XI. Polaritonen

Wiederholung

Kopplung zu Photonen und Polarisation (z.B. Phon)

$$H_{0,pt} = \sum_k E_{pt,k} c_k^+ c_k \qquad H_{0,ph} = \sum_k E_{pol,k} b_k^+ b_k$$

mit der Kopplung

$$H_{kopp} = \sum_k E_{kopp,k} \left(c_k^+ b_k - c_k b_k^+ - c_k b_{-k} + c_{-k}^+ b_k^+ \right)$$

Ansatz für neue Quasiteilchen (Hopfield-Transformation)

$$\alpha_k = w\, c_k + x\, b_k + y\, c_k^+ + z\, b_{-k}^+$$

Wunsch

$$H = \sum_k \left[E_{k,1} \alpha_{1k}^+ \alpha_{1k} + E_k^{(2)} \alpha_{2k}^+ \alpha_{2k} \right]$$

daraus folgt die Bestimmungsgl.:

$$[\alpha_k, H] = E_k \alpha_k$$

in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} (E_{ph,k}-E_k) & -E_{kopp,k} & 0 & E_{kopp,k} \\ E_{kopp,k} & (E_{ph,k}-E_k) & E_{kopp,k} & 0 \\ 0 & E_{kopp,k} & (-E_{ph,k}-E_k) & E_{kopp,k} \\ E_{kopp,k} & 0 & -E_{kopp,k} & (-E_{ph,k}-E_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

Bestimmungsgl. der Dispersion:

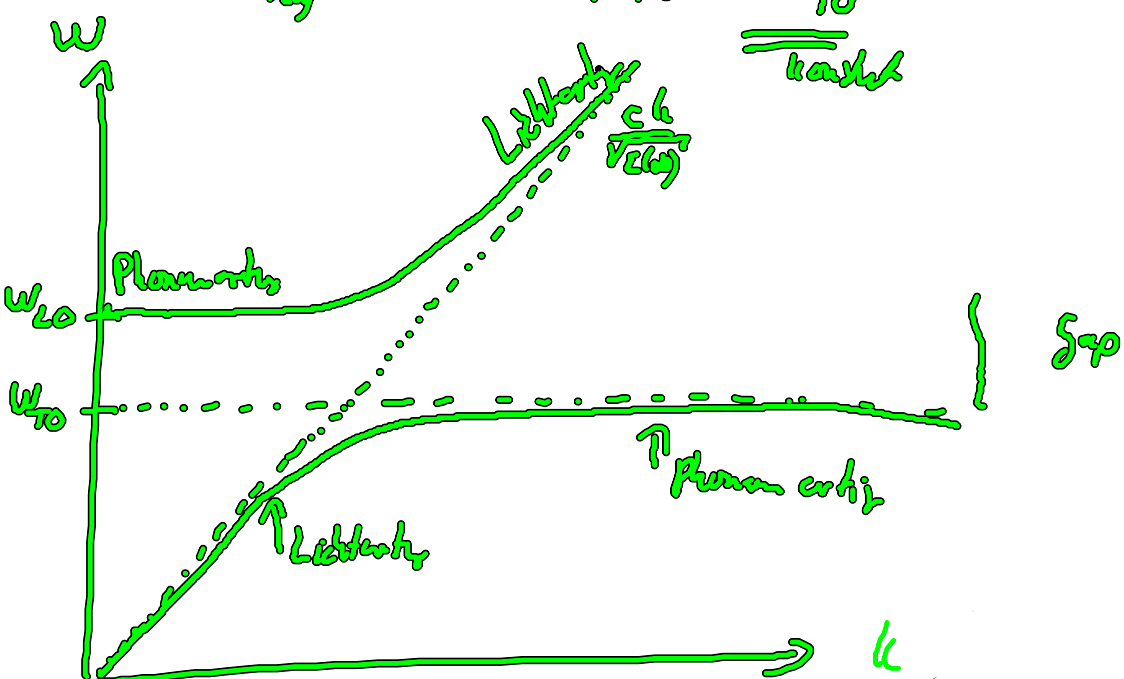
$$\left\| (E_k)^4 - (E_k)^2 \left(E_{pt,k}^2 + E_{ph,k}^2\right) + E_{pt,k}^2 E_{ph,k}^2 + 4\, E_{pt,k}\, E_{ph,k}\, E_{kopp,k}^2 = 0 \right\|$$

Fortsetzung:

