

Interpretation des Elektron-Phonon WW-Hamiltonians

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

a) gesamter $H \rightarrow H = H_{el} + H_{ion} + H_{e-ion}$
 $\rightarrow H_{el} + H_{ph} + H_{e-ph} \equiv H_0 + H_{e-ph}$

entspricht WW zwischen freien Phononen (H_{ph}) und Bloch-Elektronen (H_{el})

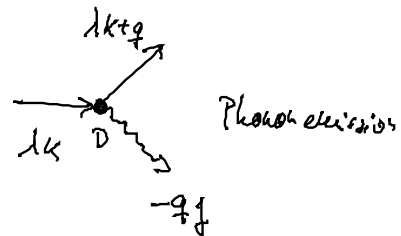
b) $D_{q \lambda j}$ ist das WW-Matrixelement der El-Ph-Kopplung
 bestimmt Stärke des Impulsübertrags q zwischen Elektron und Phonon,
 kann berechnet werden ($V_q, U_{1q}, A_s^{\kappa}$), aber wird oft
 phänomenologisch bestimmt

c) $D_{q \lambda q} \sim \vec{q} \cdot \vec{A}_s^{\kappa}$: Kopplung an longitudinale Phononen ist
 in der gewählten Näherung dominant ($\vec{q} \parallel \vec{A} \hat{=} \text{longit. Wellen}$)

d) Prozesse im H_{e-ph} :

(i) $D_{q \lambda j} b_{-qj}^{\dagger} a_{j^{\kappa+q}}^{\dagger} a_{j^{\kappa}} \hat{=} \dots$

Impulsabhaltung: $k = k+q-q \quad \checkmark$



(ii) $D_{\lambda q j} b_{q j} a_{\lambda q+k} a_{+k} \hat{=} \begin{array}{c} \lambda k \\ \swarrow \rightarrow \\ \text{---} \rightarrow \\ \nearrow \\ q j \end{array} \text{ Phononabsorption}$

Impulsstaltz $k+q = k+q \checkmark$

10.3 Dynamische Variable und beobachtbare Größe

a) Elektronenstrom / dichte (z.B. optische / Transportexperimente)

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \frac{q_d}{m} \sum_{u_1, u_2} \varphi_{u_1}^*(\vec{r}) (\vec{p} - q_d \vec{A}) \varphi_{u_2}(\vec{r}) \langle a_{u_1}^\dagger(t) a_{u_2}(t) \rangle_{th}$$

$$\rho(\vec{r}, t) = q_d \sum_{u_1, u_2} \varphi_{u_1}^*(\vec{r}) \varphi_{u_2}(\vec{r}) \langle a_{u_1}^\dagger(t) a_{u_2}(t) \rangle$$

u_i Satz v. Quantenzahl nach Bloch-Revue: $u_i = (\lambda_i, k_i)$

→ für elektronisch Größe ist $\langle a_{\lambda_1 k_1}^\dagger(t) a_{\lambda_2 k_2}(t) \rangle \equiv \langle a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2} \rangle$
 gesucht um Strom / Ladung zu beschreiben

b) lokale Anzahlergebnisse (z.B. optische Anregung v. Phononen)

$$\langle \vec{u}_{qs}(t) \rangle = \sum_{j j'} \left(\frac{t}{2m_s N \omega_{j j'}} \right)^{u_2} A_s^\dagger(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_s} \langle b_{j j'}^\dagger(t) \rangle + c.c.$$

$$\langle \vec{u}_{qs}(t) | \vec{u}_{qs}(t) \rangle \sim \langle b_{j j'}^\dagger(t) b_{j' j}(t) \rangle + \dots$$

mittleres Schwachquadrat

\Rightarrow f. phononisch freie ist $\langle b_{\beta}^{\dagger}(t) b_{\beta}(t) \rangle$ genutzt um
 Low ansatz / Schwachpunkt zu beschreiben

Interpretation $|\alpha\rangle \xrightarrow{\quad} \langle X_{\alpha}^{\dagger} X_{\alpha} \rangle \hat{=} \text{Besetzungszahl v. Phon / Elektron}$
 $|\beta\rangle \xrightarrow{\quad} \langle X_{\alpha}^{\dagger} X_{\beta} \rangle \hat{=} \text{Übergangsamplitude zwisch Zuständen}$
 $X_{\alpha} = \{a_{\alpha}, b_{\alpha}\} \quad X_{\alpha}^{\dagger} = \{a_{\alpha}^{\dagger}, b_{\alpha}^{\dagger}\}$

