Øving 11, TFY4210 Anvendt Kvantemekanikk, Vår 2006

Oppgave 1

I denne oppgaven skal vi se på høyere ordens koblinger mellom fononer og elektroner, der for eksempel enten to fononer kan annihileres av spredning på elektroner, to fononer kan kreeres, eller ett fonon kan annihileres og det andre kreeres. Mer kompliserte prosesser der tre fononer kreeres, tre destrueres, etc., kan også tenkes. Slike sprednings prosesser finner vi ved å rekkeutvikle krystall potensialet $U(\mathbf{r})$ som elektronene beveger seg i til andre og høyere orden i avvikene fra likevektsposisjonene i det perfekte krystallet.

I planbølge-basis blir Hamilton-operatoren for elektroner som beveger seg i et krystall

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right]$$

gitt ved, på 2. kvantisert form

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \; c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} \; c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} \tilde{U}(\mathbf{q}) \; c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \; c_{\mathbf{k},\sigma},$$

der

$$U(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \; U(\mathbf{r}) \; e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}},$$

er Fourier-transformen til $U(\mathbf{r})$. Her er

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= \sum_j V_{el-ion}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \\ \mathbf{R}_j &= \mathbf{R}_j^0 - \sum_\lambda \mathbf{x}_\lambda, \end{aligned}$$

a) Bidraget til Hamilton-operatoren fra koblingen mellom krystall og elektroner kan skrives på formen $H_{el-ion} = H^0_{el-ion} + H^{(1)}_{el-ion} + H^{(2)}_{el-ion} + ...$, der det første leddet er bidraget fra et perfekt krystall som ikke svinger, det andre bidraget skriver seg fra å rekkeutvikle krystall potensialet rundt likevekt til første orden i $\mathbf{x}_{j,\lambda}$, og det tredje bidraget skriver seg fra å rekkeutvikle krystall potensialet rundt likevekt til andre orden i $\mathbf{x}_{j,\lambda}$. Vis, ved å rekkeutvikle $V_{el-ion}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}^0_j + \sum_\lambda \mathbf{x}_{j,\lambda})$ til 2. orden i $\sum_\lambda \mathbf{x}_{j,\lambda}$ rundt $\mathbf{r}_i - \mathbf{R}^0_j$, at dette gir et bidrag til Hamilton-operatoren på 2. kvantisert form gitt ved

$$H^{(2)}_{el-ion} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}',\lambda_1,\lambda_2,\sigma} \mathcal{S}_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\lambda_1,\lambda_2} \; (a^\dagger_{-\mathbf{q}',\lambda_1} + a_{\mathbf{q}',\lambda_1}) \; (a^\dagger_{\mathbf{q}'-\mathbf{q},\lambda_2} + a_{\mathbf{q}-\mathbf{q}',\lambda_2}) \; c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma},$$

og angi et uttrykk for $\mathcal{S}_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\lambda_1,\lambda_2}$. Her er de kvantiserte gittervibrasjonene gitt ved

$$\mathbf{x}_{j,\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q},\lambda}}} \; \xi_{\mathbf{q},\lambda} \; (a^\dagger_{-\mathbf{q},\lambda} + a_{\mathbf{q},\lambda}),$$

og $\omega_{\mathbf{q},\lambda}$ er energien til et fonon med bølgetall $\mathbf{q}$ i svingemode λ, og M er ionemassen i krystallet. $\xi_{\mathbf{q},\lambda}$ er en vektor som angir svingemoden til utslaget fra likevekt. Videre er $a^\dagger_{\mathbf{q},\lambda}, a_{\mathbf{q},\lambda}$ hhv. kreasjons- og destruksjonoperatorer for fononer (elementær-kvantene til lydfeltet) med bølgetall $\mathbf{q}$ og svingemode λ.

b) Tegn opp Feynman-diagrammer for de fire spredningsprosessene, og angi bølgetall, spinn og svingemode indeks på hver av linjene i diagrammene.

c) Gi ett eller to argumenter for hvorfor du forventer at $H^{(2)}_{el-ion} \ll H^{(1)}_{el-ion}$.

d) Bruk mønsteret som avtegner fra beregningene av $H^{(1)}_{el-ion}$ og $H^{(2)}_{el-ion}$ til å angi formen på et generelt n-te ordens ledd $H^{(n)}_{el-ion}$ som skriver seg fra n-te ordens Taylor-utviklingsleddet av $V_{el-ion}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}^0_j + \sum_\lambda \mathbf{x}_{j,\lambda})$ i $\sum_\lambda \mathbf{x}_{j,\lambda}$ rundt $\mathbf{r}_i - \mathbf{R}^0_j$.

e) Se på første ordens leddet, og forsøk å gi et kvalitativt argument for hvorfor denne elektron-fonon koblingen kan gi opphav til en effektiv elektron-elektron vekselvirkning.