

# VI. Elektron-Phonon Wechselwirkung

Bis hierhin haben wir zwei System getrennt behandelt:

Elektronische System

$$\sum_n V_{e-i} (\underline{k}_i - \underline{R}_n)$$



Quasielektron

Sitterschwingung.

Ionenposition

$$\underline{R}_n = \underline{R}_n^0 + \underline{u}_n$$



Phonon

←

Bewegung der Elektronen in dynamischen Gitter

Zwei Herangehensweisen:

- 1) Formale Herleitung aus der Elektron-Ion Kopplung
- 2) Ansätze die Kopplung zur Parametrisierung (aus Materialparametern)  
Starte dabei ab initio herleiten

- Beispiele:
- a) Deformationspotentialkopplung (akustische Phonon)
  - b) Piezoelektrische Kopplung (akustische Phonon)
  - c) Polar optische Kopplung (optische Phonon)

Danach betrachten wir erste Anwendungen der Elektron-Phonon

Kopplung (Optik). Weiteren Anwendungen folgen beim  
elektronischen Transport.

## VI.1 Herleitung aus der Elektron-Ion Kopplung

Startpunkt (noch nicht 2. Quantisiert)

$$H_{e-i} = \sum_i \sum_j V_{el-i} (x_i - R_j)$$

$\uparrow$  Elektron                       $\uparrow$  Ion                       $\downarrow$   $R_j^0 + u_j$   
 Releposition

Taylorentwicklung um Releposition ( $R_j^0$ )

$$V_{el-i} (x_i - R_j) = \underbrace{V_{el-i} (x_i - R_j^0)}_{\text{Bereits in Elektronenproblem bekannt}} - \underbrace{u_j \cdot \nabla V_{el-i} (x_i - R_j^0)}_{\text{Länge Mälung Dies ist die Elektron-Phonon Kopplung}} + \dots$$

ergo

$$H_{elektron-phon} = \sum_i \sum_j - u_j \cdot \nabla V_{el-i} (x_i - R_j^0)$$

TO DO: Formulierung der beiden Teilsystemen in 2. Quantenm.  
 $i\varphi \cdot (x_i - R_j^{(0)})$

$$\sum_i \nabla V_{el-i}(x_i - R_j^{(0)}) \stackrel{\substack{\text{Darstellung als} \\ \text{Fourierreihe}}}{=} i \frac{1}{N} \sum_{\varphi} \varphi V_{el-i}(\varphi) e$$

$$\nabla V_{el-i}(x) = \frac{1}{N} \sum_{\varphi} V_{el-i}(\varphi) e^{i\varphi \cdot x}$$

$$\nabla V_{el-i}(x) = i \frac{1}{N} \sum_{\varphi} \varphi V_{el-i}(\varphi) e^{i\varphi \cdot x}$$

Damit sieht, dass Potential des durch die Ionen erzeugt wird als wie:

$$\tilde{V}(x) = - \sum_j u_j \cdot \nabla V_{el-i}(x - R_j^{(0)})$$

Ergebnis einsetzt:

$$\tilde{V}(x) = - \frac{i}{N} \sum_{\varphi} \left( \sum_j u_j e^{-i\varphi \cdot R_j^{(0)}} \right) e^{i\varphi \cdot x} V_{el-i}(\varphi)$$

Definition von  $u_j$ :

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{M_j N}} \sum_{\varphi} A_{\nu_j}(\varphi) e^{i\varphi \cdot R_j^{(0)}} \\ \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\nu_j}}} (b_{\nu_j}^{\dagger} + b_{\nu_j})$$

$$\rightarrow \frac{i}{N} \sum_j u_j e^{-i\varphi \cdot R_j^{(0)}}$$

$$= \frac{-i}{N} \sum_j \frac{1}{\sqrt{M_j N}} \sum_{\varphi} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\nu_j}}} A_{\nu_j}(\varphi) e^{i\varphi \cdot R_j^{(0)} - i\varphi \cdot R_j^{(0)}} (b_{\nu_j}^{\dagger} + b_{\nu_j}) \\ \frac{1}{N} \sum_j e^{i(\varphi - \varphi) \cdot R_j^{(0)}} = N \sum_{\varphi} \delta_{\varphi - \varphi} \rho_{\nu_j}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\underline{q}} \frac{1}{\sqrt{M_j}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\underline{q}+\underline{G}}}} A_e(\underline{q}+\underline{G}) \left( b_{\underline{q}+\underline{G}}^+ + b_{\underline{q}+\underline{G}} \right)$$

Jetzt in  $\tilde{V}(k)$  einsetzen und  $\underline{q}$  auf die Brillouin Zone einschränken (Immer hinterher über welche Bereich die Summe läuft)

$$\tilde{V}(r_i) = i \sum_{\underline{r}, \underline{q}} e^{i(\underline{q}+\underline{G}) \cdot \underline{r}} V_{el}(\underline{q}+\underline{G}) (\underline{q}+\underline{G}) \cdot A_e(\underline{q}) \left( \frac{\hbar}{2m\omega_{\underline{q}+\underline{G}}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( b_{\underline{q}+\underline{G}}^+ + b_{\underline{q}+\underline{G}} \right)$$