Für unser Beispiel

Photon: $E_{pt,k} = \hbar \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon}}$

TO-Phonon: $E_{ph,k} = \hbar \omega_{TO}$ = konstant



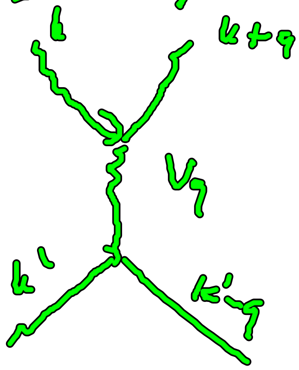
1) Die Wechselwirkung zwischen Phonon und Photon führt zur Ausbildung neuer Bosonischer Teilchen, den Polaritonen.
z.B. Photon-TO Polariton

2) Es bilden sich zwei Äste aus, der erste Ast ist: zunächst photonartig und dann phononartig.
der zweite Ast:
Erst phononartig und dann photonartig.

XII. Supraleitung und Polaronen

XII.1 Polaron: effektive Elektron-Elektron Wechselwirkung

Erinnerung an Coulomb-Wechselwirkung



$$a^+_k a^+_{k'} a_{k'-q} a_{k+q}$$

Herleitung:

$$H = H_0 + e \int \psi^+(r)\,\varphi(r)\,\psi(r)\, d^3r$$

elektrostatisches Potential

Poissongl.

$$\Delta \varphi(r) = -\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0} = e\,\frac{\psi^+(r)\psi(r)}{\varepsilon_0}$$

$$\Rightarrow \quad \varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r' \, \frac{\psi^+(r')\psi(r')}{|r-r'|}$$

$$\Rightarrow H = H_0 + \int d^3r \int d^3r' \, \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \, \frac{\psi^+(r)\psi^+(r')\psi(r')\psi(r)}{|r-r'|}$$

Erg.: Das elektrostatische Potential vermittelt die Coulomb WW.

Man kann so ein Elektron erzeugen Störung/Verzerrung im Potential $\varphi(x)$, das dann wieder Elektron beeinflusst.
(Bemerkung: Man kann $\varphi(x)$ auch mit longitudinalen Photonen quantisieren (meist unüblich!)
Dann wird Coulomb-WW durch Emission und Reabsorbtion eines longitudinalen Photons erzeugt)

<u>Idee</u>: Analog zu Elektron-Phonon Wechselwirkung eine Elektron-Elektron Wechselwirkung konstruieren.

<u>Also</u>: Elektron verzerrt Kristallgitter, anderes Elektron wird durch Verzerrung beeinflusst.
Oder anders: Elektron emittiert Phonon und anderes Elektron absorbiert Phonon.

<u>Ausgerechnet</u>: Ham. Op der Fröhlich Wechselwirkung

$$H = \hbar \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q + \sum_{qk} D_q a_{k+q}^\dagger a_k (b_q + b_{-q}^\dagger)$$

Wir betrachten jetzt die zeitliche Entwicklung der Phononoperatoren (mit Heisenbergbewegungsgl.) (keine Badannahme)

$$\partial_t b_{-q}^\dagger = \frac{i}{\hbar}[H, b_{-q}^\dagger]_- = \frac{i}{\hbar}\sum_{q'} \hbar\omega_{q'} \underbrace{[b_{q'}^\dagger b_{q'}, b_{-q}^\dagger]_-}_{=b_{q'}^\dagger b_{q'} b_{-q}^\dagger - b_{-q}^\dagger b_{q'}^\dagger b_{q'} = \delta_{q',-q} b_{-q}^\dagger} + \frac{i}{\hbar}\sum_{q'k} D_{q'} a_{k+q'}^\dagger a_k \underbrace{[b_{q'}, b_{-q}^\dagger]_-}_{\delta_{q',-q}} + \frac{i}{\hbar}\sum_{q'k} D_{q'} a_{k+q'}^\dagger a_k \underbrace{[b_{-q'}^\dagger, b_{-q}^\dagger]_-}_{0}$$

$$\partial_t b_{-q}^\dagger = i\omega_q b_{-q}^\dagger + \frac{i}{\hbar}\sum_k D_{-q} a_{k-q}^\dagger a_k$$

Phononerzeugung wird durch elektronischen Dichteoperator angetrieben.

