

Interacción electrón-fonón

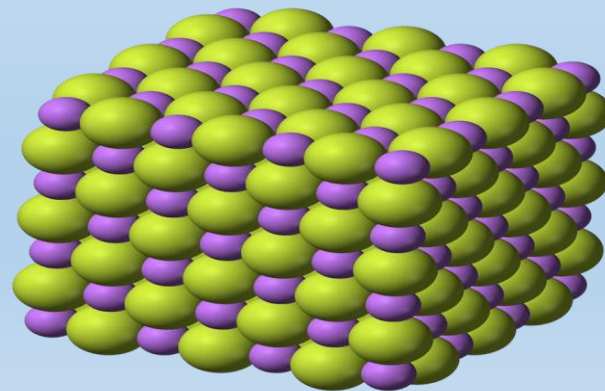
Fenómenos Colectivos en Sólidos

1er Cuatrimestre 2021

Prof: Dr. Pablo Tamborenea

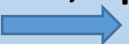

Alumna: Jesica Paola Peralta

Bibliografía utilizada: Solid State Theory: An Introduction, U. Rössler

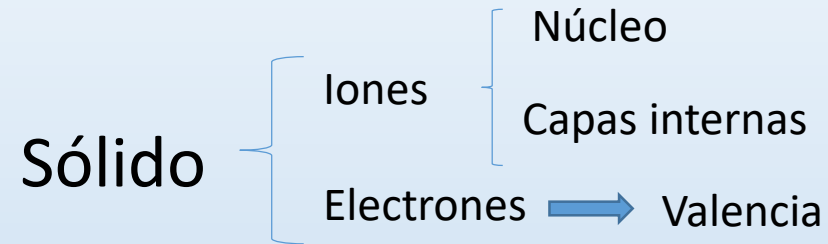


Abstract:

Los electrones experimentan el movimiento de la red como una perturbación del potencial periódico, que puede entenderse como un scattering entre *electrones* y *fonones*. Se consideran 4 escenarios:

1. Un electrón excitado se deshace de exceso de energía emitiendo fonones y al mismo tiempo cambia su impulso.
2. Un sistema de electrones en un sólido impulsado por un campo externo adopta un estado de desequilibrio. Cuando el campo es apagado, los electrones emiten fonones y el sistema se relaja en un estado de equilibrio.
3. La interacción electrón-fonón puede conducir a un nuevo estado fundamental del sistema. Debido a su carga, un electrón crea una nube de polarización en una red polar, que se mueve con el electrón y cambian sus propiedades dinámicas  *Polarón*
4. La interacción electrón-fonón, también, puede resultar como una interacción atractiva e-e, si el fonón emitido por un electrón es absorbido por otro dentro de su tiempo de vida  Intercambio virtual de fonones.

Preliminares:



Hamiltoniano del Sólido:

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{\text{ion}} + \mathcal{H}_{\text{el}} + \mathcal{H}_{\text{el-ion}}.$$

$$\mathcal{H}_{\text{ion}} = \sum_{i=1}^{N_I} \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_I} V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$$

donde

$$V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \frac{Q_i Q_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}.$$

$$\mathcal{H}_{\text{el}} = \sum_{l=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_l^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N_e} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k|}$$

$$\mathcal{H}_{\text{el-ion}} = \sum_{l=1}^{N_e} \sum_{i=1}^{N_I} v(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_i) \simeq \sum_{l=1}^{N_e} \sum_{i=1}^{N_I} \frac{Q_i e}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_i|}$$

Trabajamos con la forma general del termino de interacción ión-electrón:

$$\mathcal{H}_{\text{el-ion}} = \sum_{l=1}^{N_e} \sum_{n,\tau} v(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_{n\tau})$$

Vamos a tomar en cuenta el movimiento de la red con posiciones dependiente del tiempo:

$$\mathbf{R}_{n\tau}(t) = \mathbf{R}_{n\tau}^0 + \mathbf{u}_{n\tau}(t)$$

Y para esto expandimos las posiciones alrededor del equilibrio

$$\mathcal{H}_{\text{el-ion}} = \sum_{l,n,\tau} v(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_{n\tau}^0) - \sum_{l,n,\tau} \nabla_l v(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_{n\tau}^0) \Big|_{\mathbf{R}_{n\tau}^0} \cdot \mathbf{u}_{n\tau} + \dots \quad (8.3)$$

