

### 9.3. RPA-, Born-, Markoffnäherung am Beispiel

#### des Phononlebensdauer

Zusammenfassung / Systematisierung bisheriger Näherungen:

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

RPA: "Random Phase Approximation"

- b) Abbund der Hierarchie in bestimmter Ordnung der  
Gleichungsmatrix elements  $V$  durch

Faktorisierung von EW und Einsetzen d. Resultats

durch eine gekürzte Lösung niedriger Ordnung

$\hat{=}$  Bornsche Näherung

$$\underbrace{\langle AB \rangle}_{\text{Operatorprodukt}} = \left\langle \underbrace{[A - \langle A \rangle]}_{\delta A} + \langle A \rangle \cdot \underbrace{[B - \langle B \rangle]}_{\delta B} + \langle B \rangle \right\rangle_{\text{Abzug v. Mittelwert}}$$

$$= \underbrace{\langle \delta A \rangle \langle \delta B \rangle}_{\text{---}} + \underbrace{\langle \delta A \rangle \langle B \rangle}_{\text{---}} + \underbrace{\langle A \rangle \langle \delta B \rangle}_{\text{---}} + \underline{\underline{\langle A \rangle \langle B \rangle}}$$

Hoffung: Abweichungen vom Mittelwert  $\langle \delta A \rangle$  letztlich klein

für  $\langle A \rangle$  Approximation einsetzen

c) System - Bad Annahme: (System: optisch Mode, Bad: elast.)

elastische Phonon sind nicht stark verändert durch Existenz der optisch Mode (elast. Phonon sind in Nähe d. GG)

$$\langle d_{q'}^+ d_q^+ \rangle = \delta_{qq'} \langle d_q^+ d_q^+ \rangle = \text{Bose verteilung}$$

$\uparrow$   
 folgerungsannahme (Badannahme)

ebenso  $\langle d_q^+ \rangle = \langle d_{q'}^+ \rangle = 0$

gekoppelte System v. elastisch und optische Moden:  $\omega_q = \omega_{q'}$

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

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

- wenn  $\langle b_{q'-q}^+ \rangle \neq 0$ , so wird der Zwei-Phonon prozess (elast. Moden)

angereichert, siehe Gl. (2) - Quellterm

- Quellterm enthält spontanen Prozesse "1" und stimulierte Prozesse über  $u_q = \text{Bose verteilung d. elastisch Phonon} \neq 0$

- wenn  $\langle d_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle \neq 0 \Rightarrow$  wirkt auf Amplituden

$\langle b_{q'-q}^+ \rangle$  zurück und wird gedämpft (E-Verlust an Bad)

(v)

### 9.3.1. Born - Markoff Näherung

formale Lösung v. (2) (Beweis d. einsetzen) :

$$\langle d_{-q}^+ d_{-q}^+ \rangle(t) = 2iV (1 + u_q + u_{q'}) \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\omega_q + \omega_{q'})(t-t')} \langle b_{q-q'}^+ \rangle(t')$$

(inhomog. Lsg.)

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

Näherungsweise ungestörte Lösung:

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

$$\langle b_q \rangle \ll \omega_q \langle \tilde{b}_q \rangle \quad \text{schwache Modifikation, um Quantenzahlen eigenscharakter}$$

( $\gamma_q \ll \omega_q$  z.B.)  
zu erhalten

rhs: Zeitintegral:

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

Übergang  $s = t - t'$   $ds = -dt'$

$$= \int_0^\infty ds e^{i(\omega_q + \omega_{q'}) s} e^{i\omega_{q'-q}^\circ (t-s)} \langle b_{q'-q}^+ \rangle (t-s)$$

o es existieren Jochdrehseffekte in  $\tilde{b}_1$  hängt von alle Zeite  $s/t' < t$  ab!

$$= \int_0^\infty ds e^{i(\omega_q + \omega_{q'} - \omega_{q'-q}) s} \langle b_{q'-q}^+ \rangle (t-s) e^{i\omega_{q'-q}^\circ t}$$

$\Delta\omega_{qq'}$  weil Eqs. verändert wird  
ist bzgl. Phonon frequenz  $\omega_{q'-q}^\circ$

Direktidentität

$$b_{q'-q}^+(t)$$

$$2\pi \delta(\Delta\omega_{qq'}) + i \underline{P}(\Delta\omega_{qq'})$$

Hauptwertintegral

Ergebnis in Gl. (1) einsetzen:

$$\langle b_{-q}^+ \rangle = i\omega_q^\circ \langle b_{-q}^+ \rangle + iV \sum_{q_2} \langle d_{q_2}^+ d_{q_2-q}^+ \rangle$$

$$= i\tilde{\omega}_q^\circ \langle b_{-q}^+ \rangle - \beta_q \langle b_{-q}^+ \rangle$$

a) Lebensdauer  $\beta_q^{-1}$ :

$$\beta_q = 2\pi \sum_{q_2} V^2 \delta(\omega_{q_2} + \omega_{q_2-q} - \omega_q) (1 + u_{q_2} + u_{q_2-q})$$

