

11. Übungsblatt zur Theoretischen Physik II

Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Abgabe: Montag, 29. Januar 2007 bis 13:00 Uhr in den Briefkasten im Physik-Altbau.

Aufgabe 29 (5 Punkte): *gestörter Harmonischer Oszillator*

Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator H_0 , der durch ein kubisches Potential V gestört wird:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2, \quad V = \epsilon \hbar \omega \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{3/2} q^3$$

Berechnen Sie unter Verwendung von Leiteroperatoren ($b = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}p$) die störungstheoretischen Energiekorrekturen erster und zweiter Ordnung sowie die Zustandskorrektur erster Ordnung. Geben Sie schliesslich speziell die Korrekturen für den Grundzustand an.

Aufgabe 30 (15+10 Punkte): *Elektron-Phonon-Wechselwirkung*

In der Vorlesung wurde die Kopplung von Elektronen und Phononen betrachtet. Der entsprechende Hamiltonoperator lässt sich schreiben als:

$$H = \sum_i \hbar \nu_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j} \hbar \Omega_{i,j}(t) a_i^\dagger a_j + \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha + \sum_{i,\alpha} \hbar g_\alpha^{ii} a_i^\dagger a_i (b_\alpha^\dagger + b_\alpha)$$

Dabei ist a_i der Heisenbergoperator eines Elektronen im Zustand i und b_α der Heisenbergoperator einer Phononmode α . Es sollen hier nur zwei elektronische Zustände mit Energien $\hbar\nu_1$ und $\hbar\nu_2$ (mit $\nu_2 > \nu_1$) betrachtet werden (und nur ein Elektron). Die Rabi-Frequenz $\Omega_{i,j}(t)$ vermittelt die Ankopplung der Elektronen an das Lichtfeld (mit $\Omega_{i,i} = 0$ und $\Omega_{i,j} = \Omega_{j,i}$). Die phononische Energiedispersion ω_α und das (als diagonal angenommene) Elektron-Phonon-Kopplungselement g_α^{ii} werden unten näher spezifiziert.

- Verwenden Sie die Heisenbergsche Bewegungsgleichung $i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H]_- \rangle$, um die Zeitableitung der mikroskopischen Polarisation $p = \langle a_1^\dagger a_2 \rangle$ und der Besetzungsdichte $f = \langle a_2^\dagger a_2 \rangle = 1 - \langle a_1^\dagger a_1 \rangle$ zu bestimmen. Mit der Abkürzung $\tilde{g}_\alpha = (g_\alpha^{22} - g_\alpha^{11})$ erhält man:

$$i \frac{d}{dt} p = (\nu_2 - \nu_1) p + \Omega_{21} (1 - 2f) + \sum_\alpha \tilde{g}_\alpha (\langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha \rangle + \langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha^\dagger \rangle)$$

$$i \frac{d}{dt} f = \Omega_{21} (\langle a_1^\dagger a_2 \rangle^* - \langle a_1^\dagger a_2 \rangle)$$

Vergleichen Sie mit der Differentialgleichung aus Aufgabe 19.

- Stellen Sie für die neu auftretenden sogenannten Phonon-assistierten Übergangselemente $S_\alpha = \langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha \rangle$ und $T_\alpha = \langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha^\dagger \rangle$ ebenfalls Bewegungsgleichungen auf. Man erhält:

$$i \frac{d}{dt} S_\alpha = (\nu_2 - \nu_1 + \omega_\alpha) S_\alpha + \tilde{g}_\alpha p n_\alpha \quad (1)$$

$$i \frac{d}{dt} T_\alpha = (\nu_2 - \nu_1 - \omega_\alpha) T_\alpha + \tilde{g}_\alpha p (n_\alpha + 1).$$

Um diese Gleichungen zu erreichen werden verschiedene Näherungen durchgeführt:

- Vernachlässigung von dichteartigen Phonon-assistierten Erwartungswerten ($\langle a_i^\dagger a_i b_\alpha \rangle = \langle a_i^\dagger a_i b_\alpha^\dagger \rangle = 0$)
- Annahme eines thermischen Gleichgewichts für die Phononen (Badannahme): Dann sind $\langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger \rangle = \langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha b_\beta \rangle = 0$ und $\langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha^\dagger b_\beta \rangle = \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \delta_{\alpha,\beta} n_\alpha$. Die Modenbesetzung n_α ist durch die Bose-Einstein Verteilung $n_\alpha = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_\alpha/(k_B T)) - 1}$ gegeben.
- Annahme eines einzelnen Elektrons, dadurch ist $\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_i' a_j' \rangle = 0$.