Hermitizität aus der Heisenberggleichungen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_1^{\dagger} a_2 \rangle = \langle [a_1^{\dagger} a_2, H] \rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta} \rangle = \langle [b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}, H] \rangle$$

$$H = H_0 + H_{el-ph}$$

$$H_0^{el} = \sum_{\lambda, k_1} \epsilon_{\lambda, k_1} a_{\lambda, k_1}^{\dagger} a_{\lambda, k_1} \Rightarrow \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}$$

Bloch elektronen mit $\epsilon_{\lambda, k}$

$$H_0^{ph} = \sum_{j, q_1} \hbar \omega_{j, q_1} b_{j, q_1}^{\dagger} b_{j, q_1} \Rightarrow \sum_{j, q_1} \hbar \omega_{j, q_1} b_{j, q_1}^{\dagger} b_{j, q_1} \equiv \sum_{q} \hbar \omega_q b_q^{\dagger} b_q$$

$q = (q, 1)$
 Kurznotation

$$H_{el-ph} = \sum_{j,k,q} D_{j+k,j} (b_{-q}^\dagger + b_{qj}) a_{j+k}^\dagger a_{jk}$$

$$\Rightarrow \sum_{j,k,q} D_{j+k,j} (b_{-q}^\dagger + b_{qj}) a_1^\dagger a_2$$

$$D_{j+k,j} = D_{qj} \delta_{k_1-k_2, q} \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \text{ mit: } \sum_{\substack{k_1, k_2, q, j \\ \lambda_1, \lambda_2}}$$

$$\text{Tip: } [a_1^\dagger, a_2, a_1, a_2^\dagger] = a_1^\dagger a_2 \delta_{12} - a_1 a_2^\dagger \delta_{1'2}$$

10.4. Elektron-Phonon-Bewegungsgleichungssysteme

a) Phononvariable : Bsp: 1 Band, ein Phononmode, j, l weg-

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

$$= \left[\sum_{q'} \hbar \omega_{q'} b_{q'}^\dagger b_{q'} + \sum_{q', k} D_{q'} a_{k+q'}^\dagger a_k (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger), b_q \right]$$

$$= \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} (-\delta_{qq'} b_q) + \sum_{q', k} D_{q'} a_{k+q'}^\dagger a_k (-\delta_{q, -q'})$$

an $[b_{q'}, b_q] = -\delta_{q'q}$

$$\dot{b}_q = -i\omega_q b_q - i \sum_k D_q a_{k-q}^\dagger a_k$$

(Elektron-Zustand $\hat{=}$
Quelle f. b_q)

b) Elektronische Variable

$$-i\hbar \partial_t a_1^\dagger a_2 = \left[H_0, a_1^\dagger a_2 \right] \xrightarrow[\text{Tip}]{\text{had}} (\epsilon_1 - \epsilon_2) a_1^\dagger a_2$$

$$+ \sum_{q_1, q_2} D_{1'2', q_1} \left[a_{1'}^\dagger a_{2'} (b_{q_1}^\dagger + b_{-q_1}^\dagger), a_1^\dagger a_2 \right]$$

(gleichzeit. vertauschbar)

(Tip)


$$\sum_{q_1, q_2} D_{1'2', q_1} \left\{ a_{1'}^\dagger a_{2'} (b_{q_1}^\dagger + b_{-q_1}^\dagger) \delta_{1'2'} - a_1^\dagger a_2 (b_{q_1}^\dagger + b_{-q_1}^\dagger) \delta_{1'2} \right\}$$

$$-i\hbar \partial_t a_1^\dagger a_2 = (\epsilon_1 - \epsilon_2) a_1^\dagger a_2 \quad \text{frei Bewegg. ohne Phonon}$$

$$+ \sum_{q_1} D_{1'1', q_1} (a_{1'}^\dagger a_2 b_{q_1}^\dagger + a_{1'}^\dagger a_2 b_{-q_1}^\dagger)$$

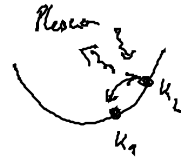
$$- \sum_{q_1} D_{2'2', q_1} (a_1^\dagger a_{2'} b_{q_1}^\dagger + a_1^\dagger a_{2'} b_{-q_1}^\dagger)$$