Das kann wir auch in die zweite Quantisierung überführen

Bemerkung:  $\rho(\underline{k}) = \sum_i \delta(\underline{k} - \underline{r}_i)$  (Erste Quantisierung)

hat die Form

$$\rho(\underline{k}) = \psi^\dagger(\underline{k}) \psi(\underline{k}) = \sum_{\lambda, \mu} a_\lambda^\dagger a_\mu \phi_\lambda^\dagger(\underline{k}) \phi_\mu(\underline{k})$$

Die Form Transfer der Elektronen (klassisch)

$$\rho(\underline{q}) = \sum_i e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}_i}$$

2. Quantisierung

$$\rho(\underline{q}) = \int d^3 \underline{r} e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} \rho(\underline{k}) = \sum_{\lambda, \mu} a_\lambda^\dagger a_\mu \int d^3 \underline{r} e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} \phi_\lambda^\dagger(\underline{r}) \phi_\mu(\underline{r})$$

Für Blochwellen  $\phi_{\lambda\mu}(\underline{r}) = \frac{e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}}{\sqrt{V}} u_{\lambda\mu}(\underline{r})$

ergibt sich dann in erster Näherung für  $\rho(\underline{q})$  in ein Band

$$\rho_\lambda(\underline{q}) \approx \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}}$$

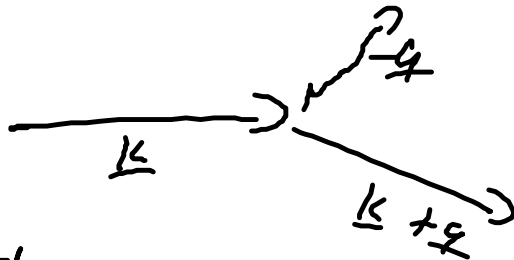
Wir können die Elektron-Phonon Wechselwirkung umschreiben in 2. Quantisierung:

$$H_{e-p} = \int d^3r \rho(\underline{k}) \tilde{V}(\underline{k})$$

$$= \sum_{\substack{q, q', l \\ 1, 4}} i V_{e-l}(\underline{q} + \underline{q}') (\underline{q} + \underline{q}') \cdot A_e(\underline{q}) \left( \frac{\hbar}{2m_e \omega} \right)^{\frac{1}{2}} a_{\lambda, \underline{k} + \underline{q} + \underline{q}'} a_{\lambda, \underline{k}} \\ \uparrow \\ \text{Bandindex} \quad (b_{q, l} + b_{q', l})$$

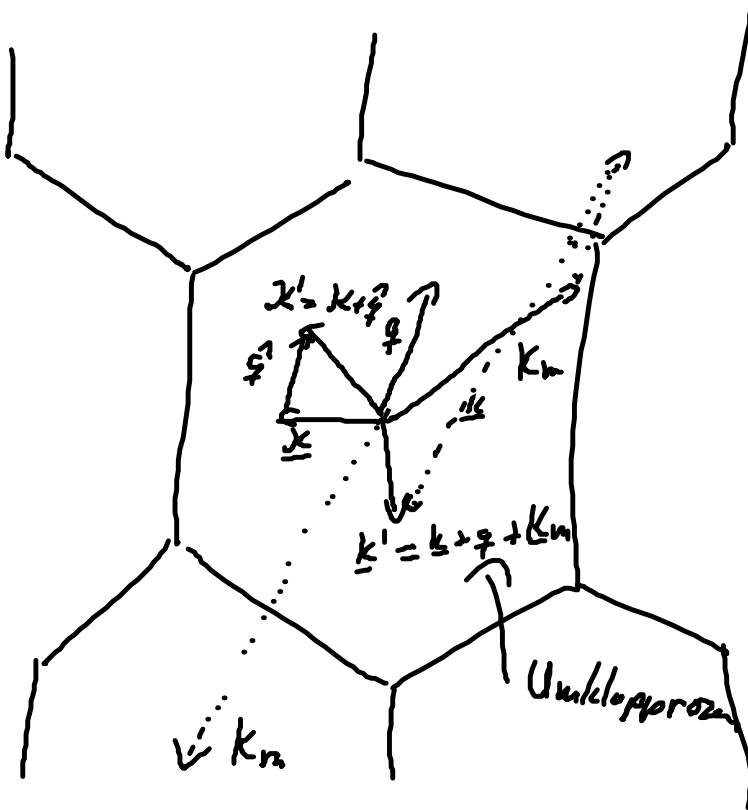
## Bemerkung

- (1) Der Ham. Op hängt von  $\frac{1}{\sqrt{M}}$ , wobei  $M$  die Masse der Ionen ist. Dies wird ein wichtiger Punkt bei der Supraleitung sein.
- (2) Im Moment ist  $V_{e-l}$  noch ein ungeschichtetes Coulombpotential. Wir werden sehen, dass die Elektron-Elektron WW z.B. in Metallen Abschirmungseffekte erzeugt, die dieses Potential signifikant reduziert.
- (3) Das Potential  $V_{e-l}$  wird teilweise aus ab-initio Techniken wie DFT, aber auch durch Pseudopotentialmethode berechnet.
- (4) Dieser Hamilton op. beschreibt den Prozess, dass ein Elektron über Emission oder Absorption eines Phonons an Gitter steht.



