

VI. Elektron-Phonon Wechselwirkung

Bis hierhin haben wir zwei System getrennt behandelt:

Elektronische System

$$\sum_n V_{e-i} (\epsilon_i - E_n^0) \leftarrow$$



Quasielektron

→
Bewegung der Elektronen in
dynamischen Gitter

Gitterschwingungen

Ionenposition

$$\underline{R}_n = \underline{R}_n^0 + \underline{u}_n$$



Phonon

Zwei Herangehensweisen:

1) Formale Herleitung aus der Elektron-Ion Kopplung

2) Ansätze die Kopplung zur Parametrisierung
(aus Materialparametern)

Statt dessen ab initio berechnen

Beispiel: a) Deformationssphärikopplung (akustische Phonon)

b) Piezoelektrische Kopplung (akustische Phonon)

c) Polar optische Kopplung (optische Phonon)

Daneben betrachten wir erste Anwendungen der Elektron-Phonon

TO DO: Formulierung der beiden Teilsysteme in 2. Quantenform
 $\sum_i \nabla V_{el-i}(x_i - R_j^{(0)}) = i \frac{1}{\hbar} \sum_q \neq V_{el}(q) e^{i q \cdot (x_i - R_j^{(0)})}$

Darstellung
 Formale

$$\nabla V_{el-i}(x) = \frac{1}{\hbar} \sum_q V_{el-i}(q) e^{i q \cdot x}$$

$$\nabla V_{el-i}(x) = i \frac{1}{\hbar} \sum_q \neq V_{el-i}(q) e^{i q \cdot x}$$

Damit sieht, dass Potential das durch die Ionen erzeugt wird als wie:

$$\tilde{V}(x) = - \sum_j u_j \cdot \nabla V_{el-i}(x - R_j^{(0)})$$

Ergebnis wie:

$$\tilde{V}(x) = - \frac{i}{\hbar} \sum_q \left(\sum_j u_j e^{-i q \cdot R_j^{(0)}} \right) e^{i q \cdot x} V_{el}(q)$$

Definition von u_j :

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{M_j} \hbar} \sum_q A_{j,q}(q) e^{i q \cdot R_j^{(0)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2 M_j}} (b_{q,j}^\dagger + b_{-q,j})$$

$$\rightarrow \frac{i}{\hbar} \sum_j u_j e^{-i q \cdot R_j^{(0)}} = \frac{-i}{\hbar} \sum_j \frac{1}{\sqrt{M_j} \hbar} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2 M_j}} A_{j,q}(q) e^{i q \cdot R_j^{(0)} - i q \cdot R_j^{(0)}} (b_{q,j}^\dagger + b_{-q,j})$$

$$\sum_j e^{i(q-s) \cdot R_j^{(0)}} = \hbar \sum_s \delta_{q-s,0}$$

$$= \sqrt{\mu} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{2\mu_{\mathbf{q}+\mathbf{g}}}} A_2(\mathbf{q}+\mathbf{g}) (b_{\mathbf{q}+\mathbf{g}}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}+\mathbf{g}})$$

Jetzt in $\tilde{V}(\mathbf{k})$ einsetzen und \mathbf{q} auf die Brillouin Zone einschränken (kann hierauf über alle Bereich im Summe liegt)

$$\tilde{V}(\mathbf{r}_i) = i \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} e^{i(\mathbf{r}+\mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}_i} v_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}+\mathbf{g}) (\mathbf{q}+\mathbf{g}) \cdot A_2(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{2\mu_{\mathbf{q}+\mathbf{g}}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{q}+\mathbf{g}}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}+\mathbf{g}})$$

Das kann wir auch in die weitere Quantisierung überführen

Bemerkung:

$$\rho(\mathbf{k}) = \sum_i \delta(\mathbf{k} - \mathbf{r}_i) \quad (\text{Erste Quantisierung})$$

hat die Form

$$\rho(\mathbf{k}) = \psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda, \mu} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu} \phi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) \phi_{\mu}(\mathbf{k})$$

Die Form Transfer der Elektronendichte (klassisch)

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$$

2. Quantisierung

$$\rho(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda, \mu} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \phi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) \phi_{\mu}(\mathbf{k})$$

$$\text{Für Blochwellen } \phi_{\lambda\mu}(\mathbf{k}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} u_{\lambda\mu}(\mathbf{r})$$

ergibt sich dann in erster Näherung für $\rho(\mathbf{q})$ in ein Band

$$\rho_1(\mathbf{q}) \approx \sum_{\lambda} c_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}+\mathbf{q}) a_{\lambda\mathbf{k}}$$

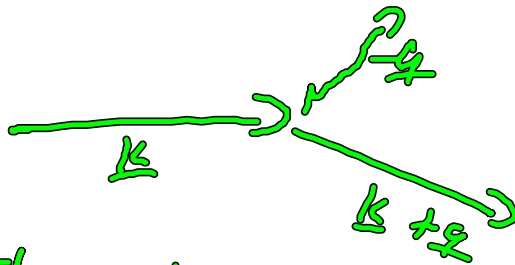
Wir können die Elektron-Phonon Wechselwirkung verstehen in 2. Quantisierung:

$$H_{e-p} = \int d^3v \rho(\mathbf{k}) \tilde{V}(\mathbf{k})$$

$$= \sum_{\substack{q, k \\ 1, k}} i V_{e-i}(\mathbf{q} + \mathbf{g}) (\mathbf{q} + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{q}) \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{k}} \\ \uparrow \\ \text{Bandindex} \quad \quad \quad (b_{\mathbf{q}, \sigma} + b_{-\mathbf{q}, \sigma})$$

Benachr.

