Prof. Dr. Andreas Knorr
Dr. Carsten Weber
Dipl. Phys. Alexander Carmele / Dr. Frank Milde
Dipl. Phys. Ken Lichtner

9. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 14.01.2011 12:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 21 (10 Punkte): *Elektron-Phonon-Wechselwirkung*

Die Kopplung von Elektronen und Phononen sowie die Ankopplung der Elektronen an ein externes Lichtfeld werden durch den folgenden Hamiltonoperator beschrieben:

$$H = \sum_i \hbar\omega_i a_i^\dagger a_i + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha + \hbar\sum_\alpha (g_\alpha^{22} - g_\alpha^{11}) a_2^\dagger a_2 (b_\alpha^\dagger + b_\alpha) - \hbar\sum_{i,j} \Omega_{ij}(t) a_i^\dagger a_j. \tag{1}$$

Dabei ist $a_i^{(\dagger)}$ der Heisenbergoperator eines Elektrons im Zustand $|i\rangle$ und $b_\alpha^{(\dagger)}$ der Heisenbergoperator einer Phononmode α. Die phononische Energiedispersion ω_α und das (als diagonal angenommene) Elektron-Phonon-Kopplungselement g_α^{ii} werden in Aufgabe 22 näher spezifiziert. Die Rabifrequenz $\Omega_{ij}(t)$ vermittelt die Ankopplung der Elektronen an das Lichtfeld (mit $\Omega_{ii} = 0$ und $\Omega_{ij} = \Omega_{ji}$). Es sollen hier nur zwei elektronische Zustände mit Energien ω_1 und ω_2 ($\omega_2 > \omega_1$) betrachtet werden (und entsprechend nur ein Elektron), was im Elektron-Phonon-Wechselwirkungsterm oben schon berücksichtigt wurde.

(a) Verwenden Sie die Heisenbergsche bzw. Ehrenfestsche Bewegungsgleichung, 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 den Abkürzungen $\tilde{g}_\alpha = (g_\alpha^{22} - g_\alpha^{11})$ und $\Omega = \Omega_{12} = \Omega_{21}$ erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}p &= -i(\omega_2 - \omega_1)p + i\Omega(1-2f) - i\sum_\alpha \tilde{g}_\alpha \left(\langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha\rangle + \langle a_1^\dagger a_2 b_\alpha^\dagger\rangle\right), \\
\frac{d}{dt}f &= -i\Omega\left(\langle a_1^\dagger a_2\rangle - \langle a_1^\dagger a_2\rangle^*\right) = 2\Omega\,\mathrm{Im}\,(p)\,.
\end{aligned}$$

(b) 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

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}S_\alpha &= -i(\omega_2 - \omega_1 + \omega_\alpha)S_\alpha - i\tilde{g}_\alpha p\,(n_\alpha + 1), \\
\frac{d}{dt}T_\alpha &= -i(\omega_2 - \omega_1 - \omega_\alpha)T_\alpha - i\tilde{g}_\alpha p\, n_\alpha.
\end{aligned}$$

Um diese Gleichungen zu erhalten, 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 $\langle a_i^\dagger a_j b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger\rangle = \langle a_i^\dagger a_j b_\alpha b_\beta\rangle = 0$ und $\langle a_i^\dagger a_j b_\alpha^\dagger b_\beta\rangle = \langle a_i^\dagger a_j\rangle \delta_{\alpha\beta} n_\alpha$. Die Modenbesetzung $n_\alpha = \langle b_\alpha^\dagger b_\alpha\rangle$ ist durch die Bose-Einstein Verteilung $n_\alpha = [\exp(\hbar\omega_\alpha/(k_B T)) - 1]^{-1}$ gegeben.

