VI.3 Piezoelektrische Kopplung (Fortsetzung)

Elektron-Phonon Hamiltonop. der piezoelektrischen Kopplung:

$$H_{e-p} = -\sum_{\substack{q \lambda k \\ j}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_q NM}\right)^{\frac{1}{2}} M_j(\hat{q})\, a^+_{\lambda k+q}\, a_{\lambda k} \left(b^+_{qj} + b_{-qj}\right)$$

a) Kopplungselement ist richtungsabhängig!

b) Es gilt $M_j(-\hat{q}) = -M_j(\hat{q})$ Hermitischer Hamiltonoperator

c) Kopplung ist stark von der Polarisationsrichtung abhängig.

d) Es ist üblich das Kopplungselement zu mitteln über verschiedene Winkel von q

e) akustische Phononen wechselwirken meist sowohl über das Deformationspotential als auch über die Piezoelektrische Kopplung.

Man kann eine Gesamtkopplung definieren

$$\hat{M}_{j,\lambda}(q) = i\left(\underbrace{D_\lambda |q|}_{\text{reell}} + \underbrace{i M_j(\hat{q})}_{\text{Imaginär}}\right)$$

$\Downarrow$ zweiter Ordnung

$$|\hat{M}_{j,\lambda}(q)|^2 = D_\lambda^2 q^2 + |M_j(\hat{q})|^2$$

VI.4 Polar optische Kopplung (Fröhlich Kopplung)

In ionischen Kristallen kann die Polar optischen

Kopplung (auch Fröhlich Kopplung genannt) sehr starke Ein!
Diese Kopplung koppelt nur an LO-Phonon nicht an TO-Phonon!

<u>Herleitung</u>: (System kein Ladungen)

$$\nabla \cdot \underline{D} = 0 = \sum_q \underline{q} \cdot (\varepsilon_0 \underline{E}_q + \underline{P}_q)$$

Für LO-phononen mit Wellenvektor q sind $E_q, P_q \parallel q$, daraus folgt

$$\varepsilon_0 \underline{E}_q = -\underline{P}_q$$

Annahme $\underline{P}_q = \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Proportionalitätskonstante}}}{V} e \, \underline{u}_q$) Ionen mit verschiedenen Ladung $\Rightarrow$ oszillieren

also

$$\underline{E}_q = -\frac{1}{\varepsilon_0} V e \, \underline{u}_q = -\frac{1}{\varepsilon_0} V e \left(\frac{\hbar}{2\omega_q N M}\right)^{\frac{1}{2}} \hat{q} \, (b_q^+ + b_{-q})$$

ω_q: ω_{LO}; $\hat{q}$: Polarisationsvektor

Jetzt Bestimmung von $\phi(\mathbf{r})$ als nächstes Ziel

$$\underline{E} = -\nabla\phi = -i \sum_q e^{i q \cdot r} q \, \phi_q$$

$$\Downarrow$$

$$\phi(r) = -i \sum_q e^{i q \cdot r} \frac{V}{\varepsilon_0 q} \left(\frac{\hbar}{2\omega_{LO} N M}\right)^{\frac{1}{2}} (b_q^+ + b_{-q})$$

Analog zur Piezoelektrischen Kopplung ergibt sich $H_{el-I} = \sum_i e \, \phi(r_i)$

$$H_{el-ph} = ie \sum_{qj} \left(\frac{\hbar}{2\omega_{L0} N M}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{U}{\varepsilon_0 q} \, a^\dagger_{\lambda k+q} a_{\lambda k} \left(b^\dagger_{qj} + b_{-qj}\right)$$

U kann mit Vergleich zu Elektrostatischen Rechnung von Elektronen und Polarisierten Moden berechnet werden.
(z.B. Mahan, Many Particle Physics oder Haken)

Dann ergibt sich:

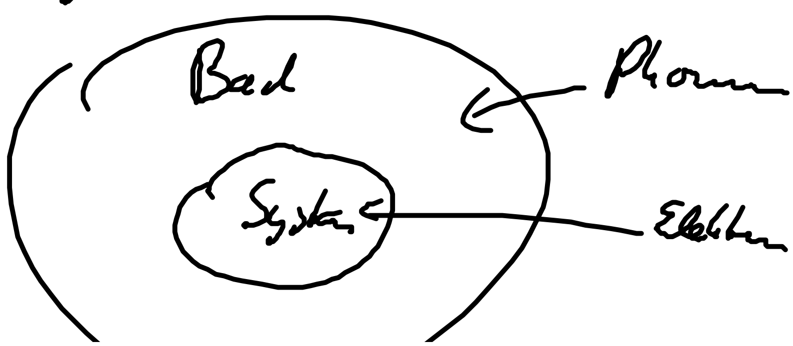
$$H_{el-ph} = ie \sum_{q} \frac{1}{q} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{L0}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s}\right)}{4\pi \varepsilon_0 V \cdot 2}} \, a^\dagger_{\lambda k+q} a_{\lambda k} \left(b^\dagger_{qj} + b_{-qj}\right)$$

ε_∞ : Hochfrequenzdielektrizitätskonstante

ε_s : statische Dielektrizitäts- "

VI.5 Projektions Operator Techniken für System-Badwechselwirkung
(z.B. Elektron-Phonon WW)

Häufig kann man das Gesamtsystem aufteilen in System und Bad



Uns interessieren nur die Freiheitsgrade des Systems!

Das Bad hat viele Freiheitsgrade und ist oft nahe am thermodynamischen Gleichgewicht.

<u>Beispiel</u>

System ist meist elektronisches System

Bad können ein Ensemble von Phononmoden, oder auch ein Ensemble von Elektronen sein.

Wenn wir eine elektronische Observable $\hat{O}$ betrachten passiert folgendes

$$\langle \hat{O} \rangle = tr(\hat{O} \rho)$$

ONB im Bad

$$tr(\ldots) = \sum_{nm} {}_S\langle n| \, {}_B\langle m| \cdots |m\rangle_B \, |n\rangle_S$$

ONB im System

$$\langle \hat{O} \rangle = tr(\hat{O}\rho) = tr_S(tr_B(\hat{O}\rho)) = tr_S(\hat{O} \; tr_B(\rho))$$

wirkt nicht auf O, da O Systemoperator

Im Prinzip reicht es aus,
wenn wir nur die relevante Dichtematrix

$\rho_R = tr_B \rho$, ρ_R hat sehr viel sehr niedrige Dimension

Aber Achtung

ρ_R lebt nur im Liouvilleraum (Raum der Dichtematrix) des Systems!

Unser Hamiltonoperator insbesondere für die System-Bad Kopplung ist Operator im Produktraum von System und Bad.

Wir müssen also ρ_R ergänzen

$$\rho_R \otimes \underbrace{\rho_B}_{\text{Bad im Gleichgewicht. z.B. kanonische Verteilung}}$$

Blick auf den Erwartungswert

$$tr(\hat{O}\ \rho_R \otimes \rho_B) = tr_S(O\rho_R)\ \overbrace{tr_B(\rho_B)}^{=1} = tr_S(O\rho_R)$$

Aber auch der Einfluss von Abweichungen der kanonischen Verteilung ist wichtig. Lösung: Projektionsoperatorformalismus!

$$\mathcal{P}\rho := \underbrace{tr_B(\rho)}_{\text{relevanter Anteil}} \otimes \underbrace{\rho_B}_{\text{Bad im Gleichgewicht}} \qquad \mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$$

Der zu $\mathcal{P}$ orthogonale Projektor ist $Q = Id - \mathcal{P}$

Damit kann die Dichtematrix zerlegt werden mit ($\mathcal{P} + Q = Id$)

$$\rho = \underbrace{\mathcal{P}\rho}_{\text{relevanter Anteil}} + \underbrace{Q\rho}_{\text{nicht relevanter Anteil}} \Leftarrow \text{Abweichung des Bades vom Gleichgewicht}$$

<u>Ziel</u>: Bewegungsgl. für $\mathcal{P}\rho$ ableiten!

Wir werden dabei, das Wechselwirkungsbild verwenden.

$$H = \underbrace{H_{0,S}}_{\text{System}} + \underbrace{H_{0,Bad}}_{\text{Bad}} + \underbrace{H_{SB}}_{\text{System Bad Wechselwirkung}}$$

H_{SB} beschreibt die Dynamik der Dichtematrix.

