9.3. RPA-, Born-, Markoffnäherung am Beispiel der Phononlebensdauer

Zusammenfassung / Systematisierung bisheriger Näherungen:

a) nur energetisch passende Terme mitnehmen, dazu unpassende Phasen $e^{i\omega_x t}$ weglassen:

$\boxed{\text{RPA: „Random Phase Approximation"}}$

b) Abbruch der Hierarchie in bestimmter Ordnung des Wechselwirkungsmatrixelements V durch

$\boxed{\text{Faktorisierung von EW}}$ und Ersetzen d. Resultats durch eine genäherte Lösung niedriger Ordnung

$\hat{=}$ $\boxed{\text{Bornsche Näherung}}$

$$\underbrace{\langle AB\rangle}_{\text{Operatorprodukt}} = \Big\langle \Big[\underbrace{(A-\langle A\rangle)}_{\delta A} + \langle A\rangle \Big] \cdot \Big[\underbrace{(B-\langle B\rangle)}_{\delta B} + \langle B\rangle \Big] \Big\rangle$$

Abweichg. v. Mittelwert

$$= \langle \delta A\rangle \langle \delta B\rangle + \langle \delta A\rangle \langle B\rangle + \langle A\rangle \langle \delta B\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle$$

Hoffnung: Abweichungen vom Mittelwert $\langle \delta A\rangle$ hoffentlich klein

für $\langle A\rangle$ Approximation einsetzen

c) $\boxed{\text{System – Bad Annahme:}}$ (System: optische Mode, Bad: akust.)

akustische Phonon sind nicht stark verändert durch Existenz der optischen Mode (akust. Phonon sind in Nähe d. GG)

$$\langle d_q^+ d_{q'} \rangle \underset{\uparrow}{=} \delta_{qq'} \langle d_q^+ d_q \rangle = \text{Boseverteilung}$$

Gleichgewichtsannahme (Badannahme)

ebenso $\langle d_q^+ \rangle = \langle d_q \rangle = 0$

gekoppeltes System v. akustisch und optischen Moden: $\omega_q = \omega_{-q}$

$$(1) \quad \langle \dot{b}_{-q}^+ \rangle = i\,\omega_q^0 \langle b_{-q}^+ \rangle + i\,V \sum_{q_2} \langle d_{-q_2}^+ d_{q_2-q}^+ \rangle$$

$$(2) \quad \langle \dot{(d_{-q}^+ d_{-q'}^+)} \rangle = i(\omega_q + \omega_{q'}) \langle d_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle + 2iV(1 + n_{q'} + n_q) \langle b_{q'-q}^+ \rangle \quad \text{Quellterm}$$

- wenn $\langle b_{q'q}^+ \rangle \neq 0$, so wird der Zweiphononprozeß (akust. Moden) angeschaltet, siehe Gl. (2) – Quellterm
- Quellterm enthält spontane Prozesse „1" und stimulierte Prozesse über n_q = Boseverteilung d. akustisch Phonon $\neq 0$
- wenn $\langle d_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle \neq 0 \Rightarrow$ wirkt auf Amplitude $\langle b_{q'-q}^+ \rangle$ zurück und wird gedämpft (E-Verlust an Bad)

(v)

9.3.1. Born - Markoff Näherung

formale Lösg v. (2) (Beweis d. Einsetzen):

$$\langle d_{-q}^{+} \, d_{-q'}^{+} \rangle (t) = 2 i \vartheta \left(1 + n_q + n_{q'}\right) \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{i(\omega_q + \omega_{q'})(t-t')} \langle b_{q'-q}^{+} \rangle (t')$$

(inhomogene Lsg.)

jetzt Bornsche Näherung: ersetze $\langle b_{q'-q}^{+}(t') \rangle$ durch eine näherungsweise ungestörte Lösung:

$$\langle b_{q'-q}^{+}(t) \rangle = \underbrace{\langle \tilde{b}_{q'-q}^{+}(t) \rangle}_{\text{Modifikation der freien Lösung}} \underbrace{e^{i \omega_{q'-q}^{0} t}}_{\text{freie Lösung}}$$

$$\langle \dot{\tilde{b}}_q \rangle \ll \omega_q^0 \langle \tilde{b}_q \rangle$$

schwache Modifikation, um Quasiteilchen eigenschaften ($\gamma_q \ll \omega_q$ z.B.) zu erhalten

rhs: Zeitintegral:

$$\int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{i(\omega_q + \omega_{q'})(t-t')} \, e^{i \omega_{q'-q}^{0} t'} \langle \tilde{b}_{q'-q}^{+} \rangle (t')$$

Übergang $s = t - t'$ $\quad ds = -dt'$

$$= \int_0^\infty ds\, e^{i(\omega_q + \omega_{q'})s}\, e^{i\omega^0_{q'-q}(t-s)} \langle \tilde{b}^+_{q'-q} \rangle (t-s)$$

es existieren Gedächtniseffekte in $\tilde{b}$, hängt von allen Zeiten s / $t' < t$ ab!

