

weiter zu VI Elektron-Phonon-Wechselwirkung

## 2. Quantisierung der Elektron-Phonon-ww

$$H_{e-r} = \sum_{j,q} \sum_{k,\lambda} D_{qj} (b_{-qj}^{\dagger} + b_{qj}) a_{\lambda k+q}^{\dagger} a_{\lambda k}$$

mit dem Elektron-Phonon-Matrix-Element

$$D_{qj} = - \frac{i \sqrt{\hbar}}{\sqrt{2m\omega_j(q)}} V_q \vec{A}(j,q) \cdot \vec{q}$$

Maß für die Kopplungsstärke

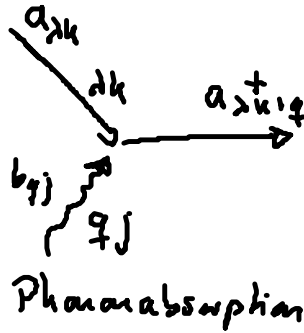
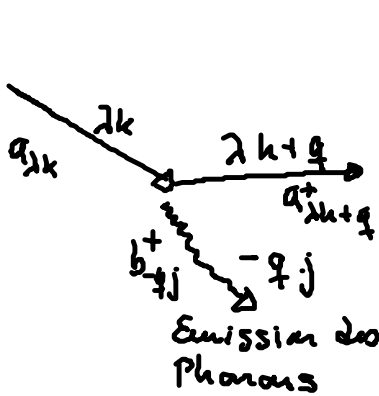
Ionenschwingungen, die an Elektronen an koppeln, müssen eine Komponente in Ausbreitungsrichtung haben, d.h. rein transversale Phononen koppeln nicht (TA, TO Moden  $\rightarrow$  Effekte höherer Ordnung)

Interpretation des Elektron-Phonon-Hamiltonians:

$$(b_{-qj}^{\dagger} + b_{qj}) a_{\lambda k}^{\dagger} + a_{\lambda k}$$

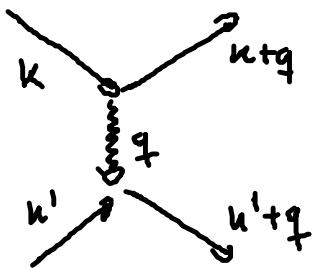
Phonon-Emission

Phonon-Absorption



Auslenkung der Ionen  $\rightarrow$  Übergänge von Elektronen mit Wellenvektor  $k$  zu  $k+q$  bei Absorption eines Phonons mit Wellenvektor  $q$  oder Emission eines Phonons mit  $-q$

$\Rightarrow$  Elektronen haben eine endliche Lebensdauer im Blochzustand  $k$ , d.h. Elektron-Phonon-WW wird einen Beitrag zum elektrischen Widerstand leisten ( $\Rightarrow$  Kapitel VIII)



Das von einem Elektron emittierte Phonon kann von einem anderen Elektron absorbiert werden, so dass dieses Phonon eine effektive Elektron-Elektron-WW verursacht

Diese WW kann auch attraktiv sein  $\Rightarrow$  Supraleitung [ Kapitel IX ]

$\Rightarrow$  Elektronische Eigenzustände und Energien werden modifiziert  
(Gitterpolarisation)  $\Rightarrow$  neues Quasiteilchen Polaron

$\Rightarrow$  Elektron +  
umgebende

- Unterschiedliche Arten der Elektron-Phonon-WW: Polarisationswolke

i) Deformationspotential-Kopplung an akustische und optische  
Phononen

ii) piezoelektrische Kopplung an akustische Phononen

iii) polare Kopplung an optische Phononen (Fröhlich Kopplung)

zu i) Deformationspotential

$$D_{qj} = - \frac{i\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2m\omega_j(q)}} D |q| \quad \text{mit} \quad V_q \rightarrow D \quad \text{für} \quad q \rightarrow 0$$

nur longitudinale Phononen tragen  
bei

Fourier-Transform des Elektro-Ion-  
Potentials als konstant angenommen  
für lange Wellenlänge

$$A(j, q) \rightarrow \vec{e}_q \quad \text{für} \quad q \rightarrow 0$$

$D \hat{=}$  Deformationskonstante  
(erhält man aus dem Experiment)

zu ii) Piezoelektrische Kopplung

$$D_{qj}^{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_j(q)}} M_{\alpha}(\vec{e}_q)$$

