3. Dynamische Variable des gekoppelten El-Ph-Systems

beobachtbare Größen im Elektron / Ionsystem:

a) Elektronen: Optik, Transport → Quelle der Maxwellgleichg.

Ladungsdichte: $\rho(r,t) = q\,\underline{\Psi}^{+}(r,t)\,\underline{\Psi}(r,t)$

$$\rho(r,t) = q\sum_{n_1 n_2} \varphi_{n_1}^{*}(r)\,\varphi_{n_2}(r)\;a_{n_1}^{+}(t)\,a_{n_2}(t)$$

Stromdichte: $\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\,\underline{\Psi}^{+}(r,t)\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)\underline{\Psi}(r,t) + h.a.$

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{n_1 n_2} \varphi_{n_1}^{*}(\vec{r})\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)\varphi_{n_2}(r)\;a_{n_1}^{+}(t)\,a_{n_2}(t) + h.a.$$

$\varphi_n(r)$ sind Eigenfunktionen nach denen Feldoperatoren $\underline{\Psi}^{+}, \underline{\Psi}$ entwickelt werden, z.B

$$H_0\,\varphi_n = \varepsilon_n\,\varphi_n\;,\quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_G(\vec{r})$$

Elektron im Gitter →

φ_n: Blochfunktionen

b) Lösen:

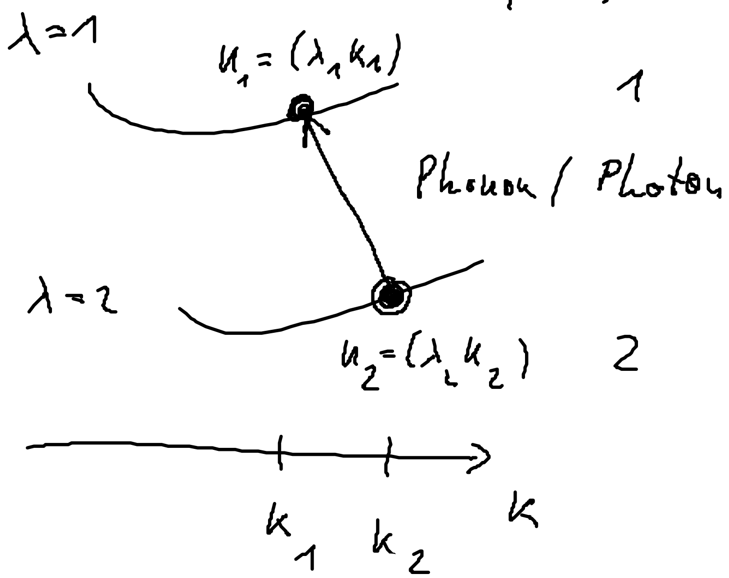
Auslenkung $\vec{u}_{ns} = \sum_{jq} \left(\frac{\hbar}{2N m_s \omega_j(q)}\right)^{1/2} \vec{A}_s(q)\, b^+_{qj}\, e^{-i\vec{q}\vec{a}_n} + h.a.$

$\rightarrow$ beobachtbare Größen gegeben durch $\langle j \rangle$, $\langle \rho \rangle$, $\langle u \rangle$

$\langle a^+_{n_1}(t)\, a_{n_2}(t) \rangle$ und $\langle b_{qj}(t) \rangle$,

$\langle b^+_{qj} b_{qj} \rangle$

$n = (\lambda, k)$



Die beobachtbaren Größen sind durch quantenmechanische Übergänge ($n_1 \neq n_2$) und Besetzungen ($n_1 = n_2$) charakterisiert.