Genauso erhalten wir

$$\partial_t b_q = -i\omega_q b_q - \frac{i}{\hbar}\sum_k D_q a_{k+q}^\dagger a_k$$

Interpretation der Gleichung!

$$\rho(x) = e\,\psi^\dagger(x)\psi(x) = -\frac{e}{V}\sum_{k_1 k_2} e^{-i(k_1-k_2)\cdot x}\, a^\dagger_{k_1} a_{k_2}$$

relativ + Schwerpunktskoordinaten

$$q = k_1 - k_2 \quad \text{und} \quad k = \frac{k_1+k_2}{2}$$

$$\rho(x) = -\frac{e}{V}\sum_q \underbrace{e^{-iq\cdot x}} \sum_k a^\dagger_{k+\frac{q}{2}}\, a_{k-\frac{q}{2}}$$

folgt für $q=0$ homogene Elektronenverteilung

für $q \neq 0$ inhomogene Elektronenverteilung.

Ergo: Phononen werden durch räumliche Verzerrung der Elektronenverteilung erzeugt.

Wir integrieren jetzt die Phonon-Operator Bewegungsgleichungen formal:

$$b^\dagger_{-q}(t) = i\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_q(t-t')} D_{-q} \sum_k a^\dagger_{k-q}(t')\, a_k(t')\, dt' + b^\dagger_q(t=-\infty)$$

$$b_q(t) = -i\int_{-\infty}^{t} \underbrace{e^{-i\omega_q(t-t')}} D_{-q} \sum_k a^\dagger_{k-q}(t')\, a_k(t')\, dt' + \underbrace{b_q(t=-\infty)}$$

Annahme: Die freie Propagation dominiert. D_q schwach

vernachlässigen ⇑ Beiträge Streuprozesse

Problem: unterschiedliche Zeitargumente für $a^\dagger, a$ (entspricht Retardierung)

Die elektronischen Operatoren können dargestellt werden als:

z. B. $a^+_{k-q}(t') = e^{i\varepsilon_{k-q}t'} \underbrace{\tilde{a}^+_{k-q}(t')}_{\text{langsam}}$

<u>Also</u>:

$$b^+_{-q}(t) = i\sum_k \underbrace{\int^t}_{-\infty} D_{-q}\, e^{i\omega_q(t-t')}\, e^{i(\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k)t'}\, \tilde{a}^+_{k-q}(t')\, \tilde{a}(t')$$

Integrationsvariable ändern $t' = t-s$

$$= \sum_k i\int_0^\infty ds\, e^{i\omega_q s}\, e^{-i(\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k)s}\, D_q\, \underbrace{e^{i\varepsilon_{k-q}t - i\varepsilon_k t}\, \tilde{a}^+_{k-q}(t-s)\, \tilde{a}_k(t-s)}_{a^+_{k-q}(t)\, a_k(t)}$$

$$= i\sum_k a^+_{k-q}(t)\, a_k(t)\, D_q \underbrace{\int_0^\infty e^{i\omega_q s}\, e^{-i(\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k)s}}_{-\frac{1}{i\omega_q - i(\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k)-\eta}} \underbrace{e^{-\eta s}}_{\substack{\text{Konvergenz erzeugender} \\ \text{Faktor } \eta\to 0}}$$

$$b^+_{-q}(t) = -i\sum_k D_{-q}\frac{a^+_{k-q}(t)\, a_k(t)}{i(\omega_q + \varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}) - \eta}$$

Analog

$$b_q(t) = i\sum_k D_{-q}\frac{a^+_{k-q}(t)\, a_k(t)}{i(\omega_q - \varepsilon_k + \varepsilon_{k-q}) + \eta}$$

Wir können jetzt die Phononoperatoren in der Elektron-Phonon WW ersetzen.

$$H_{el-ph} = \sum_{kq} D_q\, a^+_{k+q}\, a_k \left(b_q + b^+_{-q}\right)$$

$$= \sum_{kq} D_q\, a^+_{k+q}\, a_k b_q + \sum_{kq} D_q\, b^+_{-q}\, a^+_{k+q}\, a_k$$

$$\underset{\text{einsetzen}}{=} -i \sum_{q k \tilde{k}} |D_q|^2 \, a^\dagger_{k+q} a_k \, a^\dagger_{\tilde{k}-q} a_{\tilde{k}}$$