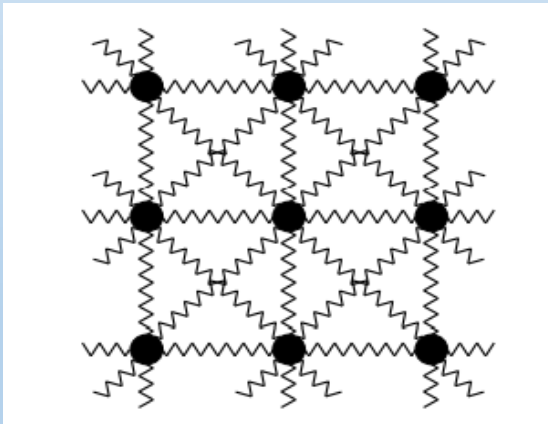
Potencial efectivo periódico de partícula única en el problema de estructura de banda.

Lineal en el desplazamiento $\mathbf{u}_{n\tau}$

La aproximación lineal es suficiente para desplazamientos menores al espaciamiento de la red.

Es importante para la ilustración y evaluación de la interacción hacer uso de la representación del número de ocupación y escribirla en término de los operadores creación y destrucción. Vamos a hacerlo!!

La dinámica de una red se puede describir empleando un modelo clásico con esferas masivas (que representan los átomos o iones) conectadas por resortes ,en un arreglo periódico.



El correspondiente Hamiltoniano es:

$$H = \mathcal{H}_{\text{ion}} + \mathcal{E}_{\text{el}} = \sum_{n\tau} \frac{P_{n\tau}^2}{2M_\tau} + \mathcal{U}(\{\mathbf{R}_{n\tau}\})$$

En un sólido cristalino, la configuración del ion es caracterizado por las posiciones actuales de los átomos:

$$R_{n\tau}(t) = R_{n\tau}^0 + u_{n\tau}(t),$$

Posiciones de equilibrio para puntos de una red con base.

Desplazamientos dependiente del tiempo, alrededor de $R_{n\tau}^0$

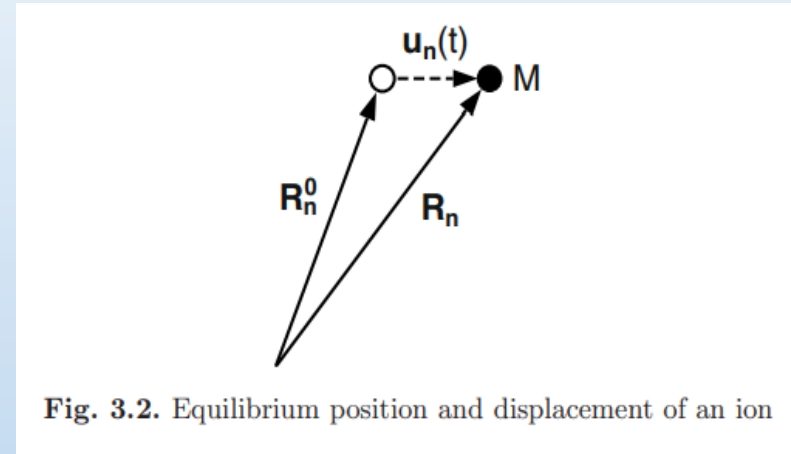


Fig. 3.2. Equilibrium position and displacement of an ion

Notación de índices:

$$u_{n\tau i} =: u \begin{pmatrix} n \\ \tau \\ i \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow \text{lattice cell} \\ \leftarrow \text{atom of basis} \\ \leftarrow \text{vector component} \end{array}$$

- Se resuelven las ecuaciones de movimiento de Newton

$$\omega^2 \bar{u}_{\tau i}(\mathbf{q}) = \sum_{\tau' j} D_{\tau i, \tau' j}(\mathbf{q}) \bar{u}_{\tau' j}(\mathbf{q}),$$

Matriz Dinámica

Las soluciones describen modos o excitaciones colectivas, para los cuales todos los iones de la red se mueven con la misma dependencia temporal pero con desplazamiento de fase entre sí de acuerdo con el teorema de Bloch

- Para el modo colectivo $s\mathbf{q}$, el movimiento del ion individual es descrito por el desplazamiento.

$$u_{n\tau}^s(\mathbf{q}, t) \sim \frac{1}{\sqrt{M_\tau}} e_\tau^s(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n^0 - \omega_s(\mathbf{q})t)}.$$