3. Betrachten Sie nun als konkretes System einen Quantenpunkt (3-100nm durchmessendes Klümpchen eines Halbleitermaterials), der an die longitudinalen akustischen Phononen des ihn umgebenden Substrats ankoppelt. Dadurch ergibt sich ein Quasi-Kontinuum von Phononen-Moden $\alpha = \vec{q}$ mit $\omega_{\vec{q}} = c_{LA}|\vec{q}|$, wobei c_{LA} die Schallgeschwindigkeit ist. Die Kopplung von Elektronen und Phononen erfolgt über Deformation via $g_q^{ii} = \sqrt{\frac{q}{2\hbar\rho c_{LA}V}} \left(D_i e^{-q^2 a_i^2/4} \right)$ mit dem Volumen V , der Dichte ρ , dem Deformationspotential D_i und dem Confinementparameter a_i . Konkrete Parameter für ein Beispielsystem (InGaAs Quantenpunkte) sind unten angegeben. Es sei $p(-\infty) = f(-\infty) = 0$.
- (a) Auf der Webseite ist ein Java-Applet verfügbar, um die gekoppelten Differentialgleichungen zu lösen (Bedienung analog zum alten Applet, dazugekommen sind Einstellungsmöglichkeiten für Temperatur und Modendiskretisierung). Plotten und beschreiben Sie jeweils:
- den Verlauf der Polarisation für niedrige (50K) und hohe (300K) Temperatur bei relativ schwacher Anregung (Pulsfläche $\leq 0.5\pi$).
 - den Verlauf der Polarisation für wenige ($=10$) im Vergleich mit vielen (≥ 100) Moden, bei 50K und relativ schwacher Anregung (Pulsfläche $\leq 0.5\pi$).
 - den Verlauf der Dichte $f = \rho_{22}$ bei starker Anregung (Pulsfläche $=3\pi$) und hoher Temperatur (300K) für Pulse der Länge 0.5ps, 4ps und 8ps. Handelt es sich bei der Dämpfung um Energierelaxation oder um Pure Dephasing?
- (b) Für lineare Anregung (Pulsfläche $\ll 1 \Rightarrow \frac{d}{dt}f = 0$) können die Bewegungsgleichungen explizit Fourier-transformiert werden. Bestimmen Sie erst $S_q(\omega)$ und $T_q(\omega)$ und setzen Sie diese in die $p(\omega)$ Gleichung ein. Zeigen Sie:

$$p(\omega) = \frac{\Omega(\omega)}{\nu_2 - \nu_1 + \sum_{\vec{q}} \tilde{g}_q^2 \left(\frac{n_q}{\nu_2 - \nu_1 + \omega_q - \omega} + \frac{n_q + 1}{\nu_2 - \nu_1 - \omega_q - \omega} \right) - \omega}$$

Hinweis: Verwenden sie die Relation $FT\left\{\frac{d}{dt}f(t)\right\} = i\omega f(\omega)$, wobei $f(\omega) = FT\{f(t)\}$.

4. Bonusaufgabe (10P): (a) Plotten Sie die Funktion $\alpha(\omega) = C \operatorname{Im} \frac{p(\omega)}{\Omega(\omega)}$ mit $p(\omega)$ aus 3b für die unten angegebenen Parameter. Dazu sollte eine Dämpfung eingeführt werden (durch Ersetzung $\nu_2 - \nu_1 \rightarrow \nu_2 - \nu_1 + i\gamma$, mit $\gamma = 1/1ps$). Beachten Sie, dass die \vec{q} -Summe dreidimensional ist und daher möglichst erst in ein Integral in Kugelkoordinaten umgewandelt wird. (b) Fouriertransformieren Sie $p(t)$ aus 3a(i) numerisch (jedoch mit γ) und vergleichen Sie mit 4(a).

Parameter:

$$\begin{aligned} c_{LA} &= 5110m/s = 5110 \cdot 10^{-6}nm/fs \\ D_1 &= -4.8eV \\ D_2 &= -14.6eV \\ a_1 &= 3.19nm \\ a_2 &= 5.8nm \\ \rho &= 5.370g/cm^3 = 5.37/(1.602 \cdot 10^{-7}) eV fs^2/nm^5 \\ q_{max} &= 2/nm \\ \hbar &= 0.65288eVfs \\ k_B &= 8.617385 \cdot 10^{-5} eV/K \end{aligned}$$