$$= \underbrace{\int_0^\infty ds\, e^{i\overbrace{(\omega_q + \omega_{q'} - \omega_{q'-q})}^{\Delta\omega_{qq'}}s}}_{\substack{\text{Diracidentität} \\ \pi\,\delta(\Delta\omega_{qq'}) + i\,\underbrace{P}_{\text{Hauptwertintegral}}(\Delta\omega_{qq'})}} \underbrace{\underbrace{\langle \tilde{b}^+_{q'-q} \rangle (t-\cancel{s})}_{\substack{\text{weil Glg. veränderlich} \\ \text{ist bzgl. Phonon frequenz } \omega^0_{q'-q}}} e^{i\omega^0_{q'-q} t}}_{b^+_{q'-q}(t)}$$

Ergebnis in Gl. (1) einsetzen:

$$\langle \dot{b}^+_{-q} \rangle = i\omega^0_q \langle b^+_{-q} \rangle + iV \sum_{q_2} \langle d^+_{-q_2} d^+_{q_2-q} \rangle$$

$$= i\tilde{\omega}^0_q \langle b^+_{-q} \rangle - \gamma_q \langle b^+_{-q} \rangle$$

a) Lebensdauer γ_q^{-1}:

$$\gamma_q = 2\pi \sum_{q_2} V^2 \delta(\omega_{q_2} + \omega_{q_2-q} - \omega^0_q)\, (1 + n_{q_2} + n_{q_2-q})$$

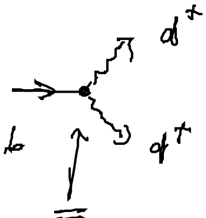
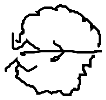
Spontan $\quad$ Stimulierte

Rate mit der optische Phonon in akustische umgewandelt werden

b) Energieverschiebung δ_q : $\tilde{\omega}_q^0 = \omega_q^0 + \delta_q$

$$\delta_q = -2 \,\underline{P} \sum_{q_2} V^2 \frac{1}{\omega_{q_2} - \omega_{q-q} - \omega_q}$$

Es erscheint eine E-Verschiebung und Lebensdauer der kollektiven Anregung „Phonon“.

c) Prozeß :  (Diagram  Antwort)

d) Interpretation: Im <u>Vertex</u> gilt Impulserhaltung <u>und</u> durch die Markoffnäherung $\tilde{b}(t-s) \to \tilde{b}(t)$,

d.h. ohne Gedächtnis gilt Energieerhaltung

alle Prozesse die $\delta(\Delta\omega_{qq'})$ „dürfen“ zur Lebensdauer beitragen: $\omega_q^0 = \omega_{q_2} + \omega_{q_2-q}$!

$\Rightarrow$ in der Markoffnäherung $\exists$ strikte E-Erhaltung

e) Simultanes Auftreten von δ_q, γ_q ist eine Version d. Fluktuations-Dissipations-Theorems

Fluktuation d. Energie δ_q und Dissipation d. Energie γ_q sind verbunden

9.3.2. Selbstkonsistente Born Markoff Näherung

Ansatz $\langle b^+_{q'-q}(t)\rangle = \langle b^+_{q'-q}(t')\rangle \, e^{\overbrace{i(\omega^0_{q'-q}+\Sigma_{q'q})(t-t')}}$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad$ „Propagator“

WW-Effekte werden in $\Sigma_{q'q}$ versteckt

$(\ \Sigma = \delta + i\gamma\ )$

und dieser Ansatz wird genutzt um (1) + (2) zu lösen:

$$\leadsto \quad \gamma_q = 2\sum_{q_2} |V|^2 \frac{\gamma_q}{(\omega_{q_2}+\omega_{q_2-q}-\omega^0_q)^2+\gamma_q^2} \qquad \text{(spontan)}$$

Selbstkonsistenzgleichung f. γ_q (ohne Beweis)

f. $\gamma_q \to 0$ auf rechter Seite entsteht

wieder die δ-Fkt $\qquad \dfrac{\gamma}{x^2+\gamma^2} \xrightarrow[\gamma\to 0]{} \pi\,\delta(x)$

10. Elektron-Phonon Wechselwirkung

10.1. allgemeine Bemerkungen zum Stand d. VL

$\underbrace{\text{Ionen } R_n(t)}$ $\underbrace{\text{Elektron } \vec{r}_i(t)}$

$\vec{R}_n(t) = \vec{R}_n^0 + \vec{u}_n(t) \xRightarrow[\vec{u}_n = 0]{} \sum_n W_{el\text{-}ion}(\vec{r}_i - \vec{R}_n^0)$ als Potential

R_n^0 : Ruhelage $\Rightarrow$ $\boxed{\text{Quasielektron}}$ als Blochwelle

$\vec{u}_n(t)$ Auslenkung (effektive Masse etc.)

