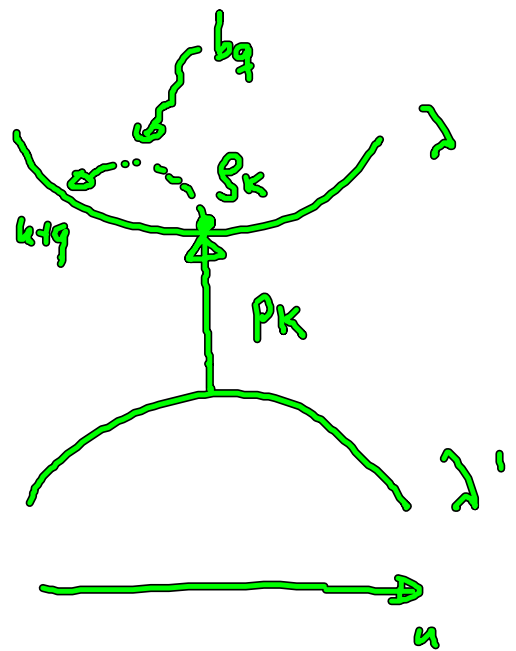


weiter zu 4. Bloch-Gleichungen

- $\rho_k^{\lambda\lambda} \equiv \rho_k^\lambda = \langle a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} \rangle$
Besetzungswahrscheinlichkeit im Zustand $|k, \lambda\rangle$
- $\rho_k^{\lambda\lambda'} = \rho_k = \langle a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda'} \rangle$
Maß für Übergangswahrscheinlichkeit zwischen $|k, \lambda\rangle$ und $|k, \lambda'\rangle$
- $\rho_{qj} = \langle b_{qj}^\dagger b_{qj} \rangle$ Phononbesetzung im Zustand $|q, j\rangle$



Heisenbergsche Bewegungsgl.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O} = [\hat{O}, H]_{-}$$

Hamilton-Operator

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

$$i\hbar \dot{p}_k |_{H_e} = (E_{ck} - E_{vk}) p_k$$

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

$$i\hbar \dot{p}_\mu |u_{k-p}\rangle = \left\langle \left[a_{\nu k}^\dagger a_{c k}, \sum_{j \neq k} \sum_{\lambda k'} D_{qj} (b_{-j}^\dagger + b_{qj}) a_{\lambda k'+j}^\dagger a_{\lambda k} \right] \right\rangle$$

$$= \left\langle \sum_{j \neq k} D_{qj} (b_{-j}^\dagger + b_{qj}) \left[\sum_{\lambda k'} \cancel{a_{\nu k}^\dagger a_{c k}} a_{\lambda k'+j}^\dagger a_{\lambda k} - \sum_{\lambda k'} a_{\lambda k'+j}^\dagger a_{\lambda k} a_{\nu k}^\dagger a_{c k} \right] \right\rangle$$

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

$$\left(a_{\nu k'+j}^\dagger a_{c k} \right) - \sum_{\lambda k'} a_{\lambda k'+j}^\dagger \underbrace{(a_{\nu k}^\dagger)}_{\delta_{\lambda \nu} \delta_{k k'+j}} a_{\lambda k} a_{c k}$$

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

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

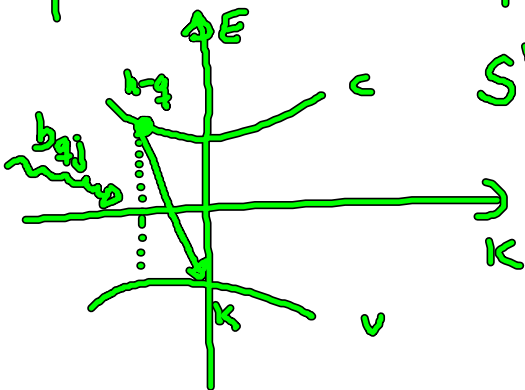
$$\left(- a_{\nu k}^\dagger a_{c k-j} \right) + \sum_{\lambda k'} a_{\nu k}^\dagger a_{c k} \cancel{a_{\lambda k'+j}^\dagger} a_{\lambda k}$$

$$i\hbar \dot{p}_\mu |u_{k-p}\rangle = \sum_{j \neq k} D_{qj} \left\langle (b_{-j}^\dagger + b_{qj}) (a_{\nu k}^\dagger a_{c k-j} - a_{\nu k'+j}^\dagger a_{c k}) \right\rangle$$

$$= \sum_{j \neq k} D_{qj} \left[\underbrace{\langle b_{-j}^\dagger a_{\nu k}^\dagger a_{c k-j} \rangle}_{= \sum_{j \neq k} S_{\nu k}^{c k-j}} - \underbrace{\langle b_{-j}^\dagger a_{\nu k'+j}^\dagger a_{c k} \rangle}_{= \sum_{j \neq k} T_{\nu k'+j}^{c k}} \right]$$

