bisher: Phonon als Bad (n_q unveränderlich durch Bosefkt gekennzeichnet) betrachtet, für einige Probleme ist es notwendig, diese Annahme aufzugeben:

→ a) Elektron + Phonon bilden neue Quasiteilchen (starke Kopplung, starke El-Ph WW)

b) Badannahme nicht mehr gerechtfertigt, weil Phonon oder andere phonon. Größe sich stark verändern („heiße Phononen")

konzentrieren uns auf (a)

7. Phononendynamik u. Aspekt starker El-Ph-Kopplung

7.1 Phononendynamik

Einbandmodell:

$$\underline{H} = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \sum_q \hbar\omega_q b_q^+ b_q + \sum_{qk} D_q a_{k+q}^+ a_k (b_q + b_{-q}^+)$$

wenn Phonon jetzt <u>dynamische</u> Variablen sein (keine Badannahme)

→ Bewegungsgl. für b_q, b_q^+ aufstellen:

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

$$-\hbar\omega_q b_q + \sum_{q'k} D_{q'} a^+_{k+q'} a_k [b^+_{-q'}, b_q] =$$

$$-\hbar\omega_q b_q + \sum_{q'k} D_{q'} a^+_{k+q'} a_k \cdot (-\delta_{-q',q})$$

$$\boxed{-i\partial_t b_q = -\omega_q b_q - \sum_k \tilde{D}_{-q} a^+_{k-q} a_k} \quad (**)$$

Bewegungsgleichung f. Phononvernichter koppelt an elektronische Dichtegröße: $\sum_k \langle a^+_{k-q} a_k \rangle \cdot D_q$

(Interpretation als Dichtegröße wird gleich gemacht)

eine analoge Gl. gilt für Phononerzeuger:

$$-i\partial_t b^+_q = \omega_q b^+_q + \sum_k D^\times_{-q} a^+_k a_{k-q}$$

$$= \omega_q b^+_q + \sum_k D^\times_q a^+_{k+q} a_k$$

$$\boxed{-i\partial_t b^+_{-q} = \omega_q b^+_{-q} + \sum_k D_{-q} a^+_{k-q} a_k} \quad (**)$$

Beispiel: Phonondynamik

physikalisch beobachtbare Größe ist die Gitterauslenkung:

$$\langle u^{\alpha}_{sm} \rangle = \sum_q \frac{1}{(2M_s \omega_q)^{\frac{1}{2}}} \left(A^{\alpha}_s(q) \langle b^+_{qj}(t) \rangle e^{-i\vec{q}\cdot\vec{a}_m} + c.c \right)$$

$$= \sum_{q,k} C^{\alpha}_{qs} \int dt' \, e^{-i\omega_q t'} \underbrace{\sum_k \langle a^+_{k-q} a_k \rangle e^{i(\omega_q t - \vec{q}\cdot\vec{a}_m)}}_{\text{inhomogene El-Dichte als Quelle}} + c.c$$

↑ allen Konstanten

Bemerk

- beschreibt die Anregung von um als ein Wellenpaket $\left(e^{i(\omega_q t - q\cdot\vec{a}_m)}\right)$
- der Quellterm ist räumlich inhomogene Dichteverteilung

⇒ Ladungsdichte verzerrt das Gitter

zur Interpretation der dichteartigen Größe

- was bedeutet $\sigma_{k+q\,k} \neq 0$ f. $q \neq 0$

Elektronendichte: $\rho = \frac{q}{V} \sum_{k_1 k_2} \langle a^+_{k_1} a_{k_2} \rangle e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{r}}$

(ED-Mittelung gemacht)

Relativ- und Schwerpunktimpuls:

$$K = \frac{k_1 + k_2}{2}, \quad Q = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$$

$$\rho = \frac{q}{V} \sum_Q e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \underbrace{\sum_k \langle a^+_{k+\frac{Q}{2}} a_{k-\frac{Q}{2}} \rangle}_{} \sim a^+_{k-Q} a_k$$

wenn $Q \to -Q$ und $k \to k - \frac{Q}{2}$

für $\vec{Q} = 0 \to$ homogene Elektronenverteilung

für $\vec{Q} \neq 0 \to$ inhomogene Elektronenverteilung

$\Rightarrow$ Eine räumlich inhomogene Elektronenverteilung bewirkt eine Deformation des Gitters und damit eine Anregung ~~von~~ von kohärenten Phononen-Oszillation also optisch u. akust. Wellen (exp. beobachtet in HL, z.B an Oberflächen nach Einstrahlen mit Laserpuls, Oberfläche ist nötig, um eine inhomogene Elektronenverteilung zu erzeugen.)

