

6. Dynamische Effekte

6.1. Wechselwirkung zwischen Phononen und Elektronen

Bisher: 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

$$H_G(X) X_{\gamma\mu}(X) = E_{\gamma\mu}^G X_{\gamma\mu}(X)$$

↑ Anzahlnzahl der Ionen
 Anzahlzahl der Elektronen

$$H_G(X) = E_V^e(X) - E_V^e(X^0) + V_{ion}(X) - V_{ion}(X^0) + T_{ion}(X)$$

\downarrow G-G-Lage

$$= V(X, X^0) + T_{ion}(X)$$

Phononen

• quantisierte Gitterschwingungen

Elektronengleichung

$$H_E(x, X^0) \phi_V(x, X^0) = E_{V\mu}^E \phi_V(x, X^0)$$

$$H_E(x, X^0) = H_e(x) + H_{e-ion}(x, X^0) + \underbrace{V_{ion}(X^0)}_{\text{Konstante}}$$

$$\sum_k \sum_e^M V_{e-i}(r_k - R_e^0)$$

Kristallelektronen

• enthalten WW mit statischen Hintergrundpotenzial

Dynamisches Ionengitter

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

Auswertung

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

Ansatz: Taylorentwicklung um Ruhelage

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

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):

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

↑
Fermionische Erzeuger/Vernichter (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 Vernichter 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: $\hat{H}_{ph} = \sum_{q,j} \hbar \omega_j(q) (b_{q,j}^\dagger + b_{q,j})^2$

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 Umklapp-Prozesse)

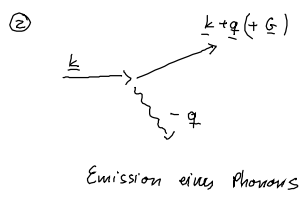
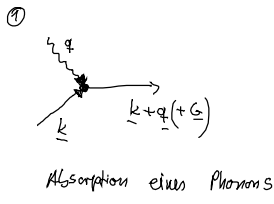
allgemein

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

Fröhlichs Modell

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

Blochfunktion



- Delta-Funktion entsteht 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 \hat{e} erlaubt nur WW mit longitudinalen Phononen

Festkörper Hamiltonian

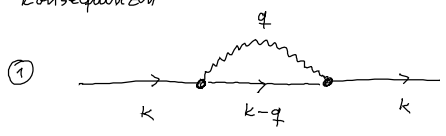
$$\hat{H} = \sum_{k, n, \sigma} \epsilon_n(k) a_{k, n, \sigma}^\dagger a_{k, n, \sigma} + \sum_{k, q, \sigma} M_{k, q, \sigma}^{j, n, n'} (b_{q, j}^\dagger + b_{-q, j}) a_{k+q, j, n, \sigma}^\dagger a_{k, j, n, \sigma} + \sum_{q, j} \hbar \omega_j(q) (b_{q, j}^\dagger b_{q, j} + \frac{1}{2})$$

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

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

Elektron-Elektron-WW

• mögliche Konsequenzen

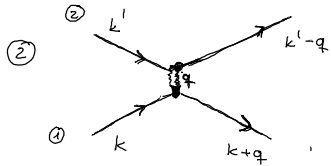


$\hat{=}$ **Polaron**

Elektron mit lokalisierten Gitterpotentials → 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

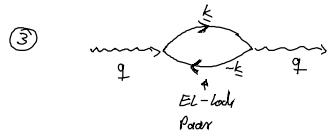
die lineare WW der verschiedenen → übrig bleiben neue Erzeuger und Vernichter c_p der neuen Quasiteilchen (z.B. Polaron) und ein Hamiltonoperator der nur noch auf ein Subsystem wirkt



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