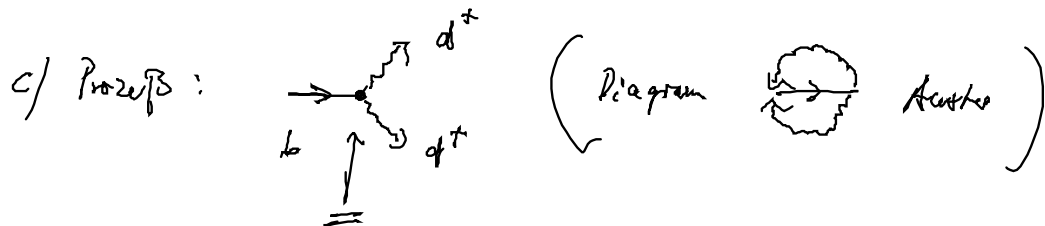
↑                      ↖                      ↗  
Spontane                      Stimulierte

Rate mit der optische Phononen in Schwingung umgewandelt werden

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

$$\delta q = -2P \sum_{q_2} v^2 \frac{1}{\omega_{q_2} - \omega_{q-q_2} - \omega_q}$$

Es existiert ein E-Verschiebung und Lebensdauer der kollektiven Anregung "Phonon".



d) Interpretation: Im Kontur gilt Impulserhaltung und durch die Markoffnähe  $\tilde{b}(t-s) \rightarrow \tilde{b}(t)$ ,  
 d.h. ohne Gedächtnis gilt Energieerhaltung  
 alle Prozesse die  $\delta(\Delta\omega_{qq'})$  "dürfen" zur Lebensdauer  
 beitragen:  $\omega_q^0 = \omega_{q_2} + \omega_{q_2-q}$  !

↓ in der Markoffnähe  $\mathcal{F}$  steht E-Erhaltung

e) simultanes Auftreten von  $\delta q$ ,  $p_q$  ist  
 eine Version des Fluktuation-Dissipation Theorems  
 Fluktuation d. Energie  $\delta q$  und Dissipation d. Energie  $p_q$   
 sind verbunden

### 9.3.2. selbstkonsistente Born-Markoff Näherung

$$\text{Ansatz } \langle b_{q'q}^{\dagger}(t) \rangle = \langle b_{q'q}^{\dagger}(t') \rangle \underbrace{e^{i(\omega_{q'q}^0 + \Sigma_{q'q}^{\dagger})(t-t')}}_{\text{Propagator}}$$

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

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

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

$$\downarrow \quad \gamma_q = 2 \sum_{q'} |V|^2 \frac{\gamma_{q'}}{(\omega_{q'q}^0 + \omega_{q'q}^0 - \omega_q^0)^2 + \gamma_{q'}^2} \quad (\text{spontan})$$

Selbstkonsistenzgleichung für  $\gamma_q$  (ohne Beweis)

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

$$\text{links der } \delta\text{-Peak} \quad \frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \pi \delta(x)$$

### 10. Elektron-Phonon Wechselwirkung

#### 10.1. allgemeine Bemerkungen zum Stand d. VL

$$\underbrace{\text{Ionen } \vec{R}_u(t)} \quad \underbrace{\text{Elektron } \vec{r}_i(t)}$$

$$\vec{R}_u(t) = \vec{R}_u^0 + \vec{u}_u(t) \quad \xrightarrow{\vec{u}_u=0} \quad \sum_u W_{e-ion} (\vec{r}_i - \vec{R}_u) \text{ als Potential}$$

$\vec{R}_u^0$ : Ruhelage  
 $\vec{u}_u(t)$ : Auslenkung  
 $\Rightarrow \vec{u}_u \neq 0$  Phononen  
 $\Rightarrow$  Quasielektron als Bloch wellen (effektive Masse etc.)