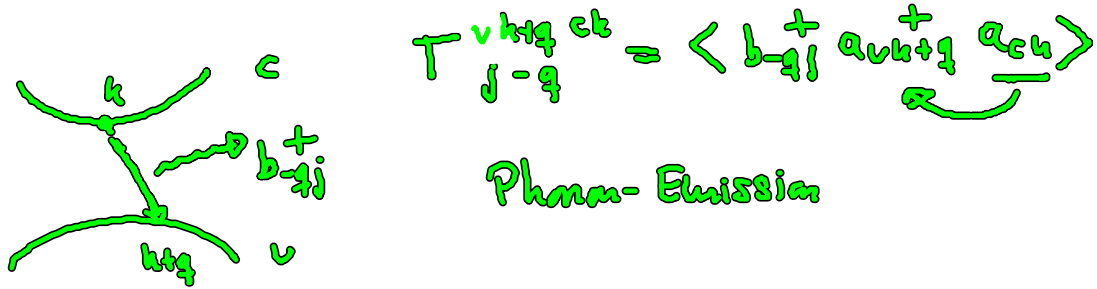
$$+ \left[\underbrace{\langle b_{qj} a_{\nu k}^\dagger a_{c k-j} \rangle}_{= \sum_{j \neq k} S_{\nu k}^{c k-j}} - \underbrace{\langle b_{qj} a_{\nu k'+j}^\dagger a_{c k} \rangle}_{= \sum_{j \neq k} S_{\nu k'+j}^{c k}} \right]$$

Phonon-assistierte Größen S, T



$$S_{\nu k}^{c k-j} = \langle b_{qj} a_{\nu k}^\dagger a_{c k-j} \rangle$$

Phonon-Absorption



Insgesamt Bloch-Gleichungen

$$i\hbar \dot{\rho}_k = \underbrace{(\epsilon_{\epsilon k} - \epsilon_{\nu k})}_{He} \rho_k + \sum_{j \neq k} D_{qj} \left[S_{j \neq k}^{\nu k, \epsilon k+q} - S_{j \neq k}^{\nu k+q, \epsilon k} + T_{j \neq k}^{\nu k, \epsilon k+q} - T_{j \neq k}^{\nu k+q, \epsilon k} \right]$$

He- ρ_k

Analog für ρ_k^{λ} (Übungsaufgabe)

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

Das Gleichungssystem schließt nicht, da neue Größen auftauchen.

Die Elektron-Phonon-WW koppelt die Dynamik von Einteilchen-Größen

[$\rho_k = \langle a_{\nu k}^{\dagger} a_{\epsilon k} \rangle$] an Terme höherer Ordnung wie

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

Deren Dynamik koppelt wieder an Terme höherer Ordnung (Mehr-Phononen-Prozesse)

Ähnliches Hierarchie-Problem taucht auch bei der Elektron-Elektron-WW auf.

⇒ Näherungen notwendig

Korrelationsentwicklung:

Faktorisierung und Abbruch nach bestimmter Ordnung.

Annahme: Terme höherer Ordnung, die die WW mit steigender Zahl von Teilchen beschreiben, tragen immer weniger zur Dynamik bei.

$$\langle ABC \rangle = \left[(\langle A \rangle + \delta A) (\langle B \rangle + \delta B) (\langle C \rangle + \delta C) \right]$$

$$= \underbrace{\langle A \rangle \langle B \rangle \langle C \rangle} + \langle A \rangle \langle \delta B \delta C \rangle + \langle B \rangle \langle \delta A \delta C \rangle + \langle C \rangle \langle \delta A \delta B \rangle + \langle \delta A \delta B \delta C \rangle$$

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

$$\approx \langle A \rangle \langle B \rangle \langle C \rangle + \langle A \rangle \langle BC \rangle^c + \langle B \rangle \langle AC \rangle^c + \langle C \rangle \langle AB \rangle^c$$

$$\langle \delta B \delta C \rangle = \langle (B - \langle B \rangle) (C - \langle C \rangle) \rangle = \langle BC \rangle - \langle B \rangle \langle C \rangle = \langle BC \rangle^c$$

Korrelationsgröße

Anwendung auf phonon-assistierte Größen.

