

# 6. Dynamische Effekte

## 6.1. Wechselwirkung zwischen Phononen und Elektronen

Bislang: Entkopplung der Elektronen + Gitterdynamik (Born-Oppenheimer Näherung)  
 Korrektur  $\sim$  Größenordnung  $\sqrt{\frac{m_e}{M}} \approx 10^{-2}$  (gar nicht so klein  $\rightarrow$  nicht immer gute Näherung)  
 $\rightarrow$  störungstheoretische Behandlung der WW

Ionen  $R_1 \dots R_M$   
 $:= X$

Elektronen  $r_1 \dots r_N$   
 $:= x$

Gittergleichung

$H_G(x) \chi_{\gamma_n}(x) = E_{\gamma_n}^G \chi_{\gamma_n}(x)$   
 $\uparrow$  Anzahlnzahl der Ionen  
 $\uparrow$  Anzahlnzahl der Elektronen

$H_G(x) = E_V^e(x) - E_V^e(x^0) + V_{ion}(x) - V_{ion}(x^0) + T_{ion}(x)$   
G-G-Lage  
 $= V(x, x^0) + T_{ion}(x)$

$\downarrow$   
Phononen  
 • quantisierte Gitterschwingungen

Elektronengleichung

$H_E(x, x^0) \phi_v(x, x^0) = E_{v\mu}^E \phi_v(x, x^0)$

$H_E(x, x^0) = H_E(x) + H_{e-ion}(x, x^0) + V_{ion}(x^0)$   
Konstante  
 $\sum_k \sum_e V_{e-i}(r_k - R_e^0)$

$\downarrow$   
Kristallelektronen  
 • enthalten WW mit statischen Hintergrundpotential

Dynamisches Ionengitter  
 $H_{e-ion} = \sum_k \sum_e V_{e-i}(r_k - R_e(t))$

Auswertung  
 $\downarrow$   
 Auswertung:  $R_e(t) = R_e^0 + u_e(t)$

Ansatz: Taylorentwicklung um Ruhelage

$H_{e-ion} = \sum_k \sum_e V_{e-i}(r_k - R_e^0) + \sum_k \sum_e u_e \nabla_{R_e} V_{e-i}(r_k - R_e) \Big|_{R_e^0} + \dots$

0. Ordnung  
 ( $\rightarrow$  gibt Blockfkt.)

1. Ordnung  
 ( $\rightarrow$  WW mit zeitlich veränderlichem Potenzial)

→ Formulierung in 2. Quantisierung (für ein Elektron am Ort  $r$  und ein Band):

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{k, k', \sigma} \langle k | V_{e-ph}(r) | k' \rangle a_{k', \sigma}^\dagger a_{k, \sigma}$$

↑  
Fermionische Erzeuger/Verwichter (Elektronen)

- wähle Basis der Blochfunktionen
- Matrixelement muss spininvariant sein, da Gitter-Ausdehnung unabhängig vom Spin ist

mit Matrixelement

$$\langle k | V_{e-ph} | k' \rangle = \int d^3r \psi_k(r) \sum_{e=1}^M \nabla V_{e-i}(r - R_{e,0}) u_e \psi_{k'}(r)$$

Entwicklung von  $V_{e-i}$  in Fourier Reihe

$$V_{e-i}(r) = \sum_k V_k e^{ikr}$$

$$\rightarrow \nabla V_{e-i}(r) = \sum_k ik V_k e^{ikr}$$

$$= \sum_{\tilde{k}} i \tilde{k} V_{\tilde{k}} \int d^3r \psi_k^*(r) \sum_{e=1}^M e^{i\tilde{k}(r - R_{e,0})} u_e \psi_{k'}(r)$$

↑  
Ausdehnung entspricht Linearkombination von Phononen-Erzeuger und Verwichter Op.

$$u_e = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_j(q)}} (b_{q,j} + b_{-q,j}^\dagger) e_j(q) e^{iq \cdot R_{e,0}}$$

↑  
Vermittler einer Gitter-Schwingung



↑  
Polarisationsrichtung des Phonons

Bem:  $\hbar \mu = \sum_{q,j} \hbar \omega_j(q) (b_{q,j}^\dagger + b_{-q,j} + \frac{1}{2})$

Zusammen ergibt sich für die Elektronen-Phononen WW:

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{k,q} M_{k,q} (b_{-q}^\dagger + b_q) a_{k+q}^\dagger a_k$$

(ein Band, keine Unklapp-Prozesse)

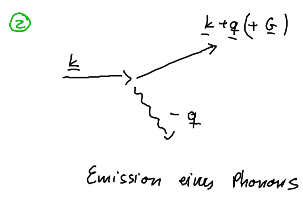
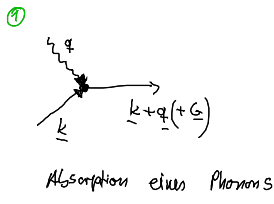
allgemein

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{n, \sigma} \sum_{\substack{G \\ \text{re. Gittervektor}}} \sum_{k,q} M_{k, q+G}^i (b_{q+G} + b_{-q+G}^\dagger) a_{k+q+G, n, \sigma}^\dagger a_{k, n, \sigma}$$

Fröhlichs Modell

$$M_{k, q+G}^i = - \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega_j(q)}} \underbrace{i(\underline{q} + \underline{G}) \cdot \underline{e}_j(q)}_{\text{Polarisationsrichtung}} V_{q+G} \frac{1}{V_{BZ}} \int_{V_{BZ}} d^3r u_{k+q+G}^*(r) u_k(r)$$

Blochfunktion



- Delta-Funktionen entstehen bei Brechung der Matrixelemente und strenge Impulserhaltung
- falls mehrere Bänder von Elektronen betrachtet werden ist Interband-Strahlung möglich
- falls nur ein Atom pro Elementarzelle  
→ nur akustische Phononen  
→ Skalarprodukt  $\otimes$  erlaubt nur WW mit longitudinalen Phononen

**Festkörper Hamiltonian**

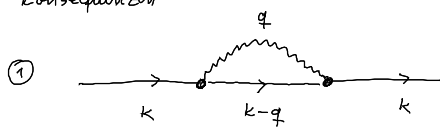
$$\hat{H} = \sum_{k, n, \sigma} \epsilon_n(k) a_{k, n, \sigma}^\dagger a_{k, n, \sigma} + \sum_{k, q, \sigma} M_{k, q, \sigma}^{j, n, n'} (b_{q, j}^\dagger + b_{-q, j}) a_{k+q, \sigma}^\dagger a_{k, n, \sigma} + \sum_{q, j} \hbar \omega_j(q) (b_{q, j}^\dagger b_{q, j} + \frac{1}{2})$$

Elektronensystem ohne e-e-WW      Elektron-Phonon-WW      Phononensystem

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k_2, q \\ \sigma, \sigma' \\ n, n'}} U_{k, k_2, q}^{n, k_2, n', k_1, n} a_{k+q, n, \sigma}^\dagger a_{k_2, -q, n', \sigma'} a_{k_1, n, \sigma}$$

Elektron-Elektron-WW

- mögliche Konsequenzen

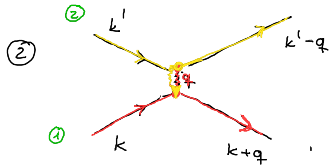


$\hat{=}$  **Polaron**

Elektron mit lokalisiertem Gitterpotentialschritt  
→ ergibt höhere effektive Masse des Elektrons

- mathematisch kann eine Polaron-Transformation Subsysteme [z.B. Elektronen, Phononen] wegtransformieren  
Re-Normierung der 1-Teilchen-Energie durch EL-Ph. WW

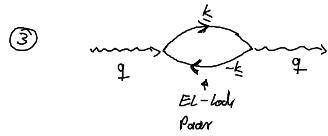
die lineare WW der verschiedenen  
→ übrig bleiben neue Erzeuger und Vernichter  $c_p$  der neuen Quasiteilchen (z.B. Polaron) und ein Hamiltonoperator der nur noch auf ein Subsystem wirkt



Von einem Elektron emittiertes Photon wird vom anderen absorbiert

$\hat{=}$  kann eine effektiv positive Anziehung der beteiligten Elektronen hervorgerufen  
(keine Coulombs WW sondern EL.-Photon WW)

Z-Teilchen WW verursacht durch EL.-Ph WW)



Erzeugung eines Elektron-Loch Paares + Re-Absorption

$\rightarrow$  Renormierung der Photonen 1T-Energie