$\vec{u}_u \neq 0$  führt zu Elektron Phonon WW  
 u Elektron im dynamischen Gitter

$$W_{e-ion} = \sum_u \vec{u}_u(t) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_u^0} W_{e-ion} (\vec{r}_i - \vec{R}_u)$$

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

WW stark

Beispiele

WW schwach

Supraleitung

ohmsche Leitfähigkeit

## 10.2. Quantisierung d. Elektron-Phonon WW

$$H_{e-ion} = \sum_{s, k, i} \underbrace{\vec{\nabla}_{\vec{R}_u}}_{W_{ei}} W_{e-ion} (\vec{r}_i - \vec{R}_u) \cdot \vec{u}_{ks}$$

Übergang zur 2. Quantisierung:

Elektron:  $\sum_i \dots \rightarrow \sum_{1,2} \langle 1 | \dots | 2 \rangle a_1^\dagger a_2$   $\{1,2\}$  Setze u. Anzahlzahlen des Blockelctron  $\lambda, \kappa$

Ion:  $\vec{u}_{s\kappa} = \sum_{\vec{q}j} \left( \frac{\hbar}{2m_s N \omega_j(\vec{q})} \right)^{1/2} \vec{A}_s(\vec{q}j) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_\kappa} (b_{\vec{q}j}^\dagger + b_{-\vec{q}j})$

Hamiltonian =  $\sum_{\substack{1,2 \\ n,s}} \langle 1 | \underbrace{\vec{\nabla}_{\vec{R}_n} W_e(\vec{r} - \vec{R}_n)}_{\text{partieller Ableitungs, Randterme sollen verschwinden!}} \cdot \vec{u}_{s\kappa} | 2 \rangle a_1^\dagger a_2$

=  $-\sum_{\substack{1,2 \\ n,s}} \langle 1 | W_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n) \vec{\nabla}_{\vec{R}_n} \cdot \vec{u}_{s\kappa} | 2 \rangle a_1^\dagger a_2$

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

$\nabla W_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{R}_n)}$ ,  $V_{\vec{k}}$ : Fourieramplituden

Hamiltonian =  $-\sum_{\substack{n,s \\ 1,2}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \langle 1 | e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{R}_n)} \vec{\nabla}_{\vec{R}_n} \cdot \vec{u}_{s\kappa} | 2 \rangle a_1^\dagger a_2$

$\vec{\nabla}_{\vec{R}_n} \cdot \vec{u}_{s\kappa} = \sum_{\vec{q}j} \left( \frac{\hbar}{2m_s N \omega_j(\vec{q})} \right)^{1/2} \left\{ A_s^\alpha(\vec{q}j) b_{\vec{q}j}^\dagger e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} [-i\vec{q}^\alpha] \right.$   
 $\left. + \text{l.a. (denn } \vec{q} \rightarrow -\vec{q}) \right\}$   
 $(\alpha: \text{kartesisch Koordinate})$

Hamiltonian =  $i \sum_{\substack{\kappa \vec{q} j s \\ 1,2, \alpha}} \left( \frac{\hbar}{2m_s N \omega_j(\vec{q})} \right)^{1/2} \cdot V_{\vec{k}} \left\{ \langle 1 | b_{\vec{q}j}^\dagger e^{i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{R}_n} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} A_s^\alpha \vec{q}^\alpha \right.$   
 $\left. - b_{\vec{q}j} e^{i(\vec{k}+\vec{q}) \cdot \vec{R}_n} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} A_s^\alpha \vec{q}^\alpha | 2 \rangle \right\}$   
 $a_1^\dagger a_2$



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

$$= \langle 1 | \left( b_{qj}^\dagger e^{-i\vec{b}\cdot\vec{r}} \underbrace{N \delta_{kq}}_{\text{Bloch funktion}} A_S^\alpha q^\alpha - b_{qj} e^{-i\vec{b}\cdot\vec{r}} N \delta_{q,-k} A_S^\alpha q^\alpha \right) | 2 \rangle$$

$$|1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\lambda_1/2}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_{\lambda_1/2}\cdot\vec{r}} \quad \text{Bloch funktion}$$

$$= \frac{N}{V} \int dV u_{\lambda_1}^*(\vec{r}) u_{\lambda_2}(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{b})\cdot\vec{r}} \left( b_{qj}^\dagger A_S^\alpha q^\alpha \delta_{kq} - b_{qj} A_S^\alpha q^\alpha \delta_{q,-k} \right)$$

$$\sum_u \int d\Omega_u$$

Summe über Zykeln der Zelle  $u$

$$\text{an } \sum_u e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{b})\cdot\vec{R}_u} \rightarrow N \delta_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, -\vec{b}}$$

Wieder und Ausföhr:

$$H_{\text{el-phon}} = \sum_{j,k,q} D_{q\lambda_j} \left( b_{-qj}^\dagger + b_{qj} \right) a_{j,k+q}^\dagger a_{j,k}$$

$$D_{q\lambda_j} = \sum_s \left( \frac{t}{2m_s v_j(q)} \right)^{1/2} \vec{A}_S \cdot \vec{q} v_j \quad \text{Matrix el. dr. Wk} \sim v_j$$

Hamiltonian der El-Phonon Wk mit 2 Prozessen:

Phonon emission ( $b^\dagger$ ) aufgrund des elektron. Übergangs  $k \rightarrow k+q$   
 Phonon absorption ( $b$ ) — — —