$M$  hängt von der Richtung von Wellenvektor ab

$M$  ist eine Konstante, die ein  
Maß für den Druck auf den Kristall darstellt.

Bei Verschiebung des Gitters wird ein elektrisches Feld generiert

(oder umgekehrt)

Periodische Dichteschwankungen (akustische Phonone) erzeugen elektrische Felder, falls der Kristall kein Invarianterstrum hat.

IV-Halbleiter (Ge, Si) sind nicht piezoelektrisch.

III-V-Halbleiter (GaAs) sind leicht piezoelektrisch.

II-VI-Halbleiter (CdS) sind stark — " —

Ein akustisches Phonon kann mit einem Elektron gleichzeitig über Deformationspotential und piezoelektrische Kopplung wechselwirken

$$D_{qj} = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_j(q)}} \left[ D |q| + i M_{\alpha} (\vec{e}_q) \right] \quad \alpha \equiv \text{Polarisation von den akustischen Phononen (LA, TA)}$$

zu III) Polare Kopplung (Fröhlich)

Polare Kopplung zwischen Elektronen und optischen Phononen kann in ionischen Kristallen groß sein

Falls positive und negative Ionen in gegensätzliche Richtung oszillieren, wird eine Polarisation aufgebaut  $\rightarrow$  langreichweitiges elektrisches Feld, an dem die Elektronen streuen

$$D_{qj} = i \frac{1}{q} \epsilon_0 \sqrt{\frac{\hbar\omega_j(q)}{2\epsilon_0}} \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

$\epsilon_0 \hat{=}$  statische Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon_{\infty} = \sqrt{n^2}$$

$\uparrow$   
Brechungsindex

Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante

### 3. Dynamische Observablen des gekoppelten Elektron-Phonon-Systems

Für Elektronen

• Ladungsdichte  $\rho(r,t) = q |\psi(r,t)|^2$   
 $\rightarrow q \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1}^*(r) \psi_{n_2}(r) a_{n_1}^\dagger a_{n_2}(t)$   
 2. Quantisierung  $\uparrow$

Bloch-Funktionen, nach denen die Feldoperatoren entwickelt werden

$$\psi(r,t) = \sum_{n_1} \psi_{n_1}(r) a_{n_1}(t)$$

Dynamik der Gesamt-Elektronenzahl

$$\int d^3r \langle \rho(r,t) \rangle = q \sum_{n_1, n_2} \int_{n_1, n_2} \langle a_{n_1}^\dagger a_{n_2} \rangle(t)$$

$$= q \sum_{n_1} \underbrace{\langle a_{n_1}^\dagger a_{n_1} \rangle}_{\rho_k^{\lambda\lambda}} = n$$

$$n_1 = \{ \lambda, k \}$$

mikroskop. Besetzungswahrscheinlichkeit im Zustand  $|k, \lambda\rangle$

$$0 \leq \rho_k^{\lambda\lambda} \leq 1$$

Fragestellung: Wie ändert sich die Besetzungswahrscheinlichkeit, wenn Elektron-Phonon-WW vorliegt?