Bitte Rückseite beachten! ⟶

Aufgabe 22 (10 Punkte): *Absorption eines Quantenpunktes*
Betrachten Sie nun als konkretes System einen Quantenpunkt (3-100 nm durchmessendes Klümpchen eines Halbleitermaterials), der an die longitudinalen akustischen Phononen des ihn umgebenden Substrats ankoppelt. Dadurch ergibt sich ein Quasikontinuum von Phononenmoden $\alpha = \mathbf{q}$ mit $\omega_{\mathbf{q}} = c_{LA}|\mathbf{q}|$ (Debye-Modell), wobei c_{LA} die Schallgeschwindigkeit ist. Die Kopplung von Elektronen und Phononen erfolgt über Deformation via $g_q^{ii} = \sqrt{\frac{q}{2\hbar\rho c_{LA} V}}\left(D_i e^{-q^2 l_i^2/4}\right)$ (sphärisch-harmonisches Quantenpunktmodell der Ausdehnung l_i) mit dem Volumen V, der Dichte ρ und dem Deformationspotential D_i. Konkrete Parameter für ein Beispielsystem (InGaAs Quantenpunkt) sind unten angegeben. Es sei $p(-\infty) = f(-\infty) = 0$.

(a) Für lineare Anregung (Pulsfläche $\Theta = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \Omega(t) \ll 1 \Rightarrow \frac{d}{dt} f = 0$) können die Bewegungsgleichungen aus Aufgabe 21(a,b) 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:

$$p(\omega) = \frac{\Omega(\omega)}{\omega_2 - \omega_1 - \omega - \sum_{\mathbf{q}} \tilde{g}_q^2 \left(\frac{n_q+1}{\omega_2-\omega_1+\omega_q-\omega} + \frac{n_q}{\omega_2-\omega_1-\omega_q-\omega}\right)}.$$

Verwenden Sie die Fouriertrafo-Konvention $G(\omega) = \int dt\, e^{+i\omega t} g(t)$.

(b) Plotten Sie die Absorption $\alpha(\omega) \sim \mathrm{Im}\frac{p(\omega)}{\Omega(\omega)}$ mit $p(\omega)$ aus Teil (a) mit einem Programm Ihrer Wahl (Mathematica, Matlab, etc) für die unten angegeben Parameter. Dazu sollte eine Dämpfung eingeführt werden [durch Ersetzung $\omega_2 - \omega_1 \to \omega_2 - \omega_1 - i\gamma$, mit $\gamma = 1/(5\,\mathrm{ps})$]. Beachten Sie, dass die $\mathbf{q}$-Summe dreidimensional ist und daher möglichst erst in ein Integral in Kugelkoordinaten umgewandelt wird. Transformieren Sie den Frequenzbereich $\omega \to \bar{\omega}$ dermaßen, dass $\bar{\omega} = 0$ gerade der Übergangsfrequenz $\omega = \omega_2 - \omega_1$ entspricht (rotating frame). Betrachten Sie die Temperaturen $T = 4$ K, 77 K, 150 K.

(c) Die analytische Lösung des Independent Boson Modells, welches den Hamilton-Operator Gl. (1) ohne Lichtfeldkopplung exakt löst, wurde in der VL hergeleitet und ergibt folgende Zeitentwicklung:

$$p(t) \sim \exp\left[\sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{g}_q^2}{\omega_q^2}\{(n_q+1)(e^{-i\omega_q t} - 1) + n_q(e^{i\omega_q t} - 1) + i\omega_q t\}\right]\theta(t).$$

Fourier-transformieren Sie $p(t)$ numerisch und plotten Sie $\alpha(\omega) \sim \mathrm{Re}\, p(\omega)$. Führen Sie dazu wie oben eine Dämpfung ein (entspricht hier einem zusätzlichen Faktor $e^{-\gamma t}$). Die Transformation des Frequenzbereichs wurde in dieser Formel schon vorgenommen. Vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus Teil (b) für die drei Temperaturen. Was sind die physikalischen Gründe für die Unterschiede?

Parameter:
$c_{LA} = 5.110$ m/s $= 5,11 \cdot 10^{-3}$ nm/fs
$D_1 = -4,8$ eV
$D_2 = -14,6$ eV
$l_1 = 3,19$ nm
$l_2 = 5,8$ nm
$\rho = 5,37$ g/cm^3 $= 5,37/(1,602 \cdot 10^{-7})$ eV fs^2/nm^5
$q_{max} = 2$ /nm
$\hbar = 0,658$ eV fs
$k_B = 8,617 \cdot 10^{-5}$ eV/K