1. Ordnung: Kohärente Phononen mit $\langle b \rangle \neq 0$

Vernachlässigung jeglicher Korrelationen zwischen Elektronen und Phononen, d.h. b's und a's tauchen nicht im selben Erwartungswert auf [da $\langle a^\dagger \rangle, \langle a \rangle = 0$]

$$\sum_{j\eta} \sigma_{\lambda\eta}^{\lambda'\eta'} = \langle b_{j\eta} a_{\lambda\eta}^\dagger a_{\lambda'\eta'} \rangle \approx \langle b_{j\eta} \rangle \langle a_{\lambda\eta}^\dagger a_{\lambda'\eta'} \rangle$$

Zusätzliche Annahme: System ist homogen, d.h. $\sum_{\eta'} \langle a_{\lambda\eta}^\dagger a_{\lambda'\eta'} \rangle = \langle a_{\lambda\eta}^\dagger a_{\lambda\eta} \rangle$

$$\text{d.h. } \sum_{j\eta} \sigma_{\lambda\eta}^{\lambda'\eta'} \approx \underbrace{B_{j\eta}}_{\langle b_{j\eta} \rangle} \underbrace{\sigma_{\lambda\eta}^{\lambda'\eta'}}_{\langle a_{\lambda\eta}^\dagger a_{\lambda\eta} \rangle}$$

- Beitrag führt zu einer Energie-Rennormierung bei, da $\sigma_k^{\lambda\lambda'} = \rho_k$
- Beitrag verschwindet im Gleichgewicht, da dort $B_{j\mathbf{q}} = 0$
[Gitterschwingungen überlagern sich und heben sich weg]
- Beitrag wichtig für richtungsabhängige Elektron-Phonon-Wechselwirkung (piezoelektrische Kopplung)

2. Ordnung: Streuung und Dephasierung

Abweichung zum Beitrag der 1. Ordnung

$$\delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'\lambda''\lambda'''} = S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'\lambda''\lambda'''} - B_{j\mathbf{q}} \sigma_{k'k''}^{\lambda\lambda''} = \langle b_{j\mathbf{q}} a_{\lambda k''}^\dagger a_{\lambda' k'} \rangle^c$$

Neue Bewegungsgleichung für die phonon-assistierte Größe

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'\lambda''\lambda'''} = \left[\underbrace{\epsilon_{\lambda' k'} - \epsilon_{\lambda k}}_{H_e} \oplus \underbrace{\hbar \omega_{j\mathbf{q}}}_{H_{ph}} \right] \delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'\lambda''\lambda'''} \quad \left. \begin{array}{l} H_e + H_{ph} \\ + B_{j\mathbf{q}} \sum_{\alpha\beta} \left[\underbrace{(n_{j\mathbf{q}} + 1) \sigma_{k'}^{\lambda\alpha}}_{\text{Phonon-Emission}} (\delta_{\beta\lambda'} - \underbrace{\sigma_{k'}^{\beta\lambda'}}_{\text{Pauli-Blockade}}) \right. \\ \left. - n_{j\mathbf{q}} \sigma_{k'}^{\beta\lambda'} (\delta_{\lambda\alpha} - \sigma_{k'}^{\lambda\alpha}) \right] \end{array} \right\} H_{e-ph}$$

Phonon-Absorption

Annahmen: - kohärente Phononen werden vernachlässigt,
d.h. $B_{j\mathbf{q}} = \langle b_{j\mathbf{q}} \rangle = 0 \Rightarrow \delta S = S$

- Korrelationsentwicklung

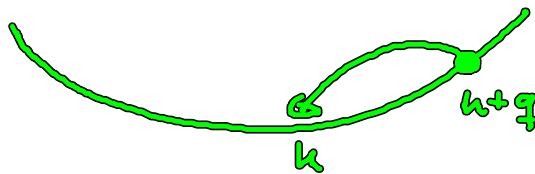
$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle \approx \underbrace{\langle a_1^\dagger a_4 \rangle}_{\text{Hohle-Fock}} \langle a_2^\dagger a_3 \rangle - \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle$$

siehe Kapitel VII

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

5. Quantenkinetik am Beispiel eines Einbandmodells

$$i\hbar \dot{f}_k(t) = \sum_q D_q \left[\begin{aligned} &\langle b_{-q}^\dagger a_k a_{k-q} \rangle && \textcircled{1} \quad T \\ &+ \langle b_q a_k^\dagger a_{k-q} \rangle && \textcircled{2} \quad S \\ &- \langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle && \textcircled{3} \quad T \\ &- \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle && \textcircled{4} \quad S \end{aligned} \right]$$