- El desplazamiento de un ion (o átomo) se puede expresar en términos del conjunto completo de autosoluciones de la ecuación anterior.

$$u_{n\tau i}(t) = \frac{1}{\sqrt{NM_\tau}} \sum_{sq} f_s(\mathbf{q}) e^{-i\omega_s(\mathbf{q})t} e_{\tau i}^s(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n^0}, \quad (3.23)$$

- La coordenada normal para el modo colectivo $s\mathbf{q}$ de la red, será definida como:

$$Q_s(\mathbf{q}, t) = f_s(\mathbf{q}) e^{-i\omega_s(\mathbf{q})t}.$$

- Expresando en función de los operadores de creación y aniquilación.

$$Q_s(\mathbf{q}) = \left(\frac{\hbar}{2\omega_s(\mathbf{q})} \right)^{1/2} (a_s^\dagger(-\mathbf{q}) + a_s(\mathbf{q}))$$

Ahora si!! El desplazamiento de la red puede ser formulado como:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_{n\tau} &= \frac{1}{\sqrt{NM_\tau}} \sum_{s,\mathbf{q}} Q_{s,\mathbf{q}} \mathbf{e}_\tau^s(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n^0} \\
 &= \sum_{s,\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_\tau\omega_s(\mathbf{q})}} \mathbf{e}_\tau^s(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n^0} (a_s^\dagger(-\mathbf{q}) + a_s(\mathbf{q})) \quad (8.4)
 \end{aligned}$$

Frecuencia de los fonones

Autovectores

Operadores de fonones

Para analizar el gradiente del potencial (en la ecuación 8.3), queremos simplificar la interacción electrón- fonón dentro de una única banda, para cual adoptamos la aproximación de masa efectiva.

Con ayuda de la TF del potencial, podemos escribir:

$$\sum_l \nabla_l v(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_{n\tau}) \Big|_{\mathbf{R}_{n\tau}^0} = i \sum_{\mathbf{q}',l} \mathbf{q}' v(\mathbf{q}') e^{i\mathbf{q}'\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_{n\tau}^0)} \quad (8.5)$$

and use

$$\sum_l e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_l} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (8.6)$$

Con operadores para electrones libres

- Haciendo uso de (8.4) junto con (8.5), podemos hacer la suma de la red en el segundo término de (8.3) con:

$$\sum_n e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_n^0} = N \sum_G \delta_{\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{G}}$$

Para recordar!!

La suma sobre los n puntos de la red puede ser realizada con:

Escribimos la interacción electrón-fonón en función de los operadores conveniente

$$\mathcal{H}_{\text{el-ph}} = \sum_{s,k,q,G} \mathcal{V}_s(\mathbf{q}-\mathbf{G}) (a_s^\dagger(-\mathbf{q}) + a_s(\mathbf{q})) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{G}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (8.8)$$

with the coupling matrix element

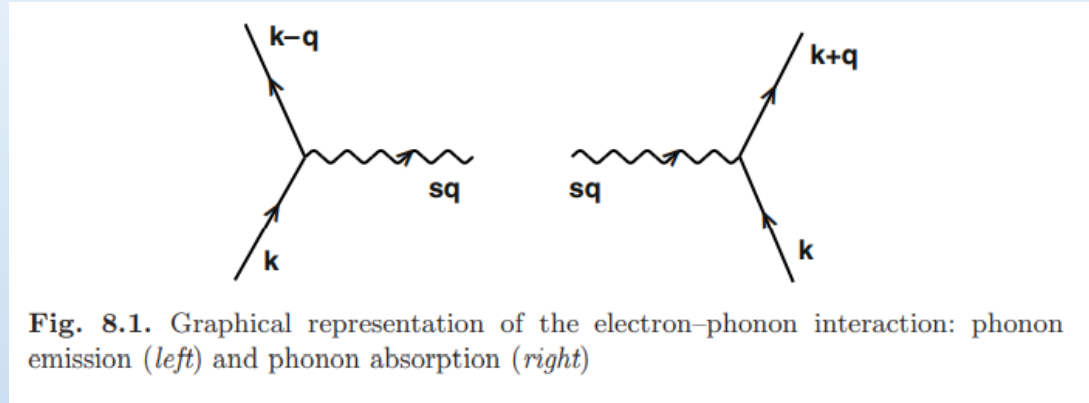
$$\mathcal{V}_s(\mathbf{q}-\mathbf{G}) = -i \sum_{\tau} \sqrt{\frac{N\hbar}{2M_{\tau}\omega_s(\mathbf{q})}} (\mathbf{q}-\mathbf{G}) \cdot \mathbf{e}_{\tau}^s(\mathbf{q}) e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{G})\cdot\boldsymbol{\tau}} v(\mathbf{q}-\mathbf{G}), \quad (8.9)$$