7.2 Polaronen und effektiven Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Idee: Phononoperator aus der Theorie isolieren, d.h.: formale Integration der $b_q^{(t)}$ Bewegungsgleichungen:

$$b_q = -i \int_{-\infty}^{t} e^{-i\omega_q (t-t')} \tilde{D}_{-q} \sum_k a^+_{k-q}(t') a_k(t')$$

$$b^+_{-q} = i \int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_q (t-t')} \tilde{D}_{-q} \sum_k a^+_{k-q}(t') a_k(t')$$

könnte so in H-Operatoren eingesetzt werden wird aber nicht lokal ~~Zeit~~ in der Zeit $(t') \to$ problematisch daher vorher Markovnäherung um die Zeitretardierung los zu werden:

($s = t - t'$ Transformation)

$$b_q(t) = -i \int_0^\infty ds\, e^{-i\omega_q s}\, \tilde{D}^+_{-q} \sum_k a^+_{k-q}(t-s)\, a_k(t-s)$$

Ansatz lgs. Veränderlicher: $\tilde{a}^+_{k-q}(t-s)\, e^{i\nu_{k-q}(t-s)}\, \tilde{a}_k(t-s)\, e^{-i\nu_k(t-s)}$

Ansatz sinnvoll, wenn die Zeitabhängigkeit der Elektronoperatoren im wesentlichen durch die ~~frei~~ freie „$e^{i\nu_k(t-s)}$" gegeben ist.

Für ~~gro~~ große Zeiten $t > s$ ist dann

$$\tilde{a}^+_{k-q}(t-s) \approx \tilde{a}^+_{k-q}(t)$$

$$b_q(t) = -i\, \tilde{D}_{-q} \sum_k \underbrace{a^+_{k-q}(t)\, a_k(t)}_{\text{lokal in Zeit, Eigenschaft der Markovnäherung}} \underbrace{\int_0^\infty ds\, e^{-i(\omega_q+\nu_{k-q}-\nu_k)s-\gamma s}}_{\frac{-1}{-i(\omega_q+\nu_{k-q}-\nu_k)-\gamma}} \quad (\gamma \to 0)$$

$$b^+_{-q}(t) = i\, \tilde{D}^\times_{-q} \sum_k a^+_k(t)\, a_{k+q}(t)\, \frac{-1}{i(\omega_q+\nu_{k+q}-\nu_k)-\gamma}$$

$k \to k-q$

$$= i\, \tilde{D}^\times_{-q} \sum_k a^+_{k-q}(t)\, a_k(t)\, \frac{-1}{i(\omega_q+\nu_k-\nu_{k-q}-\gamma)}$$

einsetzen der Operatorgleichung in den Hamiltonoperator:

H

$$H_{el-ph} = \sum_{kq} D_q \, a^+_{k+q} a_k \left(b_q + b^+_{-q}\right)$$

$$= -i \sum_{qlk} |D_q|^2 a^+_{k+q} a_k \, a^+_{l-q} a_l$$

$$\underbrace{\left(\frac{-1}{-i(\hbar\omega_q - (\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q})) - \eta} + \frac{-1}{-i(\hbar\omega_q + (\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q})) + \eta} \right)}$$

$$= \frac{1}{-i} \left(\frac{-(\omega_q + [\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q}] + i\eta) - (\omega_q - [\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q}] - i\eta)}{\omega_q^2 - (\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q})^2 + \text{Terme proportional } \eta} \right)$$

$$H_{el-ph} = \sum_{kql} \frac{2\omega_q \hbar |D_q|^2}{[\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q}]^2 - \hbar^2\omega_q^2} \underbrace{a^+_{k+q} a_k a^+_{l-q} a_l}_{a^+_{k+q}(\delta_{k,l-q} - a^+_{l-q} a_k) a_l}$$

Normal ord. der Operatoren um mit Standard in 2. Quantisierung

$\delta_{k,l-q}$: (1), $a^+_{l-q} a_k$: (2)

$$= \sum_l \left(\sum_q \frac{|D_q|^2 \, 2\hbar\omega_q}{[\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q}]^2 - \hbar^2\omega_q^2} \right) a^+_l a_l \qquad (1)$$

$$+ \sum_{lkq} \frac{|D_q|^2 \, 2\hbar\omega_q}{(\varepsilon_l - \varepsilon_{l-q})^2 - (\hbar\omega_q)^2} a^+_{k+q} a^+_{l-q} a_l a_k \qquad (2)$$

Bemerkung:

a) H_{el-ph} enthält durch die adiabatische Eliminierung der Phononoperatoren nur noch Elektron-Operatoren ("Problem vereinfacht", keine assistierten Dichtematrizen, sondern Elektron-Vielteilchenproblem)

b) ① Term: Energierenormierung $\sum_k \delta\varepsilon_k a_k^+ a_k$ ($l \leftrightarrow k$ in 1) für Einteilchenenergie $\sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k \rightarrow$ "renomierte" Elektronen.