gegeben durch Heisenberggleichungen: $(n_1 \equiv 1)$

$$i\hbar\,\partial_t \langle a_1^+ a_2 \rangle = \langle [a_1^+ a_2, H] \rangle$$

$$i\hbar\,\partial_t \langle b_{qj}^+ \rangle = \langle [b_{qj}^+, H] \rangle$$

für Elektron – Phonon Kopplung:

$$H = \underbrace{\sum_{k\lambda} \varepsilon_{\lambda k}\, a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k}}_{\substack{\text{elektronische Zustände} \\ \lambda\text{ - Band, } k\text{ - Wellenzahl}}} + \underbrace{\sum_{jq} \hbar\omega_{jq}\, b_{jq}^+ b_{jq}}_{\substack{\text{phononische Zustände} \\ j\text{ - Mode, } q\text{ - Wellenzahl}}}$$

(Bloch theorem

$$\varphi_n = \varphi_{\lambda k} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}\, u_{\lambda k}(\vec{r}),$$

$\varepsilon_{\lambda k}$: Bandstruktur)

$$+\underbrace{\sum_{jkq\lambda} D_{q\lambda j}\, a^{+}_{\lambda k+q}\, a_{\lambda k}\, \left(b_{jq} + b^{+}_{j-q}\right)}$$

Wechselwirkung zw. el. + ph. System
über <u>Absorption</u> + <u>Emission</u> v. Phononen

etwas abstrakter: (1 Phononmode)

$$\underline{H} = \sum_{1} \varepsilon_1\, a_1^{+} a_1 + \sum_{q} \hbar\omega_q\, b_q^{+} b_q$$

$$+ \sum_{1,2\,q} D_{12\,q}\, a_1^{+} a_2 \left(b_q + b^{+}_{-q}\right)$$

$$D_{12q} = D_{q\lambda}\, \delta_{k_1-k_2,\,q}\, \delta_{\lambda_1\lambda_2}$$

wenn konkret Experimente angesehen werden, so wird noch die WW mit externem Feld in $\underline{H}$ aufgenommen (später)

4. Die Elektron-Phonon Gleichungshierarchie

Phonon variable:

$$-i\hbar\,\partial_t b_q = [H, b_q] =$$

$$\Big[\sum_{q'} \hbar\omega_{q'} b^\dagger_{q'} b_{q'} + \sum_{q'k\lambda} D_{q'\lambda}\, a^\dagger_{k+q'\lambda}\, a_{k\lambda}\big(b_{q'} + b^\dagger_{-q'}\big), b_q\Big]$$

$$= \sum_{q} \hbar\omega_{q'}(-\delta_{qq'})\, b_{q'} + \sum_{q'k\lambda} D_{q'\lambda}\, a^\dagger_{k+q'\lambda}\, a_{k\lambda}\, \delta_{q,-q'}$$

$$\boxed{\partial_t b_q = -i\omega_q b_q - i\sum_{k\lambda} \tilde{D}_{q\lambda}\, a^\dagger_{k-q\lambda}\, a_{k\lambda}}$$

$$\left(\tilde{D} = \frac{D}{\hbar}\right)$$

analog: $b_q \xrightarrow{(+)} \dot{b}^\dagger_q = \ldots$

Jeder elektronisch Übergang $k \to k-q$ $(\forall k)$

ändert die Phonondynamik.

$\rightarrow$ Gitterverzerrung, Grundlage f. Supraleitung

um b zu berechnen muß man $a^{+}_{k-q\lambda} a_{k\lambda}$ kennen...

<u>Elektronenvariablen:</u>

$$-i\hbar\,\partial_t\, a_1^{+} a_2 = [\,\underline{H},\ \underline{\underline{a_1^{+} a_2}}\,]$$

