

$e^-$  - Phonon WW

$e^-$  folgen den Ionen nicht vollständig - Oszillationen

Matrixelem. d.  $e^-$  Phon. Kopplung

Auswirkung auf Dispersionsrel. der Phononen  
Energie aufstellen

$H$  von (5.2) einsetzen

$H_{e-p}$  ist 3.T in (5.2)

2.T in (5.4) fällt weg

Im (5.2) WW-Term wird immer ein Phonon erzeugt od.

vernichtet  $\rightarrow$  Produkt mit Ausgangszustand ist orthogonal

Im 3.T (5.4) gibt es Terme wo Prod nicht verschwindet

weil  $H$  2x vorkommt!

$(\epsilon_0 - H_0)^{-1}$ : Inverses der Diff zw. Ausgangs & Zwischenzustand

Erklärung unter (5.5)

- Verwendung der Inversionssymmetrie der  $q$  Vektoren

Jetzt: Phononen - Energie bestimmen, wenn es

mit  $e^-$  WW!

In (5.8) nur 1 Phonon zulassen  $\frac{\partial \epsilon}{\partial \langle n=1 \rangle}$   
(5.7) einsetzen

Phononen-E ist kleiner als  $e^-$  Energie

$$E_e \approx k_B T_F$$

$$10\,000\text{ K}$$

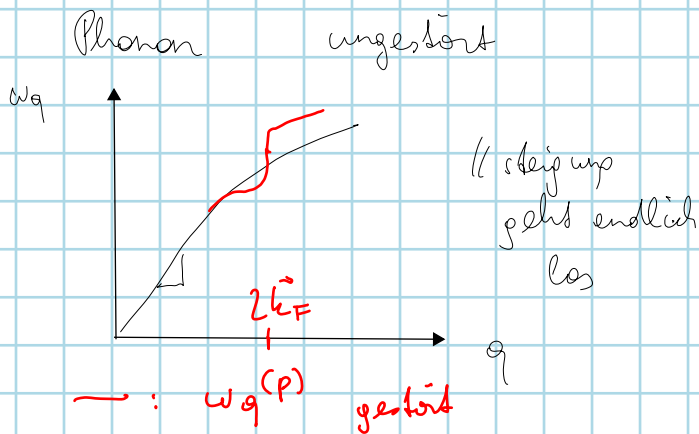
$$E_{ph} \approx k_B \Theta_D \quad \parallel \text{ Debye T}$$

$$100\text{ K}$$

|| jeweils Maximalwerte

Während gewisser Zeit verhält sich Phonon als  $e^-$  / Koh Paar

Term 2 in (5.9) — Unstetigkeit möglich wenn Energien gleich. Problematisch beim 1d-Fall



$$? \quad k' = k - q$$

Magnet hat anfangs  $\emptyset$  Steigung

$$(5.10) \quad \text{denn} \quad \langle n_{\vec{k}} \rangle \propto (\hbar^2 - 2\vec{q})^{-2}$$

Problem: Unendliche Werte

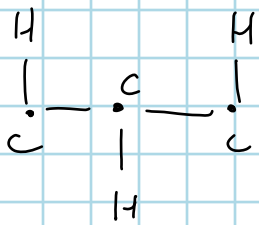
In  $\vec{k}'$  in (5.8) kommt  $\vec{q}$  vor

Singularität, wenn  $\vec{q} = 2\vec{k}_F$  ist!

$$E_{\vec{k}} = \hbar^2 (\vec{k} - \vec{q})^2$$

Man sieht daraus Asymptotiken

Lehrt über Fermikugel



C hat 4 Valenz  $e^-$

$\rightarrow 1 e^-$  frei

hypothetischer 1d Festkörper ist Metall

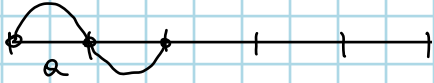


Abb 5.5  $\epsilon_F$  liegt innerhalb d Bandes bei  $\frac{\pi}{2a} = k_F$

Phonon mit  $q = 2k_F = \frac{\pi}{a}$

$q = \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow \underline{\underline{\lambda = 2a}}$  Kohn Anomalie

Dieses Phonon wird gestört!

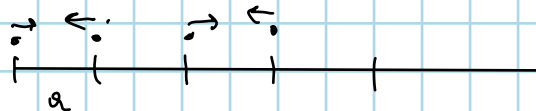
Integration ausführen von  $0 - \frac{\pi}{2a}$

$\rightarrow \ln \delta \quad \delta = \emptyset$  bei Störung

$\rightarrow$  sehr große Störung

gestörte Frequenz wird irgendwann  $= \emptyset \rightarrow$

statische Verzerrung



keine Schwingung mehr

Gitterparameter wird  $2a$

hypothetische Übergang von (a) nach (b)

(a): wenig Phonon WW  $\rightarrow$  (b): viel Ph. WW

3d: Jahn Teller Übergang

Verzerrung der Phononen hängt mit Änderung eines elektronischen Übergangs zusammen

Kommt bei  $d$ -Orbitalen vor

Elektronen sind da sehr gut lokalisiert

$s, p$ : Elektronendichte hängt nicht vom Ort ab!

Fernigas überall

Symbolische Schreibweise (5.12) & (5.13)

Es gibt immer eine radiale & Winkelabhängigkeiten

Diese Orbitale haben außerhalb des FK alle die selbe Energie; im FK gibt es den Kristallfeld-effekt ... nächste Nachbarn ändern die Energie

gewisse Orbitale sind sehr ungünstig (die die in  $z$ -Richtung zeigen (Richtung der Nachbarn))

2 diese Orbitale Energien werden angehoben ( $e^-$  will nicht rein)

3 andere zeigen nicht in Nachbarn-Richtung  $\rightarrow$  Energie abgesenkt  $\rightarrow$  günstiger f.  $e^-$

siehe Abb 5.7 (Ionenbindung)

Bei kovalenter Bindung sollen sich die Orbitale überlappen  $\rightarrow$  günstiger !!

Was passiert bei Verzerrung des Gitters

Abb 5.8 : Oktaeder, kein Tetraeder

z - Richtung : Absenkung

y - R. : Anhebung

Verzerrung kostet Energie Abb 5.9

el. Energie geht unter  $E_v$  : Verzerrungs-Energie  
(kostet Energie)

Gesamt E kann auch sinken (z.B. bei  $7 e^-$ )

Auffüllung nach Hund'scher Regel

Kann auch bei  $8 e^-$  passieren, jedoch nur wenn  
Energieabstand ausreicht um Spin umzuklappen

Es gibt auch magnetische Übergänge

Spin kann nie oben umklappen - Spins paaren  
sich und Magnetisierung wird  $= 0 \rightarrow$  Magn.

Übergang Temperatur niedrig, damit Phononen  
stärker als therm. Fluktuationen sind!