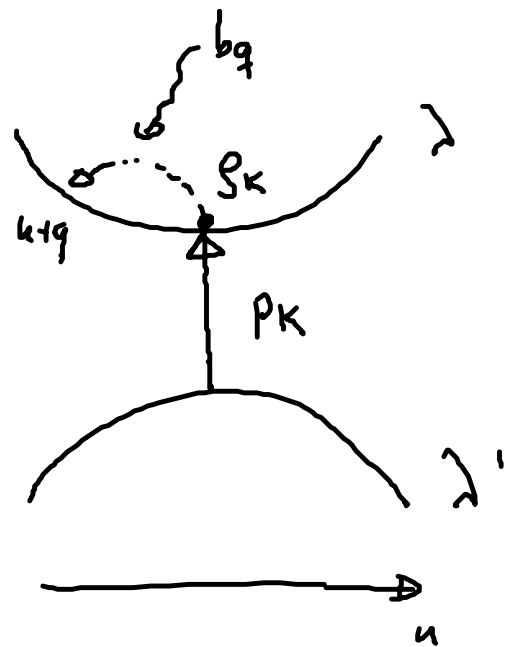


weiter zu 4. Bloch-Gleichungen

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



Heisenbergsche Bewegungsgl.

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

Hamilton-Operator

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

$$i\hbar \dot{p}_k \Big|_{H_e} = (\epsilon_{c_k} - \epsilon_{v_k}) p_k$$

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

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

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

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

$$\left(a_{v\mu+q}^\dagger a_{c\mu} \right) - \sum_{\lambda'k'} a_{\lambda'k'+q}^\dagger \left(a_{v\mu}^\dagger \right) a_{\lambda'k'} a_{c\mu}$$

$\delta_{\lambda'c} \delta_{\mu\mu'+q} - a_{c\mu} a_{\lambda'k'+q}^\dagger$

$$- a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu-q} + \sum_{\lambda'k'} a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu} \cancel{a_{\lambda'k'+q}^\dagger} a_{\lambda'k'}$$

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

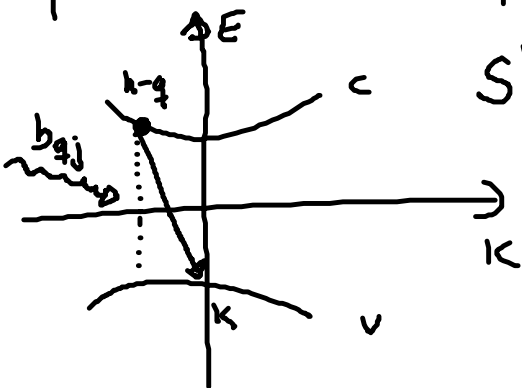
$$= \sum_{j\neq} D_{qj} \left[\left\langle b_{-q}^\dagger a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu-q} \right\rangle - \left\langle b_{-q}^\dagger a_{v\mu+q}^\dagger a_{c\mu} \right\rangle \right]$$

$= T_{j-q}^{v\mu c\mu-q}$
 $= T_{j-q}^{v\mu+q c\mu}$

$$+ \left\langle b_{qj} a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu-q} \right\rangle - \left\langle b_{qj} a_{v\mu+q}^\dagger a_{c\mu} \right\rangle$$

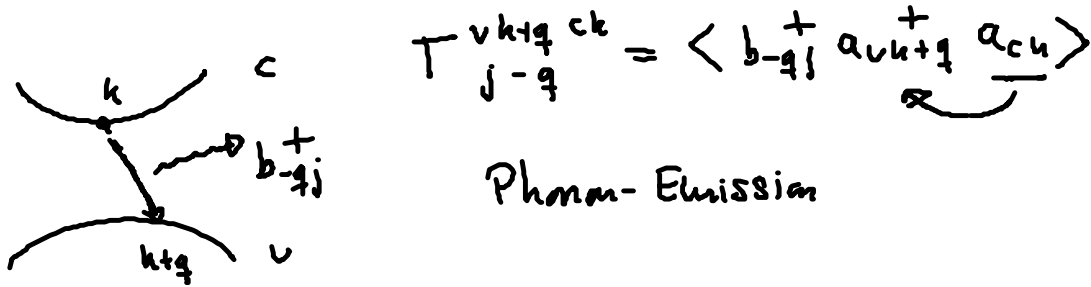
$= S_{j\neq}^{v\mu c\mu-q}$
 $= S_{j\neq}^{v\mu+q c\mu}$

Phonon-assistierte Größen S, T



$$S_{j\neq}^{v\mu c\mu-q} = \left\langle b_{qj} a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu-q} \right\rangle$$

Phonon-Absorption



$$T_{j-q}^{vk+q, ck} = \langle b_{-q}^+ a_{vk+q} a_{ck} \rangle$$

Phonon-Emission

Insgesamt Bloch-Gleichungen

$$i\hbar \dot{\rho}_{ic} = \underbrace{(E_{cv} - E_{vu}) \rho_{ic}}_{He} + \underbrace{\sum_{j \neq i} D_{qj} \left[S_{j \neq i}^{vk, ck-q} - S_{j \neq i}^{vk+q, ck} + T_{j \neq i}^{vk, ck-q} - T_{j \neq i}^{vk+q, ck} \right]}_{He-ph}$$

Analog für ρ_{ic}^{λ} (Übungsaufgabe)

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

Das Gleichungssystem schließt nicht, da neue Größen auftauchen.