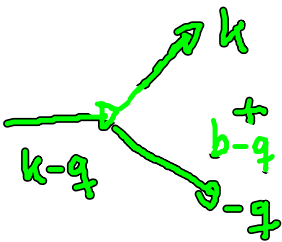
Intraband
Elektron-Phonon Streuung
realistische Näherung,
da die Phononenergie
nicht ausreicht, um eine
typ. Bandlücke von 1eV
zu überwinden

Phonon-Emission

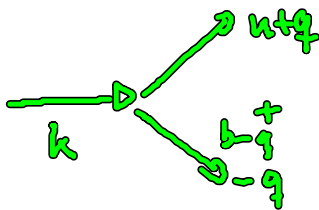
Impuls-Erhaltung
→ $\hbar k = \hbar k' + \hbar q$, d.h.
Impuls vorher =
Impuls nachher

Phonon-Emission

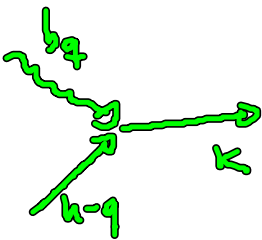
①



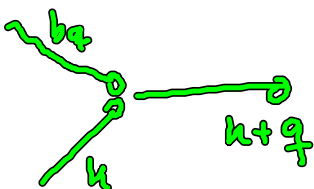
③



②



④



als Beispiel ④ Phonon-Absorption

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

mit der Bose-Verteilung $n_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q/k_B T} - 1}$

Badnäherung, d.h. keine eigene Dynamik für die Phononbesetzung (gute Näherung für schwache Elektron-Phonon-Wechselwirkung)

Beispiel ⑤ Phonon-Emission

$$i\hbar \frac{d}{dt} T_{-q}^{k+q} = (\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - \hbar\omega_q) T_{-q}^{k+q} + D_q \left[\underbrace{+ n_q f_{k+q} (1 - f_k)}_{\text{Einstrahl-Term}} - \underbrace{(n_q + 1) f_k (1 - f_{k+q})}_{\text{Ausstrahl-Term}} \right]$$

5.1 Quantenkinetische Stoß-Gleichung (Nicht-Markovsche Dynamik)

Die DGL für S,T kann formal aufintegriert werden

$$g(t) = -i\Delta\omega g(t) + \underbrace{f(t)}_{\text{Streu-Kern}} \quad f(t) = \frac{i}{\hbar} D_q \left[n_q f_{k+q} (1 - f_k) - (n_q + 1) f_k (1 - f_{k+q}) \right] + 3 \text{ weitere Terme}$$

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

homogene Lösung verschwindet aufgrund der Anfangsbedingung
 $g(t_0) = 0$

Einsetzen in $f_n(t)$:

$$\dot{f}_k(t) = - \int_{-\infty}^t dt' f_{aus}(t, t') f_n(t') \quad \left. \vphantom{\int_{-\infty}^t} \right\} \begin{array}{l} \text{Ausstrahl-Term} \\ \sim f_k \end{array}$$
$$+ \int_{-\infty}^t dt' f_{ein}(t, t') (1 - f_n(t')) \quad \left. \vphantom{\int_{-\infty}^t} \right\} \begin{array}{l} \text{Einstrahl-Term} \\ 1 - f_k \\ \text{Pauli-Blockung} \end{array}$$

Quantenkinetische Gleichung zur Berechnung der Besetzungswahrscheinlichkeit f_k

Die Gleichung beinhaltet eine Zeitretardierung

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

Man spricht von Gedächtnis-Effekten (Nicht-Markovsche Dynamik)
Energie-Zeit-Unschärfe: Teilchen "erinnern" sich während eines Stoßes an bereits vergangene. Energieerhaltung ist nicht zu jedem Zeitpunkt gegeben.

Beitrag verschwindet bei $f_k = 1$