VI.6 Die Nakajima-Zwanzig Gleichung

Die Liouville-von Neumann Gleichung kann mit Hilfe von Superoperatoren (Operatoren im Liouville Raum (Hilbertraum der Spurklassenoperatoren))

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{i}{\hbar}\left[\rho, H_{SB}\right]_- = -\frac{i}{\hbar} H_{SB,-}\,\rho = \underset{\substack{\Uparrow \\ \text{Manche Autoren schreiben Liouvillen.}}}{L_{SB}}\,\rho$$

Wobei:

$$A_L\,\rho = A\rho \quad , \quad A_R\,\rho = \rho A$$

und $A_- := A_L - A_R \qquad A_+ = \frac{1}{2}\left(A_L + A_R\right)$

Wir nehmen jetzt die Gleichung und teilen diese in einen irrelevanten und relevanten Teil auf: $(P + Q = \mathrm{Id})$

Zuerst P von links anwenden.

$$\text{(i)} \quad \frac{\partial}{\partial t} P\rho = -\frac{i}{\hbar} P H_{SB,-}(t) \underset{\mathrm{Id}=P+Q}{\uparrow}\rho = -\frac{i}{\hbar} P H_{SB,-}(t) P\rho(t) - \frac{i}{\hbar} P H_{SB,-}(t) Q\rho(t)$$

Analog

$$\text{(ii)} \quad \frac{\partial}{\partial t} Q\rho = -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB,-}(t) P\rho(t) - \frac{i}{\hbar} Q H_{SB,-}(t) Q\rho(t)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB,-}(t) Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar} Q H_{SB,-}(t) P\rho(t)$$

Wir versuchen (ii) jetzt formal zu lösen:

Wir definieren uns den Propagator G, der

$$\frac{\partial}{\partial t} G(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB,-}(t)\, G(t, t_0) \qquad G(t,t) = \mathrm{Id}$$

Dieser ist (ii*): (Analog zum Propagator im Hilbertraum jetzt Propagator im Liouvilleraum)

$$G(t, t_0) = T_{\leftarrow} \exp\left(\int_{t_0}^{t} -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB,-}(t')\,dt'\right)$$

Wir wenden $[G(t,t_0)]^{-1} = G(t_0, t)$ jetzt von links an (ii)

$$G(t_0,t)\frac{\partial}{\partial t} Q\rho = -\frac{i}{\hbar} G(t_0,t)\, Q H_{SB,-}(t) Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar} G(t_0,t)\, Q H_{SB,-}(t) P\rho(t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} G(t_0,t)\, Q\rho - \frac{i}{\hbar} G(t_0,t)\, Q H_{SB,-}(t)\, Q\rho(t)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} G(t_0,t)\, Q H_{SB,-}(t) Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar} G(t_0,t)\, Q H_{SB,-}(t) P\rho(t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}(t_0,t)\, Q\varrho = -\frac{i}{\hbar}\, \mathcal{G}(t_0,t)\; Q\, H_{SB,-}(t)\, \mathcal{P}\varrho(t)$$

Integrieren

$$\mathcal{G}(t_0,t)\, Q\varrho(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{G}(t_0,s)\; Q\; H_{SB,-}(s)\, \mathcal{P}\varrho(s)\, ds \qquad \mid \mathcal{G}(t,t_0)$$

$$\| \quad Q\varrho(t) = \underbrace{\mathcal{G}(t,t_0)\,\mathcal{G}(t_0,t)}_{\mathrm{Id}}\, Q\varrho(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{G}(t,s)\, Q\, H_{SB,-}(s)\, \mathcal{P}\varrho(s)\, ds + \mathcal{G}(t,t_0)\; Q\varrho(t_0) \quad \|$$

Das kann jetzt in die Gleichung für $\mathcal{P}\varrho$ eingesetzt und

$$\| \; \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\varrho = -\frac{i}{\hbar}\, \mathcal{P} H_{SB,-}(t)\, \mathcal{P}\varrho(t) - \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} \mathcal{P} H_{SB,-}(s)\, \mathcal{G}(t,s)\, Q H_{SB,-}(s)\, \mathcal{P}\varrho(s)\, ds + \frac{i}{\hbar}\, \mathcal{P} H_{SB,-}(t)\; \mathcal{G}(t,t_0)\; Q\varrho(t_0) \; \|$$

Nakajima-Zwanzig Gleichung