G: Vector de la red recíproca

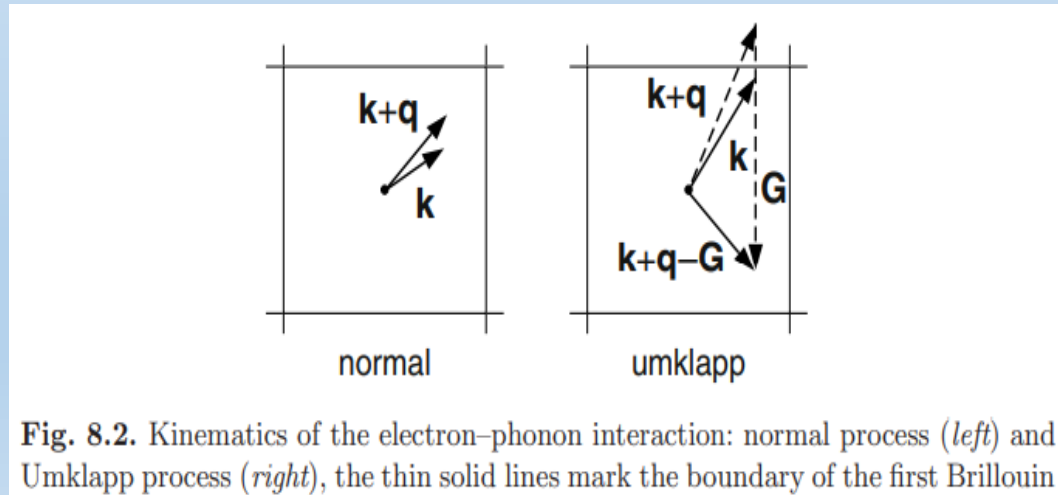
q y **q'** : vectores de la primera zona de Brillouin

Que dependen del mecanismo de acoplamiento

- La parte del operador de Hel-ph nos informa sobre la cinemática determinada por los vectores de onda



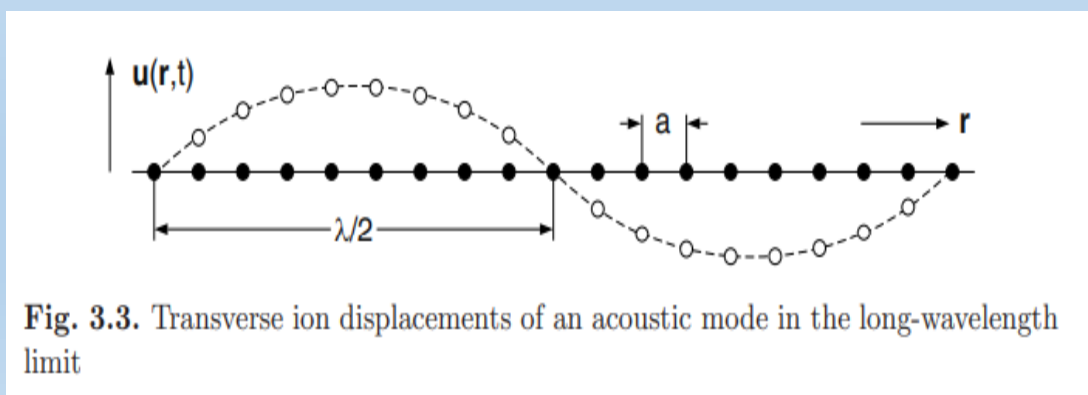
Se conserva el momento total



- Formalmente, el balance de energía de los procesos de scattering serán considerados tratando a la interacción e-f como una perturbación de pendiente del tiempo.

MECANISMOS DE ACOPLAMIENTO

FONONES ACÚSTICOS: (de longitudes de ondas largas) causan compresión o dilatación de la red local.



