XI. Polaritonen

Wiederholung

Kopplung zu Photon und Polarisation (z.B. Phonon)

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

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:

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

Bestimmungsgl. der Dispersion:

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

<u>Fortsetzung:</u>

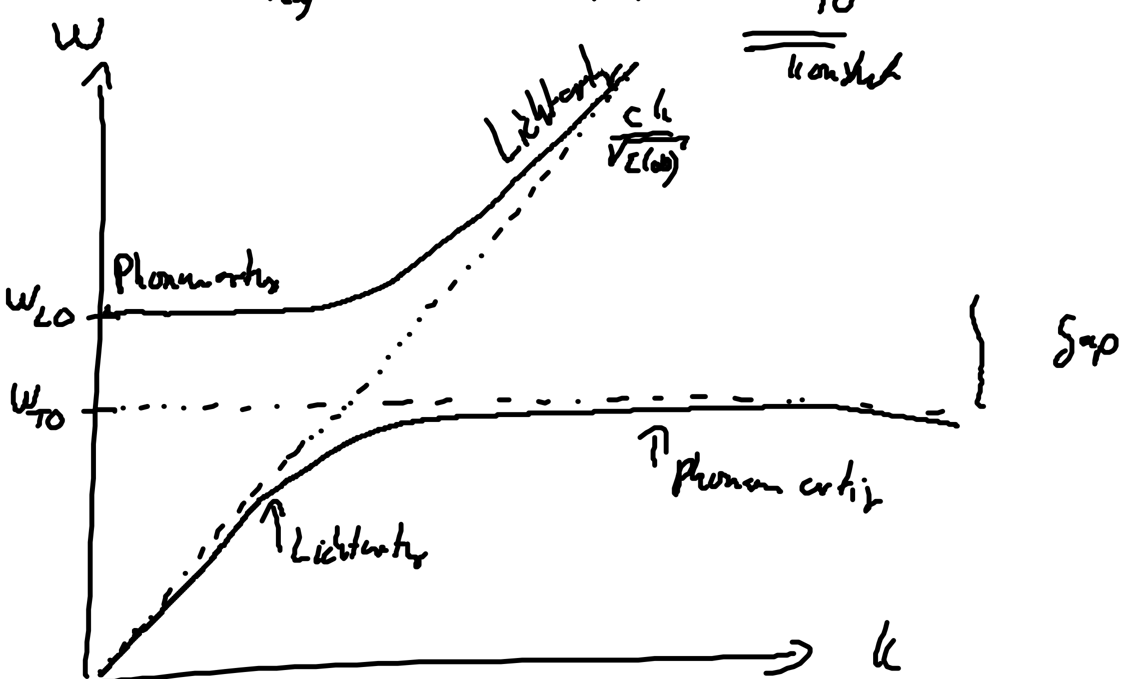
Für unser Beispiel

<u>Photon</u>

$E_{pt,k} = \hbar \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon(\omega)}}$

<u>TO-Phonon</u>

$E_{ph,k} = \underbrace{\hbar\omega_{TO}}_{\text{konstant}}$



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

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

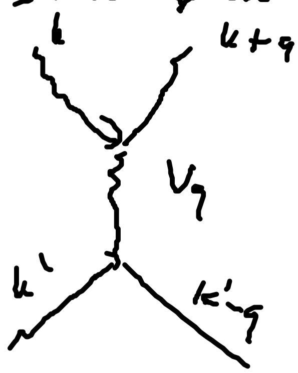
der zweite Ast!

Erst phononartig und dann photonartig.

XII. Supraleitung und Polaron

XII.1 Polaron: effektive Elektron-Elektron Wechselwirkung

Erinnerung an Coulomb-Wechselwirkung



$$a^\dagger_k a^\dagger_{k'} a_{k'-q} a_{k+q}$$

Herleitung:

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

elektrostatisches Potential

Poissongl.

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

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

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

Erg.: Das elektrostatische Potential vermittelt die Coulomb WW.

Man kann sagen 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>Ausgangspunkt</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 berechnen jetzt die zeitliche Entwicklung der Phononoperatoren (mit Heisenberg-Bewegungsgl.) (kein Badannahme)

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

$$= b_{\bar q}^\dagger b_{\bar q} b_q^\dagger - b_q^\dagger b_{\bar q}^\dagger b_{\bar q} = \delta_{q\bar q} b_q^\dagger$$

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

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:

$$\rho(\mathbf{r}) = e\,\psi^+(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}) = -\frac{e}{V}\sum_{k_1 k_2} e^{-i(k_1-k_2)\cdot\mathbf{r}}\, a^+_{k_1} a_{k_2}$$

relativ + Schwerpunktskoordinaten

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

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

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 Bewegungsgleichung formal:

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

$$b_q(t) = -i\int_{-\infty}^{t} \underbrace{e^{-i\omega_q(t-t')}}_{\substack{\text{Annahme:}\\ \text{Die freie Propagation}\\ \text{dominiert. } D_{-q} \text{ schwach}}} D_{-q}\sum_k a^+_{k-q}(t')\,a_k(t')\,dt' + \underbrace{b_q(t=-\infty)}_{\substack{\text{vernachlässigen}\\ \Uparrow\\ \text{Bringt}\\ \text{Streuprozesse}}}$$

Problem: unterschiedliche Zeitargumente für a^+, a (entspreche Markov näherung)

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>:

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

Integrationsvariable ändern $t' = t - s$

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

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

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

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.

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

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

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

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

$$\Downarrow$$

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

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

In Normal bringen:

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

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

<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 zw. Elektron und Phonon $\to$ Polaron.

So gibt es eine Energieabsenkung bei Γ für die Fall

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

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

Nur wichtig für kleine $\underline{k}$ 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

2 Elektronen durch WW vernichtet

2 Elektronen durch WW erzeugt

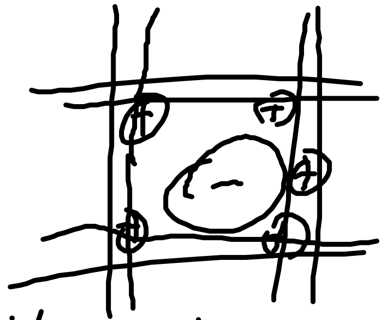
Dabei ist das Potential:

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

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

$\Rightarrow$ effektive Elektronenanziehung

Verzerrung in Kristalldichte durch Elektronen 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)

Bemerkung: Phononen werden bei dem Prozess komplett entfernt.