

Fortsetzung: Elektron-Phonon-Wechselwirkung

6.1.2. Polaron Transformation

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

$$(I) \quad H = \epsilon a^\dagger a + g (b + b^\dagger) a^\dagger a + \Omega b^\dagger b$$

↑
reine
wechselwirkungsfreie
el.-Anteil

↑
Fröhlich-Modell
der el.-Phonon-
Kopplung

↑
Phononen Anteil
ohne WW

(z.B. Quantenpunkt gekoppelt an
Mottwellschwingung)

Mathematische Methode: Kanonische Transformation des Hamiltonians

$$\text{Wenn Ham. Op: } H' = \underbrace{e^{-iS}}_U H \underbrace{e^{iS}}_{U^\dagger}$$

„Polaron Transformation“

$$\text{mit } U = e^{A(\alpha b - \alpha^* b^\dagger)}$$

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):

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

→ ergibt neue Basis

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

„nur verschieber Op.“

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

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

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

↗ neue fermionische Operatoren
„dressed electron“
Mini-Polaron

und Hamiltonian

$$H' = U H U^\dagger = \left(\epsilon - \frac{g^2}{\Omega} \right) d^\dagger d + \Omega b^\dagger b$$

≙ größere off. Masse



↑

reiner 1-Teilchen Hamiltonian

WW mit Phononen spiegelt sich in verschobener
(re-normierter Energie wieder)

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

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

6.1.3. Attraktive Wechselwirkung zwischen Elektronen

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

Idee: Analogie zu 6.1.2. entkoppeln der Phononen vom dem 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 $[S, H_0] = -H_1$ \otimes

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

S selbst nicht bekannt aber Spektralzerlegung kann aus \otimes berechnet werden

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

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

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

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

"Einsatz einzeichnen" $\sum_l |l\rangle \langle l| = \mathbb{1}$

$$H' = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{l,n} \downarrow \downarrow \downarrow S H_1 - \frac{1}{2} \sum_{l,n} \downarrow \downarrow \downarrow H_1 S$$

$$\otimes \Rightarrow H' = H_0 - \frac{1}{2} \sum_{l,m,n} \langle l | H_1 | m \rangle \langle m | H_1 | n \rangle \left[\frac{1}{E_m - E_n} - \frac{1}{E_l - E_m} \right] |l\rangle \langle n|$$

Wechselwirkung von 2 Elektronen und einem Phonon mit Impuls + Energieerhaltung

\otimes Abs. $E_m - E_n = \epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar \omega_q$

\otimes Em $E_m - E_n = \hbar \omega_q + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k$

\otimes Em $E_l - E_m = \epsilon_{k'-q} - \epsilon_{k'} + \hbar \omega_q$

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

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

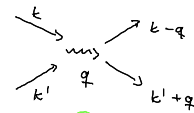
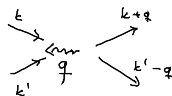
$|n\rangle = |k, k'\rangle \otimes |n_q\rangle$

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

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

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

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



Boson-Op.

$$b^\dagger | \dots n_q \dots \rangle = \sqrt{n_q + 1} | \dots n_q + 1 \dots \rangle$$

$$b | \dots n_q \dots \rangle = \sqrt{n_q} | \dots n_q - 1 \dots \rangle$$

↑
Besetzungszahl

$$H_1' = -\frac{1}{2} \sum_{k, k', q} M_{q,k} M_{-q,k'} \left[\overset{\textcircled{1}}{n_q} \left(\frac{1}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_q} - \frac{1}{\epsilon_{k'-q} - \epsilon_{k'} + \hbar\omega_q} \right) a_{k+q}^\dagger a_k a_{k'-q}^\dagger a_{k'} + \right.$$

$$\left. \overset{\textcircled{2}}{(n_q + 1)} \left(\frac{1}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q} - \frac{1}{\epsilon_{k'+q} - \epsilon_{k'} - \hbar\omega_q} \right) a_{k-q}^\dagger a_k a_{k'+q}^\dagger a_{k'} \right]$$

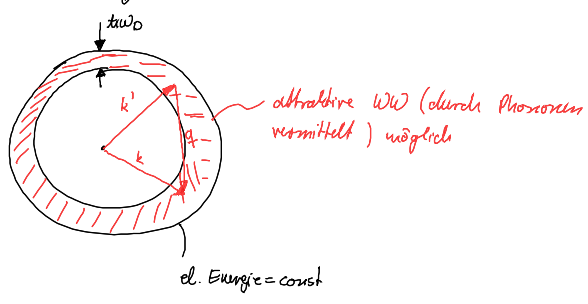
Umbenennung in $\textcircled{2}$: $k' \leftrightarrow k$
 $q \rightarrow -q$

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

$$H_1' = H_0' + \sum_{k, k', q} |M_{q,k}|^2 \frac{\hbar\omega_q}{(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2 - \hbar^2\omega_q^2} a_{k+q}^\dagger a_k a_{k'-q}^\dagger a_{k'}$$

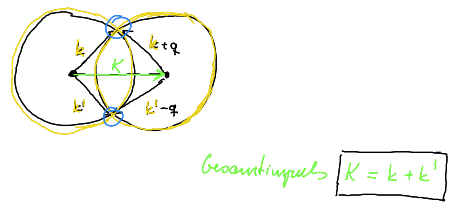
- Effektiver 2-Teilchen Operator
- WW ist positiv falls $|\epsilon_{k+q} - \epsilon_k| < \hbar\omega_q$, d.h.

Debye-Frequenz für Elektronen nahe der Fermikante



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

Anwendung: Erklärung der Supraleitung



$$|\epsilon_{k+q} - \epsilon_k| < \hbar\omega_D$$

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

→ Wechselwirkungsbereich sehr klein

wird maximal für $k=0$
(beide Energieskalen gleich)

$$\rightarrow \boxed{k=0}$$

$$k'=k$$

BCS Hamiltonian

$$H = \sum_k \sum_{\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} - V \sum_{kk'} a_{k'\uparrow}^{\dagger} a_{-k'\downarrow}^{\dagger} a_{-k\downarrow} a_{+k\uparrow}$$

(Bardeen, Cooper, Schrieffer)

z-Teilchen Hamiltonian

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

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

vernachlässigt in mean-field-Näherung

↓

$$H_{\text{eff}} = \sum_k \sum_{\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} - \Delta^{\dagger} \sum_k a_{-k\downarrow} a_{+k\uparrow} - \Delta \sum_k a_{+k\uparrow}^{\dagger} a_{-k\downarrow}^{\dagger} + \frac{|\Delta|^2}{Z}$$

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

nicht seine "normale" Form eines 1T-Hamiltonians

→ nochmal Koordinatentransformation nötig (Bogolyubov Trafo)

⋮
↓

$$H_{\text{eff}} = \sum_k \sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta|^2} (\alpha_k^{\dagger} \alpha_k + \beta_k^{\dagger} \beta_k) + \sum_k (\epsilon_k - \sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta|^2}) + \frac{|\Delta|^2}{V}$$