Fortsetzung: Elektron-Phonon-Wechselwirkung

6.1.2. Polaron Transformation

Ansatz: eine Elektronen-Mode , kein Spin, kein Bandindex
eine Phononen-Mode

(I) $H = \varepsilon a^+ a + g(b + b^+) a^+ a + \Omega b^+ b$

$\varepsilon a^+ a$: reine wechselwirkungsfreie El.-Anteil

$g(b+b^+)a^+a$: Fröhlich-Modell der El.-Phon.-Kopplung

$\Omega b^+ b$: Phononen Anteil ohne WW

(z.B. Quantenpunkt gekoppelt an Molekülschwingung)

Mathematische Methode: Kanonische Transformation des Hamiltonians

Neuer Ham. Op: $H' = \underbrace{e^{-iS}}_{U} H \underbrace{e^{iS}}_{U^+}$

„Polaron Transformation"

mit $U = e^{A(\alpha b - \alpha^* b^+)}$ wobei A nur auf Fermionen System wirkt, $\alpha \in \mathbb{C}$

falls lineare Kopplung an das bosonische System besteht.

im Fall des Hamilton aus (I): $\boxed{U = e^{-\frac{g}{\Omega} a^+ a (b - b^+)}}$

-> ergibt neue Basis

$U b U^+ = b - \frac{g}{\Omega} a^+ a$ "nur verschobener Op."

$U b^+ U^+ = b^+ - \frac{g}{\Omega} a^+ a$

$U a U^+ = a e^{\frac{g}{\Omega}(b - b^+)} = d$

$U a^+ U^+ = a^+ e^{-g/\Omega (b - b^+)} = d^+$

neue fermionische Operatoren
"dressed electron"
Mini-Polaron

und Hamiltonian

$$\boxed{H' = U H U^+ = \underbrace{\left(\varepsilon - \frac{g^2}{\Omega}\right)}_{\hat{=}\text{ größere eff. Masse}} \underbrace{d^+ d}_{a^+ a} + \Omega b^+ b}$$

reiner 1-Teilchen Hamiltonian
WW mit Phononen spiegelt sich in verschobener (Re-normierter Energie wieder)

Nebenrechnung: $e^{-iS} H e^{iS} \approx H + i[H, S] - \frac{1}{2}[[H, S], S] + \mathcal{O}(S^3)$

$\left[e^{-iS} \approx 1 - iS - \frac{1}{2} S^2 \ldots\right]$

6.1.3. Attraktive Wechselwirkung zwischen Elektronen

$$H = \underbrace{\sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \sum_q \hbar\omega(q)\,(b_q^+ b_q + \tfrac{1}{2})}_{H_0} + \underbrace{\sum_{kq} M_{kq}\,(b_q + b_{-q}^+)\,a_{k+q}^+ a_k}_{H_1}$$

Idee: Analog zu 6.1.2. entkoppeln der Phononen von den Elektronen
Problem: nicht gleichzeitig für alle Elektronen möglich
aber: störungstheoretisch bis auf kleine Fehler möglich

Suche S so dass $H' = e^{-iS} H e^{iS}$ keine WW mit Phononen enthält.

Wähle $\boxed{[S, H_0] = -H_1}$ ⊛

$$\rightarrow H' = e^{-iS}(H_0 + H_1)e^{iS} = H_0 + \underbrace{\frac{1}{2}[S, H_1]}_{\sigma(H_1^2)} + \sigma(H_1^3)$$

S selbst nicht bekannt aber Spektraldarstellung kann aus ⊛ berechnet werden

$$⊛\ \langle n|S|m\rangle = \frac{\langle n|H_1|m\rangle}{E_n - E_m}$$

$|m\rangle$ Eigenzustand von H_0 (Zustände der Phononen + Elektronen ohne WW)

$E_n|n\rangle = H_0|n\rangle$
$E_m|m\rangle = H_0|m\rangle$

"Einsen einschieben" $\sum_l |l\rangle\langle l| = 1$

$$H' = H_0 + \frac{1}{2} S H_1 - \frac{1}{2} H_1 S$$

$$\overset{⊛}{=} H_0 - \frac{1}{2}\sum_{lmn} \langle l|H_1|m\rangle\langle m|H_1|n\rangle \left[\frac{1}{E_m - E_n} - \frac{1}{E_l - E_m}\right] |l\rangle\langle n|$$

Wechselwirkung von 2 Elektronen und einem Phonon
mit Impuls + Energieerhaltung

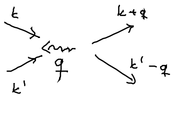
Abs. $E_m - E_n = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q$

Em. $E_l - E_m = \varepsilon_{k'-q} - \varepsilon_{k'} + \hbar\omega_q$

$|n\rangle = |k, k'\rangle \otimes |n_q\rangle$

$|m\rangle = |k+q, k'\rangle \otimes |n_q - 1\rangle$

$|l\rangle = |k+q, k'-q\rangle \otimes |n_q\rangle$



①

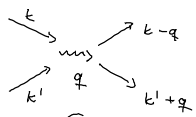
Emi. $E_m - E_n = \hbar\omega_q + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k$