- (1) Der Ham. Op hängt von $\frac{1}{\sqrt{M}}$, wobei M die Masse der Ionen ist. Dies wird ein wichtiger Punkt bei der Supraleitung sein.
- (2) Im Moment ist V_{e-i} noch ein ungeschaltetes Coulombpotential. Wir werden sehen, dass die Elektron-Elektron Wechselwirkung Abstoßungseffekte erzeugt, die dieses Potential signifikant reduziert.
- (3) Das Potential V_{e-i} wird teilweise aus ab-initio Techniken wie DFT, aber auch durch Pseudopotentialmethode berechnet.
- (4) Dieser Hamiltonian beschreibt den Prozess, dass ein Elektron in die Emittion oder Absorption eines Phonons am Gitter steht.



- (5) Häufig ist V_{e-i} in seiner vollen Form schwer zu ermitteln, daher parametrisierte Züge

Für langwellige Phänomene wie die Halbleiter durch folgende Kopplung charakterisiert.

Defektopolarkörper, piezoelektrischer Körper und Fröhlich Körper. Akustisch Optisch

Defektkörper für optisch Phän ist möglich, aber unüblich und kein Bestandteil!

Wichtig: Diese Kopplungen sind nur gültig für langwellige Phänomene. Nicht für kurzwellige Phänomene! Bei kurzwelligen Phänomenen steht auch der Unterschied zw. transversal und longitudinalen Zuständen. Idee für Defektopolarkörper

1) langwellige Grenzwellen $\xi = 0$

(für $\xi \neq 0$ wäre es kurzwellige Phänomene)

$V_{e-r,1}(q) \rightarrow D_1$ für die Defektopolarkörper

(Elektronenabschnitt) $H_{e-r,1} = \sum_{\lambda_1} D_1 q \cdot A_2(q) \left(\frac{h}{2m\omega_{\lambda_1}} \right)^{\frac{1}{2}} a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2} (b_{\lambda_1}^\dagger + b_{\lambda_2})$

\Rightarrow Elektron-Phonon Körper für die Defektopolarkörper wird durch Parameter D_1 bestimmt.

Wie D_1 messen?

Im Exp. wird die Veränderung der Energie bei einem Veränd. des Drucks gemessen. (D ist dann die Rate mit der sich die Bandenlage bei Druck ändert)

VI.3 Piezoelektronische Kopplung

Viele Halbleiter zeigen die Piezoelektronische Effekte

makroskopisch sieht es aus als elektrisches Feld falls der Kristall gestaucht wird.

Ü basiert über Vakuum von Piezoelektrizität

Gruppe	Beispiel	Piezoeffekt
IV	Ge, Si	nach!
III-V	GaAs	schwach
II-VI	CdS, ZnO	es extrem

Kurze Skizze der Herleitung:

$$(1) \quad E_k = \sum_{ij} A_{ij} \underbrace{S_{ij}}_{\text{Druck oder Verspannung}}$$

(2) Definition von S_{ij}

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_r}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} \sum_{q \neq k} \frac{\sqrt{E}}{2q \mu_A} (A_q^i q_j + A_q^j q_i) (b_q^+ + b_q^-)$$

Es kann gezeigt werden, dass nur der longitudinal Anteil des E-Felds beiträgt.

$$(3) \quad E_k = -\frac{\partial}{\partial x_k} \phi(x) = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_q i q_k \phi_q e^{iq \cdot x}$$

Sowohl E_k wie auch S_{ij} sind linear in den Komponenten
 von φ , durch Vergleich sieht man (1)-(3)
 dass $\phi(x) \propto u(x)$

$$\psi_{H_{2,1}} = \epsilon \sum_j \phi(x_j)$$

$$\Rightarrow \phi(x) = - \sum_j \left(\frac{k}{2\epsilon_0 N A} \right)^{\frac{1}{2}} M_j(\varphi) e^{i\varphi \cdot x} (b_{2j}^+ + b_{1j})$$

Das ergibt die Elektro-Potential $\psi_{H_{2,1}}$ ^{Normiert! Beschreibt Ritzschellengebot}
 Koppel:

$$H_{\text{elph}} = - \epsilon \sum_j \left(\frac{k}{2\epsilon_0 N A} \right)^{\frac{1}{2}} M_j(\varphi) a_{1k}^+ a_{1k} (b_{2j}^+ + b_{1j})$$