$\Rightarrow \vec{u}_n \neq 0$: $\boxed{\text{Phonon}}$

$\vec{u}_n \neq 0$ führt zu Elektron Phonon WW

↳ Elektron im dynamischen Gitter

$$W_{el\text{-}ion} = \sum_n \vec{u}_n(t) \cdot \vec{\nabla}_{R_n^0} W_{el\text{-}ion}(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

(Thema von Kapitel 10, siehe VL Born-Oppenheimer H)

Beispiele

WW stark → Supraleitung

WW schwach → ohmsche Leitfähigkeit

10.2. Quantisierung d. Elektron-Phonon WW

$$H_{el\text{-}ion} = \sum_{s,n,i} \underbrace{\vec{\nabla}_{R_n} W_{el\text{-}ion}}_{W_{ei}} (\vec{r}_i - \vec{R}_n) \cdot \vec{u}_{ns}$$

Übergang zu 2. Quantisierung :

Elektronen: $\sum_{i} \ldots \longrightarrow \sum_{1,2} \langle 1 | \ldots | 2 \rangle a_1^+ a_2$ $\{1,2\}$ Satz v. Quantenzahlen des Blochelektron λ, k

Ionen: $\vec{u}_{sn} = \sum_{jqs} \left(\frac{\hbar}{2m_s N \omega_j(q)} \right)^{1/2} \vec{A}_s(q,j)\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \left(b_{jq}^+ + b_{j-q} \right)$

$$H_{el-ion} = \sum_{\substack{1,2\\ n,s}} \langle 1 | \vec{\nabla}_{R_n} W_{ei}(\vec{r}-\vec{R}_n) \cdot \vec{u}_{sn} | 2 \rangle a_1^+ a_2$$

partielle Integration, Randterm soll verschwinden!

$$= -\sum_{\substack{1,2\\ ns}} \langle 1 | W_{ei}(\vec{r}-\vec{R}_n)\, \vec{\nabla}_{R_n} \cdot \vec{u}_{sn} | 2 \rangle a_1^+ a_2$$

W_{ei} ist eine periodische Funktion, Fourierreihe ist günstig

$$\Rightarrow W_{ei}(\vec{r}-\vec{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k V_k\, e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R}_n)}$$, V_k: Fourieramplitude

$$H_{el-ion} = -\sum_{\substack{ns\\ 12}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k V_k \langle 1 | e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R}_n)}\, \vec{\nabla}_{R_n} \cdot \vec{u}_{sn} | 2 \rangle a_1^+ a_2$$

$$\vec{\nabla}_{R_n} \cdot \vec{u}_{ns} = \sum_{\substack{q,j\\ \alpha}} \left(\frac{\hbar}{2Nm_s \omega_j(q)} \right)^{1/2} \Big\{ A_s^\alpha(q,j)\, b_{qj}^+\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} [-iq^\alpha]$$

(α: kartesische Koordinaten)

$$+ \text{h.a. (dann } q \to -q) \Big\}$$

$$H_{el-ion} = i \sum_{\substack{k\, qjns\\ 1,2,\alpha}} \left(\frac{\hbar}{2N^2 m_s \omega_j(q)} \right)^{1/2} \cdot V_k \Big\{ \langle 1 | b_{qj}^+\, \underline{\underline{e^{i(\vec{k}-\vec{q})\cdot\vec{R}_n}}}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} A_s^\alpha q^\alpha - b_{qj}\, e^{i(\vec{k}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} A_s^{*\alpha} q^\alpha | 2 \rangle \Big\}\, a_1^+ a_2$$

$\sum_n \{ \dots \}$ mit Bloch funktion berechnen:

$$= \langle 1 | b^{+}_{qj} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \underline{N \delta_{kq}} A^{\alpha}_{s} q^{\alpha} - b_{q} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} N \delta_{k,-q} A^{*\alpha}_{s} q^{\alpha}) | 2 \rangle$$

$$|1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\lambda_{1/2}}(\vec{r}) \, e^{i\vec{k}_{1/2}\cdot\vec{r}} \quad \text{Bloch funktionen}$$

$$= \frac{N}{V} \underbrace{\int dV}_{\sum_n \int d\Omega_n} u^{*}_{\lambda_1}(\vec{r}) \, u_{\lambda_2}(\vec{r}) \, e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k})\vec{r}} \left(b^{+}_{qj} A_s q^{\alpha} \delta_{kq} - b_{qj} A^{*\alpha}_{s} q^{\alpha} \delta_{k,-q} \right)$$

Summe über Integrale der Zellen n

aus $\sum_n e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k})\cdot\vec{R}_n} \rightarrow N \delta_{k_1 - k_2, -k}$

einsetzen und Ausführen:

$$\boxed{H_{el\text{-}\underline{phon}} = \sum_{jkq\lambda} D_{q\lambda j} \left(b^{+}_{-qj} + b_{qj} \right) a^{+}_{\lambda k+q} \, a_{\lambda k}}$$

$$D_{q\lambda_j} = \sum_s \left(\frac{\hbar}{2 m_s \omega_j(q)} \right)^{1/2} \vec{A}_s \cdot \vec{q} \; V_q \quad \text{Matrixelement der WW} \sim V_q$$

Hamiltonian der El-Phonon WW mit 2 Prozessen:

Phonon emission (b^{+}) aufgrund des elektron. Übergangs $k \to k+q$

Phonon absorption (b) — " —