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

[$\rho_{ik} = \langle a_{ik}^{\dagger} a_{ik} \rangle$] an Terme höherer Ordnung wie

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

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 tauschen nicht im selben Erwartungswert auf [da $\langle a^+ \rangle, \langle a \rangle = 0$]

$$S_{j\eta}^{\lambda\eta} \lambda'\eta' = \langle b_{j\eta} a_{\lambda\eta}^+ a_{\lambda'\eta'} \rangle \approx \langle b_{j\eta} \rangle \langle a_{\lambda\eta}^+ a_{\lambda'\eta'} \rangle$$

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

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

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

2. Ordnung: Streuung und Dephasierung

Abweichung zum Beitrag der 1. Ordnung

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

Neue Bewegungsgleichung für die phonon-assistierte Größe

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mathbf{k}\lambda'\mathbf{k}'} = \left[\underbrace{\varepsilon_{\lambda'\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\lambda\mathbf{k}}}_{\text{He}} \oplus \underbrace{\hbar \omega_{j\mathbf{q}}}_{\text{HPh}} \right] \delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mathbf{k}\lambda'\mathbf{k}'} \quad \left. \vphantom{\frac{d}{dt} \delta S_{j\mathbf{q}}^{\lambda\mathbf{k}\lambda'\mathbf{k}'}} \right\} \text{He} + \text{HPh}$$

$$+ D_{j\mathbf{q}} \sum_{\alpha\beta} \left[\underbrace{\frac{(n_{j\mathbf{q}} + 1) \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\alpha}}{\text{Phonon-Emission}}}_{\text{Phonon-Emission}} (\delta_{\beta\lambda'} - \underbrace{\sigma_{\mathbf{k}'}^{\beta\lambda'}}_{\substack{\uparrow \text{Pauli-Blockierung} \\ \downarrow}}}) \right. \\ \left. - n_{j\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{k}'}^{\beta\lambda'} (\delta_{\lambda\alpha} - \sigma_{\mathbf{k}}^{\lambda\alpha}) \right] \quad \left. \vphantom{\sum_{\alpha\beta}} \right\} \text{Heph}$$

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

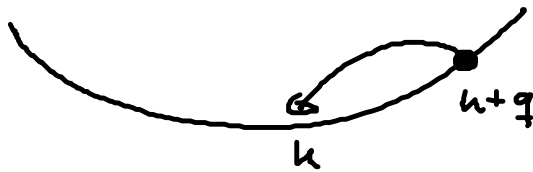
$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle \approx \underbrace{\langle a_1^\dagger a_4 \rangle}_{\text{Hartree-Fock}} \langle a_2^\dagger a_3 \rangle - \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle$$

siehe Kapitel VII

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

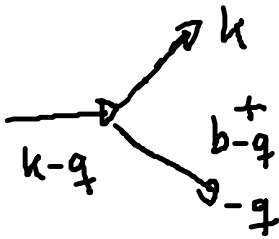
5. Quantenkinetik am Beispiel eines Einbandmodells

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



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

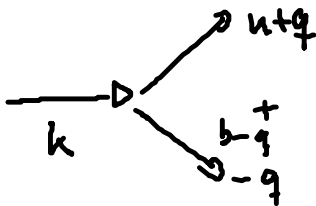
①



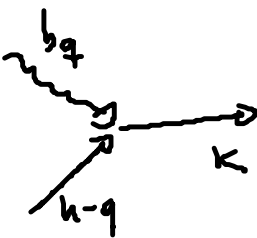
Phonon-Emission

Impuls-Erhaltung
erfüllt, d.h.
Impuls vorher =
Impuls nachher

③



②



Phonon-Emission

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 Phononberechnung (gute Näherung für schwache Elektron-Phonon-WW)

Beispiel ③ Phonon-Emission

$$i\hbar \frac{d}{dt} T_{-q}^{k+q} = (\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - \hbar\omega_q) T_{-q}^{k+q} + D_q \left[\begin{array}{l} + n_q f_{k+q} (1 - f_k) \quad \text{Einstreu-Term} \\ - (n_q + 1) f_k (1 - f_{k+q}) \quad \text{Ausstreuterm} \end{array} \right]$$

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

Beitrag verschwindet bei $f_k = 1$

Die Gleichung beinhaltet eine Zeitretardierung

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

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.