• Stromdichte  $\vec{j}(r,t) = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \psi^\dagger(r,t) [\vec{p} - q\vec{A}] \psi(r,t) + h.a.$

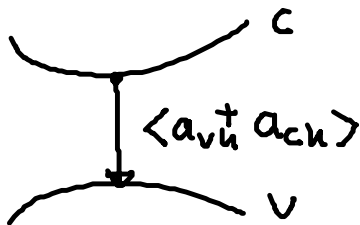
wichtige Driftgeschwindigkeit  
 $\vec{j} = nq\vec{v}$   
 $= n \frac{q}{m} \vec{p}$

$$= \frac{1}{2} \frac{q}{m} \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1}^*(r) [\vec{p} - q\vec{A}] \psi_{n_2}(r) \underbrace{a_{n_1}^\dagger a_{n_2}(t)}_{+ h.a.}$$

zu berechnende mikroskopische Größe

$$\rho_{\kappa}^{vc} \equiv p_{\kappa} = \langle a_{v\kappa}^\dagger a_{c\kappa} \rangle$$

Übergangsamplitude (mikroskopische Polarisation) taucht in  $\vec{j}(r,t)$  auf



Zweiband-System

Dynamik von  $p_{\kappa}$  wird durch Elektron-Phonon-WW verändert

## Für Ionen

• Auslenkung der Ionen  $\vec{u}_{qj} \sim (b_{-qj}^+ + b_{qj})$

zu bestimmender mikroskop. Größe  $n_{qj} = \langle b_{qj}^+ b_{qj} \rangle$

Phonon-Besetzungszahl

Die beobachtbaren Größen werden durch quantenmechanische Übergänge ( $\lambda \neq \lambda'$ ) und Besetzungswahrscheinlichkeiten ( $\lambda = \lambda'$ ) charakterisiert.

$$p_k = \langle a_{k\lambda}^+ a_{k\lambda'} \rangle \quad \text{mit } \lambda \neq \lambda'$$

$$p_k^\lambda = \langle a_{k\lambda}^+ a_{k\lambda} \rangle$$

$$n_{qj} = \langle b_{qj}^+ b_{qj} \rangle$$

Zeitliche Dynamik unter  
Einfluss der Elektron-Phonon-WW

Dynamik wird bestimmt durch die Heisenberg-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O} = [\hat{O}, H] + \underbrace{\frac{\partial \hat{O}}{\partial t}}_{\text{explizite Zeitabhängigkeit}}$$

Hamilton-Operator:

$$H = \underbrace{\sum_{k\lambda} \epsilon_{\lambda k} a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k}}_{H_e} + \underbrace{\sum_{jq} \hbar \omega_{jq} (b_{jq}^+ b_{jq} + \frac{1}{2})}_{H_{ph}}$$

$H_e$ : elektronische Zustände  
 $\lambda \ni$  Band  
 $k \ni$  Wellenvektor  
 $\epsilon_{\lambda k} \ni$  Bandstruktur

$H_{ph}$ : phononische Zustände  
 $j \ni$  Phonon-Mode  
 $q \ni$  Wellenvektor  
 $\hbar \omega_j(q) \ni$  phononische Bandstruktur

$$+ \underbrace{\sum_{jq} \sum_{\lambda k} D_{qj} (b_{-q}^+ + b_{qj}) a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k}}_{H_{e-ph}}$$

$H_{e-ph}$ : WW zwischen Elektronen und Phononen

Hinzu kommt noch Elektron-Elektron-WW (Kapitel VII) und Elektron-Licht-Kopplung (Kapitel X)