- (5) Häufig ist  $V_{e-l}$  in seiner üblichen Form schwer zu ermitteln, daher parametrisierte Zusätze

(6) Umklappprozess beim Normalprozess Brillouin



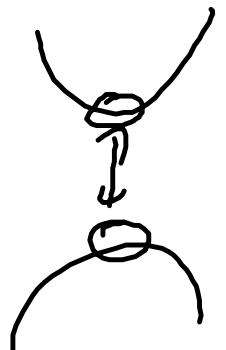
(7) Durch Emission und Reabsorption kann ein effektives Elektron-Elektron-We entstehen  $\rightarrow$  Superleitung

(8) Wegen  $(q + \frac{\pi}{a}) \cdot A_e(q)$  sieht man dass für  $q=0$  nur longitudinale Phon koppeln.

## VI.2 Deformationpotential Kopplung

Erstes Beispiel für ein quadratisches Kopplung.  
Die Idee für die Kopplung setzt davon aus dass im reziproken Raum (also  $k$ -Raum) die angeregten Zustände in ein klein Bereich nur wichtig sind.

Dies sind z. B die Zustände am Bandminimum wichtig (meist in Zone mitte oder -rand)  
Hier dominieren Phon mit kleinem  $q$  die Wechselwirkung.



Für langwellige Phänomene übergrößen werden die Halbleiter durch folgende Kopplungen charakterisiert.

Defomationspotentialkopplung, piezoelektrische Kopplung und Fröhlich-Kopplung. Taleustil Optisch

Defomationspotentialkopplung für optische Phänomene ist möglich, aber unüblich und kaum verstanden!

Wichtig: Diese Kopplungen sind nur gültig für langwellige Phänomene. Nicht für kurzwellige Phänomene!  
Bei kurzwelligen Phänomenen schließt auch der Unterschied zwischen transversalen und longitudinalen Zuständen ein.  
| das für Defomationspotential

1) langwellige Grenzwellenlänge  $\omega = 0$

(für  $\omega \neq 0$  wären es kurzwellige Phänomene)

$V_{e-i,1}(\omega) \rightarrow D_1$  für die Defomationspotentialkopplung

(Elektronenabschnitt)  $H_{el-ph} = \sum_{\lambda_1} i D_1 \omega \cdot A_e(\omega) \left( \frac{1}{2\omega_{\lambda_1}} \right)^{\frac{1}{2}} a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2} (b_{\lambda_1}^\dagger + b_{\lambda_2})$

$\Rightarrow$  Elektron-Phonon-Kopplung für das Defomationspotential wird durch Parameter  $D_1$  bestimmt.

Wie  $D_1$  messen?

Im Exp. wird die Veränderung der Energie bei Variation des Drucks gemessen. (D ist dann die Rate mit der sich die Bandenergie bei Druck ändert)

### VI.3 Piezoelektronische Koppler

Viele Halbleiter zeigen den Piezoelektronen Effekt

makroskopisch sieht es aus als elektrisches Feld falls der Kristall gestaucht wird.

Übersicht über Vorkommen von Piezoelektrizität

Gruppe	Beispiel	Piezoeffekt
IV	Ge, Si	kein!
III-V	GaAs	schwach
II-VI	CdS, ZnO	es extrem

Kurze Skizze der Herleitung:

(1) 
$$E_k = \sum_{ij} M_{ijk} \underbrace{S_{ij}}_{\text{Druck oder Verspannung}}$$

(2) Definition von  $S_{ij}$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} i \sum_{q \neq k} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu_q \mu_k}} (A_q^i q_j + A_q^j q_i) (b_{qj}^+ + b_{-qj}^-)$$

Es kann gezeigt werden, dass nur der longitudinale Anteil  $e$  des E-Felds beiträgt.

(3) 
$$E_k = -\frac{\partial}{\partial x_k} \phi(k) = -\frac{1}{rV} \sum_q i q_k \phi_q e^{iq \cdot k}$$



Sowohl  $E_k$  wie auch  $S_{ij}$  sind linear in den Komponenten  
 von  $\vec{q}$ , durch Vergleich sieht man (1)-(3)  
 dass  $\phi(r) \propto u(r)$

$$\psi_{H_{e.i}} = e \sum_j \phi(r_j)$$

$$\Rightarrow \phi(r) = - \sum_j \left( \frac{q_j}{2\epsilon_0 N_A} \right)^{\frac{1}{2}} M_j(\vec{q}) e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} (b_{q_j}^+ + b_{-q_j})$$

Das ergibt die Elektron-Phonon Kopplung:  
 Normiert! Beschreibt Richtungsabhängigkeit

$$H_{e-ph} = - \sum_j \left( \frac{q_j}{2\epsilon_0 N_A} \right)^{\frac{1}{2}} M_j(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^+ a_{\vec{k}} (b_{q_j}^+ + b_{-q_j})$$