Interpretation $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle \hat{=} \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} \rangle \Rightarrow$



hier anzulichten den phonon assistierten Übergang

$$\langle a_1^\dagger a_2 b_q^{(t+1)} \rangle$$



⇒ Hirschmanproblem, zu lösen

$$\text{hier: } \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \langle b_q^{(t+1)} \rangle$$

$\neq 0 \Rightarrow$ ist aber i.a. nicht da, weil
 während Still veran gemittelt wird
 fällt nicht zu sehr voll Ergebnis
 da z.B. elektrische Leitfähigkeit abläßt

besser: Faltartig in $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle \langle b^\dagger b \rangle$ (also ein Ordy höher)

10.5. Stoßgleichungen: Quantenkinetik wird klassisch für $\hbar \rightarrow 0$

10.5.1. Korrelationsentwicklung f. El-Ph Hierarchie

$$\text{Zerleg. } \langle a_1^\dagger a_2 b_q \rangle = \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \langle b_q \rangle + \underbrace{\langle a_1^\dagger a_2 b_q \rangle^c}_{\text{Korrelat. zur Zerleg. in Mittelwerte (Korrelation)}}$$

Ziel: Berechnung der Korrelationskomponente

$$\frac{d}{dt} \langle a_1^\dagger a_2 b_q \rangle^c = \frac{d}{dt} \langle a_1^\dagger a_2 b_q \rangle - \frac{d}{dt} (\langle a_1^\dagger a_2 \rangle \langle b_q \rangle)$$


Korrelat. findet man hier
 eine vernünftige Faktorisierung

man spricht von Korrelation, entwickelt in u -ter Ordnung wenn nach u Vertauschung faktorisierbar wird, Glücke sind dann in D^u gegeben

Faktorisierung immer nach Regel $\langle AB \rangle = \langle (A + \delta A)(B + \delta B) \rangle$
 $\approx \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle \delta A \rangle \langle B \rangle + \langle \delta B \rangle \langle A \rangle + \langle \delta A \rangle \langle \delta B \rangle$

$\hat{=}$ Störtheorie in u -ter Ordnung!

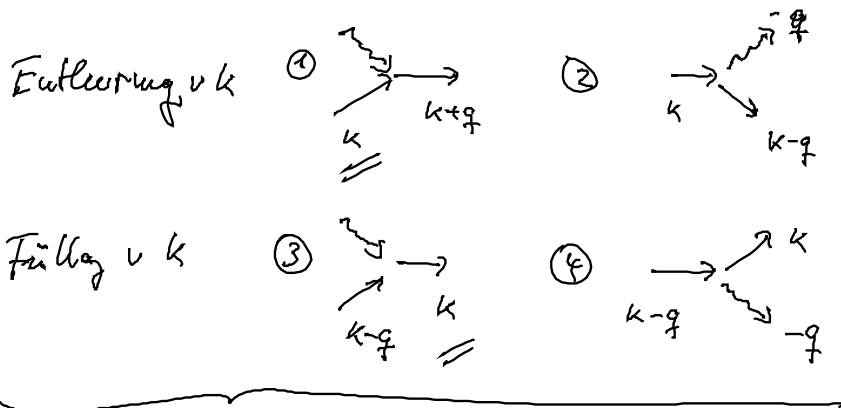
10.5-2. Einbandmodell: Quantenkinetik

Ergebnis der $\bar{u}A$: λ_{ij} weglassen, 1 Phonon mode
 für die elektronische Besetzungszahl $n_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$ 
 mittlere Zahl der Elektronen im Band im Zustand k

$$-i\hbar \partial_t \langle a_k^\dagger a_k \rangle = \sum_f D_f \left(\langle a_{k+q}^\dagger a_k b_f \rangle + \langle a_{k-q}^\dagger a_k b_f^\dagger \rangle - \langle a_k^\dagger a_{k-q} b_f \rangle + \langle a_k^\dagger a_{k+q} b_f^\dagger \rangle \right)$$

Zeitdynamik

gegeben durch Ein- und Ausstrahlprozesse in der Zustand k :



$\hat{=}$ obige Quantenamplituden

Quantenamplituden: (o.B.-) $n_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$, $u_f^{ph} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_f}{kT}} - 1}$

$-it \frac{d}{dt} \langle a_{k+q}^\dagger a_k b_q \rangle \Big|_{el,ph} = D_q (n_q (\sigma_k - \sigma_{k+q}) + (\sigma_{k-1}) \sigma_{k+q})$