$$\left(\underbrace{\frac{1}{i(\omega_q + \varepsilon_{\tilde{k}} - \varepsilon_{\tilde{k}-q}) - \eta} + \frac{1}{i(\omega_q - \varepsilon_{\tilde{k}} + \varepsilon_{\tilde{k}-q}) + \eta}}_{\frac{(\omega_q + \varepsilon_{\tilde{k}} - \varepsilon_{\tilde{k}-q} + \omega_q - \varepsilon_{\tilde{k}} + \varepsilon_{\tilde{k}-q})}{i(\omega_q^2 - (\varepsilon_{\tilde{k}} - \varepsilon_{\tilde{k}-q})^2)}} \right)_{\eta \to 0}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{2\omega_q}{i(\omega_q^2 - (\varepsilon_{\tilde{k}} - \varepsilon_{\tilde{k}-q})^2)}$$

$$= - \sum_{q k \tilde{k}} \frac{|D_q|^2 \, 2\omega_q}{(\omega_q^2 - (\varepsilon_q - \varepsilon_{k+q})^2)} \, a^\dagger_{k+q} \underbrace{a_k \, a^\dagger_{\tilde{k}-q}}_{\delta_{k, \tilde{k}-q}} a_{\tilde{k}}$$

In Normalform bringen:

$$= \sum_k \left(\sum_q \frac{|D_q|^2 \, 2\omega_q}{((\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})^2 - \omega_q^2)} \right) a^\dagger_k a_k \qquad (i)$$

$$+ \sum_{q k \tilde{k}} \frac{|D_q|^2 \, 2\omega_q}{(\varepsilon_q - \varepsilon_{k+q})^2 - \omega_q^2} \, a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde{k}-q} a_{\tilde{k}} a_k \quad (ii)$$

<u>Diskussion</u>: (i) Der erste Term führt zu einer Renormierung der Energie, da er die Form $\sum_k \delta\varepsilon_k \, a^\dagger_k a_k$ hat.

Im Prinzip sind das die Auswirkung der Formierung von einem Quasi-Teilchen aus Elektron und Phonon $\to$ Polaron.

So gibt es eine Energieabsenkung bei Γ für das Feld

$(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})^2 < \omega_q^2$!

Renormierung erfolgt durch Emission von Phononen durch das Elektron und Absorption durch das gleiche Elektron. (Phononwolke) (Selbstenergie)

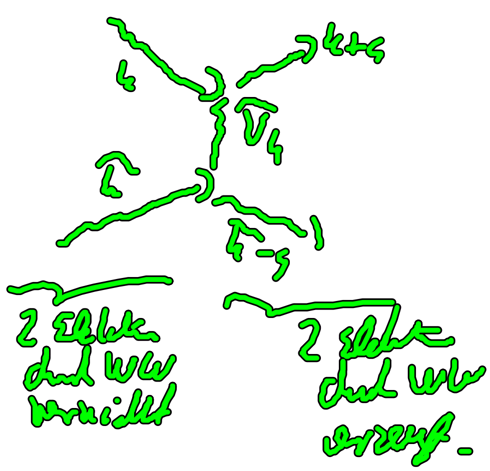
Nur wichtig für kleine k wegen $(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})$, da Phononen langsam sind.

(ii) Der zweite Term hat die Form

$$\tilde{V}_{q k \tilde{k}} \; a^\dagger_{k+q} \, a^\dagger_{\tilde{k}-q} \, a_{\tilde{k}} \, a_k$$

gleiche Form wie Coulomb WW.

Wir haben unser Ziel erreicht: wir haben eine effektive Elektron-Elektron WW

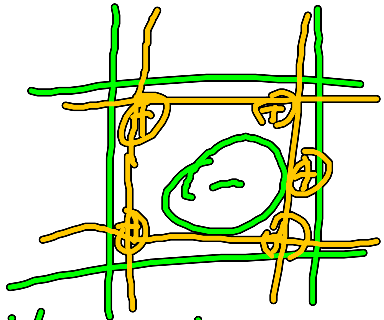


Dabei ist das Potential:

$$\frac{|D_q|^2 \, 2\omega_q}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})^2 - \omega_q^2}$$

Falls $(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})^2 < \omega_q^2$
$\Rightarrow$ effektive Elektronenanziehung

Verzerrung im Kristallgitter durch Elektron umgibt das Elektron mit positiver Wolke.



Ursprung dieser Wechselwirkung wird durch die Verwendung von anderen Isotopen für den Festkörper nachgewiesen.
(Elektron-Phonon Kopplung hängt von Ionenmasse ab, Phonon auch)

<u>Bemerkung</u>: Phononen werden bei den Proben komplett entfernt.