Abs. $E_l - E_m = \varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'} - \hbar\omega_q$

$|n\rangle = |k, k'\rangle \otimes |n_q\rangle$

$|m\rangle = |k-q, k'\rangle \otimes |n_q + 1\rangle$

$|l\rangle = |k-q, k'+q\rangle \otimes |n_q\rangle$



②

Boson-Op.

$$\left[\; b^+|\dots n_q \dots\rangle = \sqrt{n_q+1}\,|\dots n_q+1 \dots\rangle \qquad b\,|\dots n_q \dots\rangle = \sqrt{n_q}\,|\dots n_q-1 \dots\rangle \;\right]$$

Besetzungszahl

$$H_1' = -\frac{1}{2}\sum_{kk'q} M_{q,k} M_{-q,k'} \Big[\overset{①}{\Big(} n_q \Big(\frac{1}{\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k-\hbar\omega_q} - \frac{1}{\varepsilon_{k'-q}-\varepsilon_{k'}+\hbar\omega_q} \Big)\Big) a^+_{k+q} a_k a^+_{k'-q} a_{k'} \; +$$

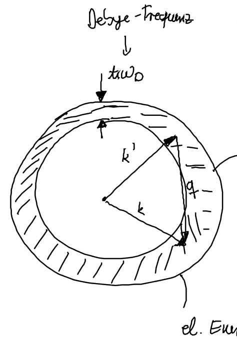
$$\overset{②}{(n_q+1)} \Big(\frac{1}{\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k+\hbar\omega_q} - \frac{1}{\varepsilon_{k'+q}-\varepsilon_{k'}-\hbar\omega_q} \Big) a^+_{k-q} a_k \, a^+_{k'+q} a_{k'} \Big]$$

Umbenennung in ②: $k' \leftrightarrow k$
$q \to -q$

mit $M(q) = M(-q)$
$\omega_{-q} = \omega_q$
$n_q = n_{-q}$

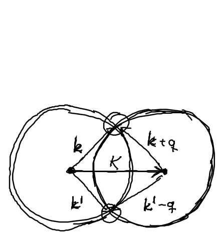
$$\boxed{H' = H_0' + \sum_{k'kq} |M_{q,k}|^2 \frac{\hbar\omega_q}{(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)^2 - \hbar^2\omega_q^2} a^+_{k+q} a_k a^+_{k'-q} a_{k'}}$$

- Effektiver 2 Teilchen Operator
- WW ist positiv falls $|\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k| < \hbar\omega_q$, d.h. für Elektronen nahe der Fermikante



• Wichtig: Abstoßende WW der Elektronen untereinander gibt es zusätzlich und kann den Effekt aufheben.

Anwendung: Erklärung der Supraleitung



Gesamtimpuls $\boxed{K = k + k'}$

$|\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k| < \hbar\omega_D$

$|\varepsilon_{k'-q} - \varepsilon_{k'}| < \hbar\omega_D$

→ Wechselwirkungsbereich sehr klein
wird maximal für $K=0$
(beide Energieschalen gleich)

→ $\boxed{K=0}$
$k' = -k$

BCS Hamiltonian

$$H = \sum_k \sum_\sigma \varepsilon_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} - V \sum_{kk'}{}' a^+_{k'\uparrow} a^+_{-k'\downarrow} a_{-k\downarrow} a_{+k\uparrow}$$

(Bardeen, Cooper, Schrieffer)

2 Teilchen Hamiltonian

- kann wieder (ähnlich wie Hartree-Fock Faktorisierung) in eff. Einteilchen Hamiltonian überführt werden

Faktorisierung: $AB = \langle A\rangle B + \langle B\rangle A - \langle A\rangle\langle B\rangle + \cancel{(A-\langle A\rangle)(B-\langle B\rangle)}$

vernachlässigt in mean-field-Näherung

↓

$$H_{eff} = \sum_k \sum_\sigma \varepsilon_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} - \Delta^+ \sum_k a_{-k\downarrow} a_{+k\uparrow} - \Delta \sum_k a^+_{+k\uparrow} a^+_{-k\downarrow} + \frac{|\Delta|^2}{2}$$

wobei $\Delta = V \sum_k \langle a_{-k\downarrow} a_{+k\uparrow} \rangle$

noch keine "normale" Form eines 1T-Hamiltonians

→ nochmal Koordinatentransformation nötig (Bogoljubov Trafo)

$$H_{eff} = \sum_k \sqrt{\varepsilon_k + |\Delta|^2} \left(\alpha^+_k \alpha_k + \beta^+_k \beta_k \right) + \sum_k \left(\varepsilon_k - \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta|^2} \right) + \frac{|\Delta|^2}{V}$$