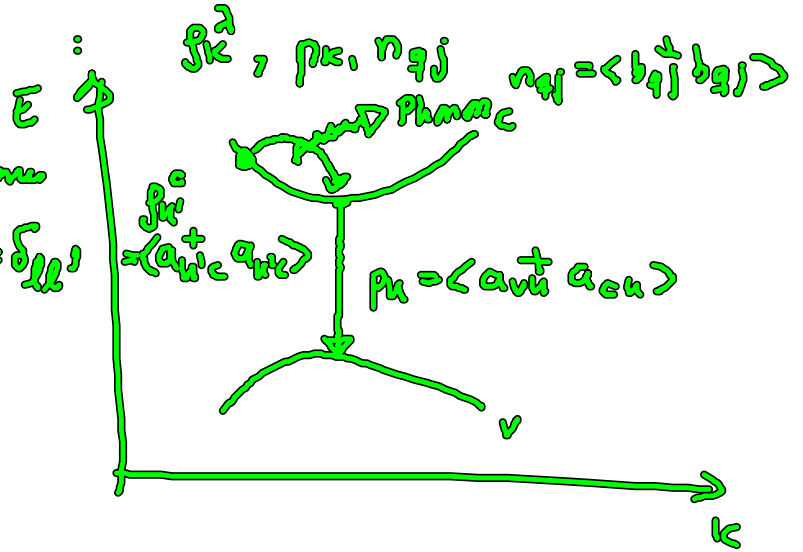
Fundamentale Vertauschungsrelationen

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

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

für Bosonen $[\cdot, \cdot]_{-}$

für Fermionen $[\cdot, \cdot]_{+}$



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

$$= a_{\nu}^{\dagger} a_{c\mu} \sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{\lambda'k'}$$

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

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

$\epsilon_{\nu k} a_{\nu}^{\dagger} a_{c\mu}$ $\sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} a_{\lambda'k'}$ sind
Elektronen
Fermionen,
d.h.

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

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

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

Mit Erwartungswerten:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \underbrace{\langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} \rangle}_{\rho_{\nu}} \Big|_{He} = (\epsilon_{\nu} - \epsilon_{\nu'}) \underbrace{\langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle}_{\rho_{\nu}}$$

$$\text{d.h. } i\hbar \dot{\rho}_{\nu} \Big|_{He} = \Delta \epsilon_{\nu} \rho_{\nu}$$

zu tun $\cdot i\hbar \rho_{\nu} \Big|_{He} = 0$

$$i\hbar \dot{\rho}_{\nu} \Big|_{He} = \sum_{j \neq \nu} D_{\nu j} \left[T_{j-\nu}^{\nu h e h'} - T_{j-\nu}^{\nu h' e h} + S_{j\nu}^{\nu h e h'} - S_{j\nu}^{\nu h' e h} \right]$$

mit phasen-assoziierte Größen S, T

$$S_{j\nu}^{\lambda h \lambda' h'} = \langle b_{j\nu} a_{\lambda h}^{\dagger} a_{\lambda' h'} \rangle \text{ und } T_{j-\nu}^{\lambda h \lambda' h'} = \langle b_{j-\nu}^{\dagger} a_{\lambda h}^{\dagger} a_{\lambda' h'} \rangle$$

ausführlich in der nächsten VL bzw. im Übungsblatt.