FONONES ÓPTICOS: Se identifican con vibraciones dipolares eléctricas

→ pueden ser excitados ópticamente por luz infrarroja

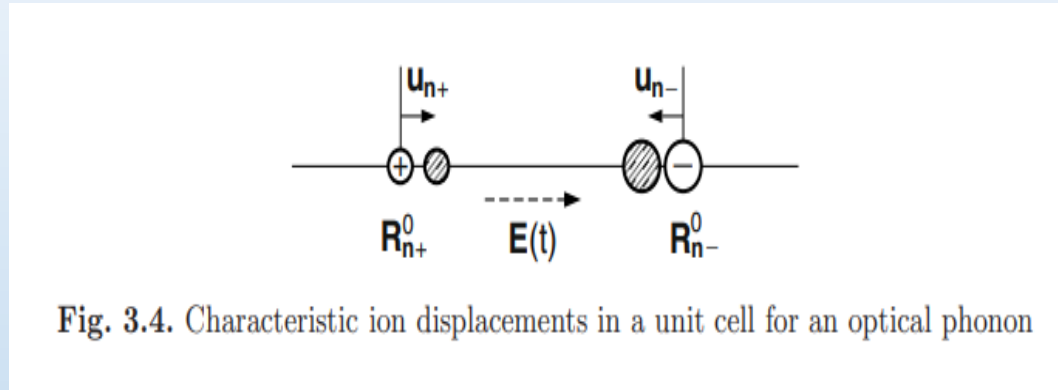


Fig. 3.4. Characteristic ion displacements in a unit cell for an optical phonon

Deformación del Potencial de acoplamiento(fonones acústicos):

La compresión o dilatación homogénea local causada por fonones acústicos en el límite de longitudes de onda larga, se puede describir como un relativo cambio local de volumen.

$$\Delta(r) = \frac{\Delta V}{V} \Big|_r$$

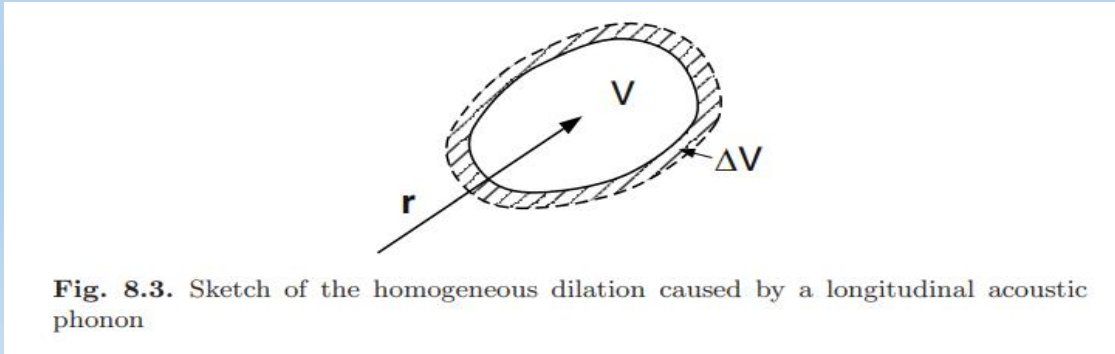


Fig. 8.3. Sketch of the homogeneous dilation caused by a longitudinal acoustic phonon

Si consideramos una banda simple no degenerada, el potencial de interacción e-f puede ser escrito como un potencial local visto por los electrones:

$$\mathcal{H}_{\text{el-ph}} = - \sum_l D \Delta(r_l), \quad (8.11)$$

D es el potencial de deformación

El cambio de volumen relativo causado por fonones («1»), se relaciona con el flujo del campo de desplazamiento de la red $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ a través del área que encierra el volumen V.

Por el teorema de Gaus tenemos:

$$\Delta V = \oint \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{u} dV \quad (8.12)$$

Que para una distorsión de red homogénea en el volumen V puede ser escrita como $V \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})$.