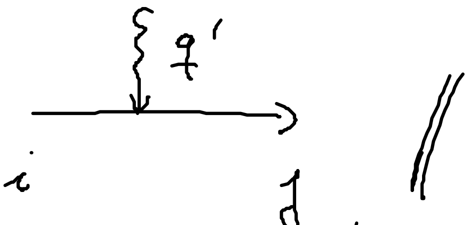
$$= (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\, a_1^{+} a_2 + \sum_{1'2'q'} D_{1'2'q'} \underline{[a^{+}_{1'} a_{2'},\ \underline{\underline{a_1^{+} a_2}}]}\, \underline{(b_{q'} + b^{+}_{-q'})}$$

$$= (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\, a_1^{+} a_2 \qquad \text{freie Bewegg. ohne El-Ph. WW}$$

$$+ \sum_{1'q'} D_{1'1q'} \left(\underline{\underline{a^{+}_{1'} a_2 b_{q'}}} + a^{+}_{1'} a_2 b^{+}_{-q'} \right)$$

$$\underbrace{- \sum_{2'q'} D_{22'q'} \left(a_1^{+} a_{2'} b_{q'} + a_1^{+} a_{2'} b^{+}_{-q'} \right)}$$

phonon assistierte Übergänge



z B $= 2$ $= 1'$

es gibt wieder ein Hierarchieproblem:

$$\rho(r,t) \sim a_1^+ a_2 \longrightarrow a_1^+ a_2 \, b^{(+)} \longrightarrow \dots$$

muß abgebrochen werden

5. Stoßgleichungen: Quantenkinetik u. Boltzmannkinetik

$\underbrace{\text{enthält noch volle } \Delta E \, \Delta t \text{ Unschärfe}}$

„mehr Quantenmechanik“

$\Delta E =$ fest f. El-Ph Stoß

Interferenz von Wellen ist während des Stoßprozesses aufgelöst oder nicht

Korrelationsentwicklung für $\langle a_1^+ a_2 b_q \rangle = \langle a_1^+ a_2 \rangle \langle b_q \rangle + \underline{\underline{\langle a_1^+ a_2 b_q \rangle^c}}$

Gleichung f. Korrelation?

$$-i\hbar \partial_t \langle a_1^+ a_2 b_q \rangle = \underbrace{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \hbar\omega_q) \langle a_1^+ a_2 b_q \rangle}_{\text{Freiteilchen!}}$$

mit H vertauschen

$$+ \sum_{1',2',q'} D_{1'2'q'} \Big(- \langle a_1^+ a_2 a_{1'}^+ a_{2'} \rangle \delta_{q,-q'}$$

$$+ \langle a_{1'}^+ a_2 b_{q'} b_q \rangle \delta_{2'1} + \langle a_{1'}^+ a_2 b_{-q'}^+ b_q \rangle \delta_{2'1}$$

$$- \langle a_1^+ a_{2'} b_{q'} b_q \rangle \delta_{1'2} - \langle a_1^+ a_{2'} b_{-q'}^+ b_q \rangle \delta_{1'2} \Big)$$

bedeutet, wenn jetzt faktorisiert wird, $\underline{\underline{2.}}$ Ordnung Störungstheorie in D_{12q}, weil

$$a_1^+ a_2 \sim D\, a_1^+ a_2\, b \sim \underline{\underline{D D}}\, \underbrace{\overbrace{a_1^+ a_2}^{A} \overbrace{b^+}^{B} \overbrace{b}^{C}}_{\text{wenn hier abgebrochen wird.}}$$

Faktorisieren von $\langle \underline{A}\,\underline{B}\,\underline{C} \rangle$:

$$\langle (\langle \underline{A} \rangle + \delta \underline{A})(\langle \underline{B} \rangle + \delta \underline{B})(\langle \underline{C} \rangle + \delta \underline{C}) \rangle$$

$$\delta \underline{A} = \underline{A} - \langle \underline{A} \rangle$$

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

$$+ \langle \underline{B} \rangle \langle \delta \underline{A} \delta \underline{C} \rangle + \langle \underline{C} \rangle \langle \delta \underline{A} \delta \underline{B} \rangle$$

$$+ \underbrace{\langle \delta \underline{A}\, \delta \underline{B}\, \delta \underline{C} \rangle}_{\text{weglassen ?!}}$$

$$\langle \delta \underline{B} \delta \underline{C} \rangle = \langle (\underline{B} - \langle \underline{B} \rangle)(\underline{C} - \langle \underline{C} \rangle) \rangle$$

$$= \underbrace{\langle \underline{B}\, \underline{C} \rangle - \langle \underline{B} \rangle \langle \underline{C} \rangle}$$

$$\equiv \langle \underline{B}\, \underline{C} \rangle^{c}$$

am Bsp:

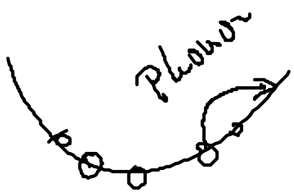
$$\langle a_1^+ a_2\, b^+ b \rangle = \langle a_1^+ a_2 \rangle \langle b^+ \rangle \langle b \rangle$$

$$+ \langle a_1^\dagger a_2 b^\dagger \rangle^c \langle b \rangle + \langle a_1^\dagger a_2 b \rangle^c \langle b^\dagger \rangle$$

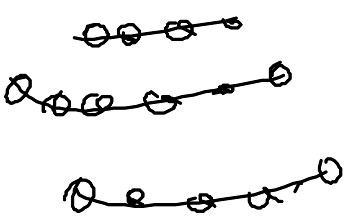
$$+ \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \langle b^\dagger b \rangle^c + \cancel{\langle a_1^\dagger a_2 b^\dagger b \rangle^c}$$

1. Anwendg. Spezialisierg. auf
   1Band-Modell: λ-Index verschwindet

5.2. Das Einbandmodell: Quantenkinetik



$\lambda = 1 \rightarrow$ brauchen wir nicht



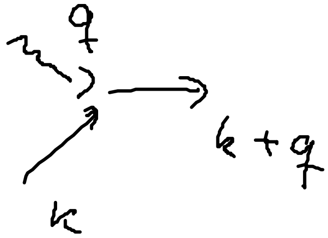
Dynamik von 2 Gleichungen: $\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \sigma_k \mathrel{\widehat{=}}$

Besetzungszahl der Elektronen im Zustand k

(wird zwischen 0 - 1 sein)

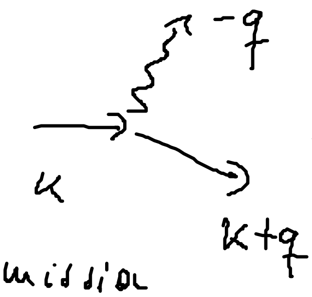
$$-i\hbar\partial_t\, \sigma_k(t) = \sum_q D_q\Big(\overset{(1)}{\langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b_q\rangle^c} + \overset{(2)}{\langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b^\dagger_{-q}\rangle^c}$$
$$- \overset{(3)}{\langle a^\dagger_k\, a_{k-q}\, b_q\rangle^c} - \overset{(4)}{\langle a^\dagger_k\, a_{k-q}\, b^\dagger_{-q}\rangle}\Big)$$

(1)



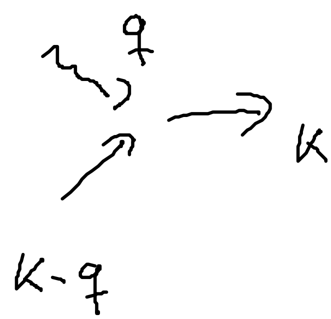
Absorption

(2)



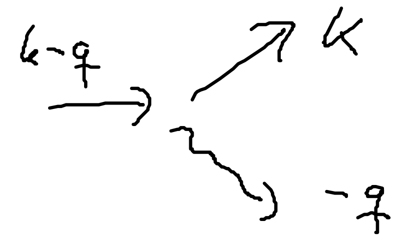
Emission

(3)



Absorption

(4)