Durch die Elektronen-Phononenkopplung erhält man neue Quasiteilchen: "Polaronen" (Gebilde aus El. und Ph.)

$$\delta\varepsilon_k = \sum_q \frac{2|D_q|^2 \omega_q \hbar}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q)(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} + \hbar\omega_q)} \quad (*)$$

$$= -\sum_q \frac{2|D_q|^2 \omega_q \hbar}{(\hbar\omega_q - \varepsilon_k + \varepsilon_{k-q})(\hbar\omega_q + \varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})}, \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

(m – effektive Masse)

am Γ Punkt sind $\varepsilon_k\ \varepsilon_{k-q} < \omega_q$

daher gilt typischerweise $\delta\varepsilon_k < 0$, also eine Energieabsenkung:

— Durch die WW der El mit Ph. entsteht ein energetisch günstiger Zustand (Energieabsenkung).

Polaron ist stabil.

– $\delta\varepsilon_k$ wird durch alle ($\sum_q$) Prozesse bestimmt bei dem ein Elektron ein Phonon absorbiert wird oder emittiert wird [Nenner in *] und danach wieder in den Zustand k übergeht. (Interpretation der Summe und der Nenner).

⟶ Das Elektron wird von einer Wolke von Phonen begleitet die ständig absorbiert u. reemitiert werden (u. umgekehrt)

– anschaulich

– El. bewegt sich durch Ionengitter
– Ionen werden ausgelenkt ⟶ Gitterpotential ändert sich
– dadurch verändert das El. das Potentialfeld in dem es sich bewegt und senkt seine Energie ab.

Das von seiner selbstinduzierten Gitterdeformation begleitetes Elektron heißt Polaron

<u>lgs. El</u>

$k \to 0$

(Impuls der El ⟶ 0)

$$\delta\varepsilon_0 = -\sum_q \frac{|D_q|^2/2\omega_q}{\omega_q^2 - \varepsilon_q^2}$$

man die „Selbstenergie" der Elektronen im Gitter

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{Selbstenergie:}}$ welche Energie verbleibt, wenn die eigene kinetische Energie 0 wird.

<u>schn. El</u>

$k \to \infty$

$\to \delta\varepsilon_k \to 0$

das Elektron bewegt sich so schnell, daß das Ionengitter nicht folgen kann, das Gitter hat daher einen verschwindenen Einfluß.

— wenn man die Selbstenergie $\delta\Sigma_k$ bis k^2 entwickelt so erhält man eine Korrektur zur effektiven Masse m^*

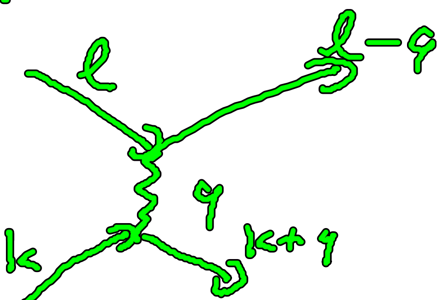
Das Elektron wird also zum Polaron Quasiteilchen und erhält eine ~~kurze~~ neue Masse.

② Term

$$\underline{H} \sim \sum_{klq} V_{lq}\, a^+_{k+q}\, a^+_{l-q}\, a_l\, a_k ,$$

Matrixelement effektiven El-Ph-Kopplung, beinhaltet Abs. Emiss. Proz.

Durch Vgl. mit der ~~Coul~~ Coulomb-WW in 2. Quantisierung sieht man, dass dieser Term eine effektive El-El WW darstellt!



2 El werden durch WW vernichtet

2 El in neuen Impulszuständen werden durch Übertragung eines Phonons erzeugt.

WW-Potential V_{lq} (bereits berechnet)

$$V_{lq} = -\frac{2|D_q|^2\omega_q}{\omega_q^2-(\varepsilon_l-\varepsilon_{l-q})^2}$$

ist offensichtlich das Matrixelement einer eff. El-El-WW

d) interessanter Fall: $(\varepsilon_l-\varepsilon_{l-q})^2<\omega_q^2$, so ist $V_{lq}<0$

→ effektive El-El-Anziehung (Coulomb WW $V_q>0$)

Interpretation: ein El deformiert das Ionenpotential, ein 2. El wird dann durch diese Deformation angezogen (Isotopeneffekt)

→ Elektronenpaarbildg. mgl., das sind „Cooperpaare" der Supraleitung.
Beschreibung des Supraleitenden Zustandes
beginnt mit dem abgeleiteten eff. El-El-WW