4. Bloch-Gleichungen

Gekoppeltes System von DGLs

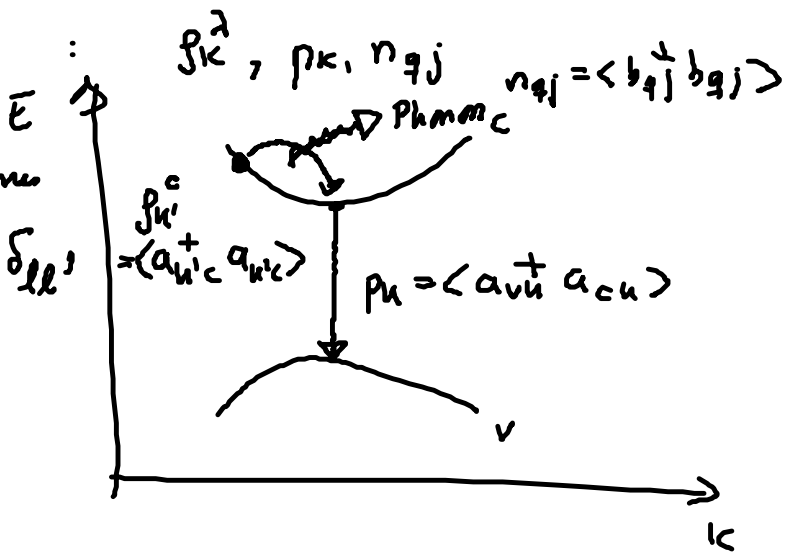
Fundamentale Vertauschungsrelationen

$$[a_{\lambda}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{\mp} = a_{\lambda} a_{\lambda'}^{\dagger} \mp a_{\lambda'}^{\dagger} a_{\lambda} = \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$[a_{\lambda}, a_{\lambda'}]_{\mp} = [a_{\lambda}^{\dagger}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{\mp} = 0$$

für Bosonen  $[\cdot, \cdot]_{-}$

für Fermionen  $[\cdot, \cdot]_{+}$



$$i\hbar \frac{d}{dt} \underbrace{a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu}}_{\rho_{\mu}} \Big|_{He} = [a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu}, He]_{-}$$

$$= a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu} \sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{\lambda'k'}$$

$$- \sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{\lambda'k'} a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu}$$

$$\underbrace{\epsilon_{\nu k} a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu}}_{\text{Elektronen sind Fermionen, d.h. } [a_{\lambda}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{+} = \delta_{\lambda\lambda'}} - \sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{\lambda'k'} a_{c\mu}$$

$$- \sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{c\mu} a_{\lambda'k'}$$

$$\underbrace{- \epsilon_{c\mu} a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu}}_{\text{Elektronen sind Fermionen, d.h. } [a_{\lambda}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{+} = \delta_{\lambda\lambda'}} + \sum_{k'\lambda'} \epsilon_{\lambda'k'} a_{\nu\mu}^{\dagger} a_{c\mu} a_{\lambda'k'}^{\dagger} a_{\lambda'k'}$$

Mit Erwartungswerten:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \underbrace{\langle a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu} \rangle}_{\rho_{\mu}} \Big|_{H_e} = (\epsilon_{c\mu} - \epsilon_{v\mu}) \underbrace{\langle a_{v\mu}^\dagger a_{c\mu} \rangle}_{\rho_{\mu}}$$

$$\text{d.h. } i\hbar \dot{\rho}_{\mu} \Big|_{H_e} = \Delta \epsilon_{\mu} \rho_{\mu}$$

$$\text{zu tun } i\hbar \rho_{\mu} \Big|_{H_{ph}} = 0$$

$$i\hbar \dot{\rho}_{\mu} \Big|_{H_e - p_h} = \sum_{j\neq\mu} D_{\mu j} \left[ T_{j-\mu}^{v\mu c\mu} - T_{j-\mu}^{v\mu+q\ c\mu} + S_{j\mu}^{v\mu c\mu-q} - S_{j\mu}^{v\mu+q\ c\mu} \right]$$

mit phonen-assoziierten Größen  $S, T$

$$S_{j\mu}^{\lambda\mu\ \lambda'\mu'} = \langle b_{j\mu} a_{\lambda\mu}^\dagger a_{\lambda'\mu'} \rangle \text{ und } T_{j-\mu}^{\lambda\mu\ \lambda'\mu'} = \langle b_{j-\mu}^\dagger a_{\lambda\mu}^\dagger a_{\lambda'\mu'} \rangle$$

ausführlich in der nächsten VL bzw. im Übungsblatt.