El campo de desplazamiento $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ es obtenido en el desplazamiento de longitudes de onda largas de la expresión para el desplazamiento $u_{n\tau}$, reemplazando:

$$R_n^0 \rightarrow \mathbf{r}$$

$$e_{\tau}^s(\mathbf{q}) \rightarrow e_{\tau}^{\text{LA}}(\mathbf{q}) \rightarrow \sqrt{M_{\tau}/M} \mathbf{q}/q \quad (\text{solo contribuyen los fonones ópticos})$$

Entonces, podemos escribir

$$\mathcal{H}_{\text{el-ph}} = -D \sum_l \nabla_l \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}_l) = -iD \sum_{l,q} \frac{Q_{\text{LA}q}}{\sqrt{NM}} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}}{q} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_l} \quad (8.13)$$

and obtain with

$$Q_{\text{LA}q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\text{LA}}(\mathbf{q})}} \left(a_{\text{LA}}^{\dagger}(-\mathbf{q}) + a_{\text{LA}}(\mathbf{q}) \right) \quad (8.14)$$

Y el Hamiltoniano para la *deformación del potencial de acoplamiento*

$$\mathcal{H}_{\text{el-ph}}^D = \sum_{k,q} \mathcal{V}_q \left(a_{\text{LA}}^{\dagger}(-\mathbf{q}) + a_{\text{LA}}(\mathbf{q}) \right) c_{k+q}^{\dagger} c_k. \quad (8.15)$$

The coupling matrix element reads

$$\mathcal{V}_q = -iD \sqrt{\frac{\hbar}{2NM c_{\text{LA}}}} q^{1/2} \quad (8.16)$$

• Acoplamiento polar con fonones ópticos o acoplamiento de Fröhlich

En el límite de longitudes de ondas largas, los fonones ópticos longitudinales causan un campo de polarización macroscópico

$$P(\mathbf{r}) = \frac{M(\mathbf{r})}{V} \quad \text{Campo dipolar eléctrico}$$

Una densidad de carga $\rho(\mathbf{r})$ colocada en este campo de polarización da lugar a la energía de interacción

$$E_{\text{int}} = - \int P(\mathbf{r}) \cdot E(\mathbf{r}) d^3r \quad (8.21)$$

with

$$E(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\infty}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r', \quad (8.22)$$

Constante dieléctrica del background

Por la integración por partes, podemos escribirlo como:

$$E_{\text{int}} = - \int d^3r (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot P(\mathbf{r})) \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\infty}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (8.23)$$

Con la distribución de carga dada por:

$$\rho(\mathbf{r}') = -\frac{e}{V} \sum_{l, q'} e^{iq' \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}_l)} = -\frac{e}{V} \sum_{q'} e^{iq' \cdot \mathbf{r}'} \sum_{k} c_{k-q'}^\dagger c_k. \quad (8.24)$$

El desplazamiento de los fonones ópticos longitudinales en el límite de longitudes de onda larga en forma de operador se lee como:

$$u_{n\tau}^{\text{LO}} = \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_\tau\omega_{\text{LO}}}} e_{\tau}^{\text{LO}}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n^0} \left(a_{\text{LO}}^\dagger(-\mathbf{q}) + a_{\text{LO}}(\mathbf{q}) \right). \quad (8.25)$$

Aquí asumimos un cristal con dos iones en la celda de Wigner-Seitz con masas M_1 y M_2 y $M = M_1$ y M_2 para el cual los autovectores de los fonones son:

$$e_1^{\text{LO}}(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{M_2}{M}} \frac{\mathbf{q}}{q}, \quad e_2^{\text{LO}}(\mathbf{q}) = -\sqrt{\frac{M_1}{M}} \frac{\mathbf{q}}{q}. \quad (8.26)$$

Los iones en movimiento, transportan la carga efectiva dinámica $\eta_1=\eta_2= \eta$, por lo que producen un momento dipolar macroscópico

$$M = \sum_{n,\tau} \eta_{\tau} u_{n,\tau} = \eta \sum_{n,q} \sqrt{\frac{\hbar}{2N\mu\omega_{LO}}} \frac{q}{q} e^{iq \cdot R_n^0} \left(a_{LO}^{\dagger}(-q) + a_{LO}(q) \right) \quad (8.27)$$

Donde μ es la masa reducida del ion .