Annahme: Phonon sind im flüssigen und dynamisch auf Besetzungszahlen niedergeföhrt σ_k

ist Dgl. mit Quelle und kann mit $\langle a_{k+q}^\dagger a_k b_q \rangle \Big|_{el,ph}(\hbar\omega)$ gemessen
gemessen integriert werden

für alle 4 Terme, dann in Gleichung für $-it \frac{d}{dt} \sigma_k(t)$ einsetzen

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

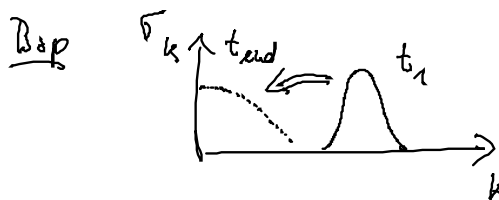
Zeitdynamik
der Elektronenbesetzung
im Impulszustand k

Ausstrahlung aus k
(entleert k)

Einstrahlung in k
(füllt k)

Bemerkung:

a) beschreibt die Umverteilung von Elektronen im Band im Verlauf der Zeit



Übergang einem Nichtgleichgewichtszustand in flüssigen (Fermi)

stationäre Lösung sollte die Fermi-Verteilung sein

b) Rate: $\epsilon_k = \hbar v_k$

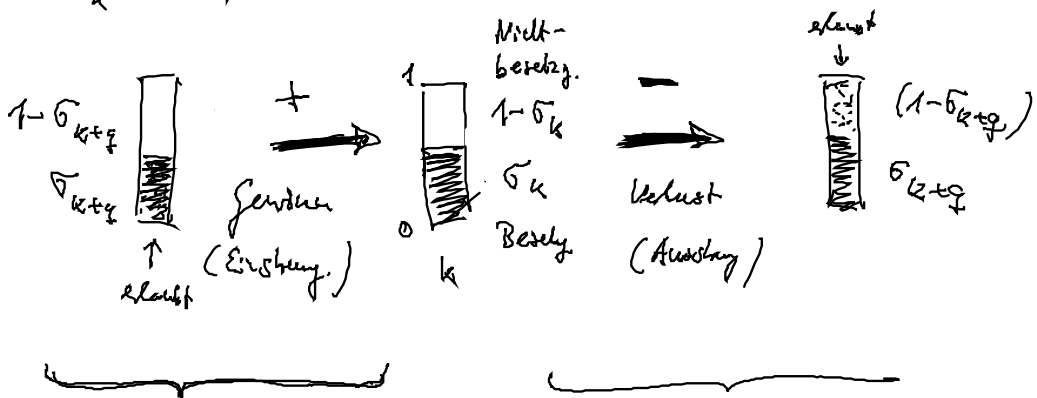
$$f_{\text{aus}}(t, t') = 2 \sum_f |D_f|^2 (1 - \sigma_{k+f}(t')) \left\{ \cos(v_{k+f} - v_k - \omega_f)(t-t') u_f + \cos(v_{k+f} - v_k + \omega_f)(t-t') (u_f + 1) \right\}$$

$$f_{\text{ein}}(t, t') = 2 \sum_f |D_f|^2 \sigma_{k+f}(t') \left\{ \cos(v_{k+f} - v_k - \omega_f)(t-t') (u_f + 1) + \cos(v_{k+f} - v_k + \omega_f)(t-t') u_f \right\}$$

c) es existieren Stoßprozesse als Gitterphänomene, denn über $\cos(\epsilon_{k+f} t)$ sind Faktoren ungl., es besteht Gedächtniseffekte, man sieht (wohl) keine Energieerhaltung bei Stoß: Quantenkinetik

d) Struktur der Funktion:

σ_k wird gefüllt (+) bzw. entleert (-) mit Stärke $|D_f|^2$



proportional zu

$$(1 - \sigma_k), \sigma_{k+q}$$

"Platz in
den Ziel-
zuständen"
"Besitzstellg.
durch
Startzustand"

proportional zu

$$\sigma_k, 1 - \sigma_{k+q}$$

"Besitzstellg.
durch
Startzustand"
"Platz in den
Zielzuständen"

e) Interpretation von $\cos(\underbrace{\nu_{k+q} - \nu_k \pm \omega_q}_{=0}) (t - t')$

Später: strikte E-Erhaltung $\nu_k \pm \omega_q = \nu_{k+q}$ $\sim \hbar \omega_q$ Phononabsorption
 $\nu_k - \omega_q = \nu_{k+q}$ Phononemission $\sim \hbar(\omega_q + 1)$

f) Vorstellung