Emission

nach Faktorisierung:

$$\partial_t \langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b_q\rangle^c = \tilde{D}_q\big(n_q[\sigma_k - \sigma_{k+q}] + (\sigma_k - 1)\sigma_{k+q}\big)$$
$$+ i(\nu_{k+q} - \nu_k - \omega_q)\langle a^\dagger_{k+q}\, a_k\, b_q\rangle^c$$

diese Gleichung gibt es für alle 4 der Korrelationen, Das System der Gleichungen σ_k, $\langle a^+ a\, b^{(+)} \rangle$

ist jetzt geschlossen

$$\nu_k = \frac{\varepsilon_k}{\hbar}, \quad n_q = n_q^B \;\hat{=}\; \text{Boseverteilg. der Phononen}$$

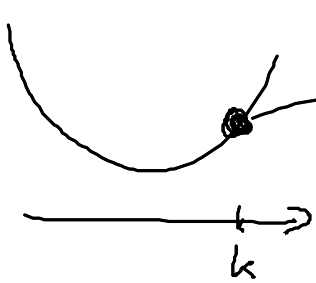
$g = \langle a^+ a\, b \rangle$ kann formal gelöst werden und

in $\dot{\sigma}_k$ eingesetzt werden

$$\dot{g} = i \Delta\varepsilon\, g + f(t)$$

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

Die Gleichung für $\sigma_k(t) = \langle a_k^+(t)\, a_k(t) \rangle$



Besetzungszahl des elektronischen Zustands k

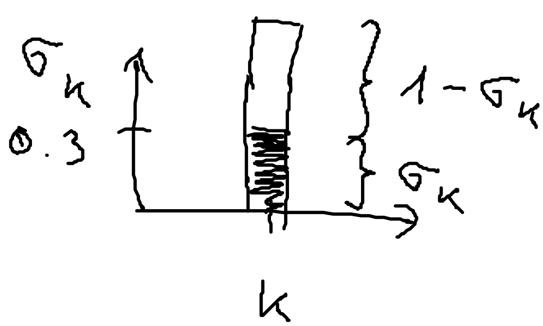
t $\qquad$ t

$$\dot{\sigma}_k = -\int_{-\infty} dt' \, f_{aus}(t,t')\, \sigma_k(t') + \int_{-\infty} dt' \, f_{ein}(t,t') \left(1-\sigma_k(t')\right)$$

Bemerkg:

a) σ_k wird durch $(-)$ abgebaut und durch $(+)$ aufgebaut, man spricht von Ein- und Ausstreuung

b) die Ausstreuung ist proportional zu σ_k, also zu Besetzung σ_k die Einstreuung ist proportional zur Nichtbesetzung $(1-\sigma_k)$



$\Rightarrow$ Folge des Paulprinzips, es wird sichergestellt, daß die Besetzung nicht über 1 geht,

z.B. $\sigma_k = 1 \rightarrow 1-\sigma_k = 0$

Einstreuung $\rightarrow 0$

c) die Gleichung beinhaltet eine Zeitretardierung

$$\sigma_k(t) \sim \int_{-\infty}^{t} dt' \; \sigma_k(\underline{\underline{t'}})$$

typischer Nichtmarkoff-Effekt

physikalisch hängt dieser memory-Effekt mit der Zeit-Energie-Unschärfe zusammen:

$$f_{aus} = 2 \sum_q |\tilde{D}_q|^2 \left(1 - \sigma_{k+q}(t')\right) \cdot$$

$$\Big\{ \cos\left(\nu_{k+q} - \nu_k - \omega_q\right)(t-t')\, n_q$$

$$+ \cos\left(\nu_{k+q} - \nu_k + \omega_q\right)(t-t')\, n_q + 1 \Big\}$$

Die Ausstreurate beschreibt Prozeße der Phononabsorption (n_q) und der

Phononemission ($n_q + 1$).

$|D_q|^2$ zeigt die 2. Ordnung Störungstheorie an, die Zeitretardierung ist in $\cos(t-t')$.