El límite continuo de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ es obtenido reemplazando $R_n^0 \rightarrow \mathbf{r}$

Podemos escribir:

$$\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) = i\eta \frac{N}{V} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2N\mu\omega_{LO}}} \frac{q \cdot q}{q} e^{iq \cdot r} \left(a_{LO}^{\dagger}(-q) + a_{LO}(q) \right). \quad (8.28)$$

Finalmente, tomamos la carga efectiva dinámica :

$$\eta = \left(\frac{\mu V \epsilon_0}{N} (\epsilon(0) - \epsilon_{\infty}) \right)^{1/2} \omega_T$$

Y usamos la relación de Lyddane-Sachs-Teller

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon_{\infty}} = \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2}$$

Para reemplazar la frecuencia transversal del fonón óptico por una longitudinal:

$$\eta = \left(\frac{\mu V \epsilon_0}{N} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) \right)^{1/2} \epsilon_{\infty} \omega_{LO} \quad (8.30)$$

El hamiltoniano para el acoplamiento de Fröhlich toma la forma:

$$\mathcal{H}_{el-ph}^F = \sum_{k,q} \mathcal{V}_q (a_{LO}^\dagger(-q) + a_{LO}(q)) c_{k+q}^\dagger c_k \quad (8.31)$$

with the interaction matrix element

$$\mathcal{V}_q = i \left\{ \frac{e^2 \hbar \omega_{LO}}{2V \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) \right\}^{1/2} \frac{1}{q}. \quad (8.32)$$

La longitud de interacción es frecuentemente cuantificada por la constante de acoplamiento de Fröhlich

$$\alpha^F = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{2m^*\omega_{LO}}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right), \quad (8.33)$$

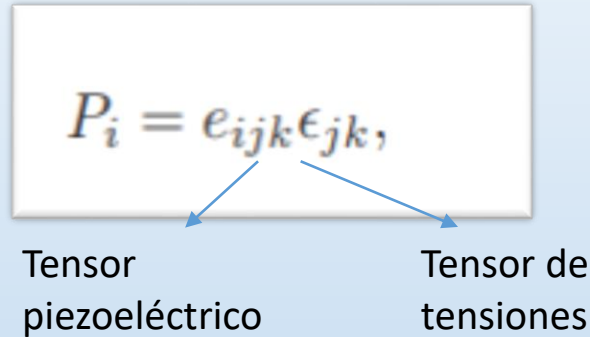
Análoga a la constante de estructura fina !!

Esto nos permite dividir dos regímenes:

- Régimen de Acoplamiento Débil ($\alpha^F < 1$) → se trata con teoría de perturbación
- Régimen de Acoplamiento Fuerte ($\alpha^F > 1$) → se desarrollan conceptos especiales

Acoplamiento Piezoeléctrico (Fonones acústicos) :

En cristales sin simetría de inversión, una presión homogénea causa una polarización dieléctrica \mathbf{P} , conocido como el *efecto piezoeléctrico*. Este es cuantificado por la relación :

$$P_i = e_{ijk} \epsilon_{jk},$$


Tensor piezoeléctrico Tensor de tensiones

El efecto piezoeléctrico, originalmente relacionado a tensiones estáticas, también se aplica al caso dinámico de campos de tensiones conectados con fonones acústicos y da lugar al *acoplamiento piezoeléctrico fonon-electrón*.

La energía de interacción será formulada con el campo de polarización $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ con el campo de tensiones:

$$\epsilon_{jk}(\mathbf{r}) = \frac{i}{2} (q_k u_j + q_j u_k) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

Conectado con el campo de desplazamiento $u(\mathbf{r}) = u \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$.

Para fonones acústicos, \mathbf{u} puede ser escrito como:

$$\mathbf{u} = \sqrt{\frac{N}{M}} \sum_s Q_{sq} \mathbf{e}^s(\mathbf{q}), \quad \text{with } \mathbf{e}^s(\mathbf{q}) = \sum_\tau \sqrt{\frac{M}{M_\tau}} \mathbf{e}_\tau^s(\mathbf{q}).$$

Tomando el campo de desplazamiento correspondiente $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, la interacción piezoeléctrica fonón-electrón puede derivarse en analogía al acoplamiento de Fröhlich. El resultado es:

$$\mathcal{H}_{\text{el-ph}}^{\text{P}} = \sum_{s, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \mathcal{V}_{sq} (a_s^\dagger(-\mathbf{q}) + a_s(\mathbf{q})) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (8.37)$$

with the coupling matrix element

$$\mathcal{V}_{sq} = -\frac{2ee_{14}}{\epsilon_0\epsilon_\infty} \sqrt{\frac{\hbar N}{2Mv_s}} \frac{1}{q^{1/2}} \left(\frac{q_x q_y e_z^s(\mathbf{q}) + c.p.}{q^2} \right), \quad (8.38)$$

where v_s is the sound velocity of the phonon branch s .

Gracias por la atención