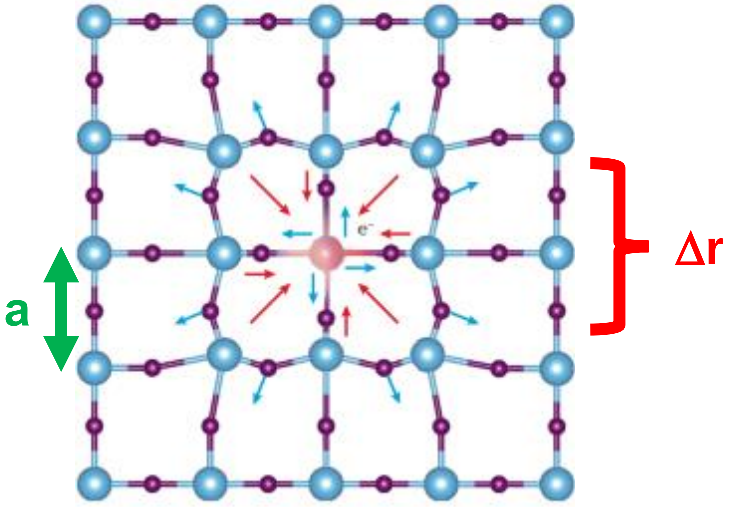
Семинар №9. Поляроны. ПЭВ.

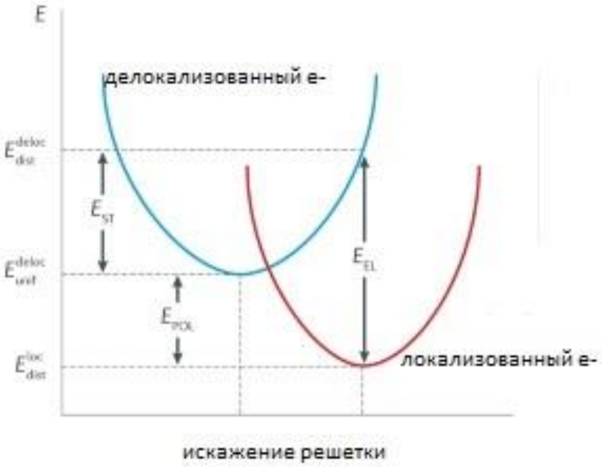
1. Электрон-фононное взаимодействие.
2. Поляроны большого и малого радиуса. Спектры поглощения.
3. Кинетика внутризонного поглощения света поляронами малого радиуса.

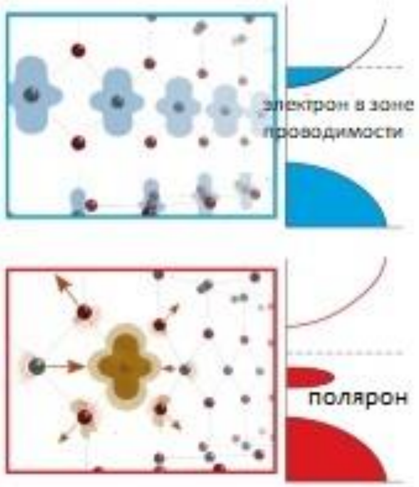
Полярон = электрон + созданное им же поле упругой деформации решетки



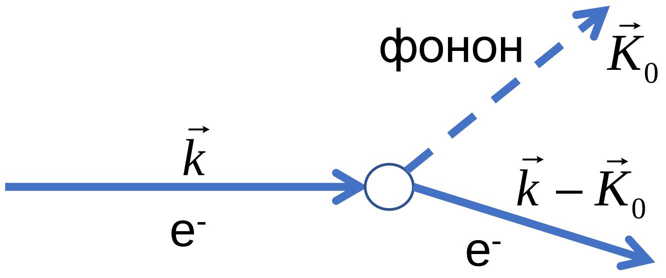
Δr>>a, полярон большого радиуса (ПБР)

Δr<=a, полярон малого радиуса (ПМР)





Оценим радиус полярона Δr:



ω_0 частота оптического фонона (LO) за время $\Delta t = \dfrac{2\pi}{\omega_0}$ e$^-$ проходит расст. $s \approx \Delta t \cdot \mathrm{v}$

$$s \approx \Delta t \cdot \mathrm{v} = \frac{2\pi}{\omega_0} \cdot \frac{\hbar k_0}{m^*}$$

Длина волны фононов, эффективно взаимодействующих с e$^-$: $\lambda_0 \geq s$

$$\lambda_0 \geq \frac{2\pi}{\omega_0} \cdot \frac{\hbar k_0}{m^*}, \quad k_0 \leq \sqrt{\frac{m^* \omega_0}{\hbar}}$$

Соотношение неопределенностей для e$^-$: $\Delta r \Delta k \approx \Delta r k_0 \approx 1$

$$\boxed{\Delta r \approx \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega_0}}}$$

Электрон-фононное взаимодействие

Оценим энергию поляризации решетки E_p

$$P = \vec{P}_e + \vec{P}_{ion}$$

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} = \varepsilon_0\vec{E},\ \varepsilon_0 - \text{статическая проводимость}$$

$$\vec{P} = \frac{1}{4\pi}\left(\vec{D} - \vec{E}\right) = \frac{1}{4\pi}\left(\vec{D} - \frac{1}{\varepsilon_0}\vec{D}\right) = \frac{\varepsilon_0 - 1}{4\pi\varepsilon_0}\vec{D}$$

$$\vec{P}_e = \frac{\varepsilon_\infty - 1}{4\pi\varepsilon_\infty}\vec{D}$$

$$\Rightarrow \vec{P}_{ion} = \frac{\varepsilon_0 - 1}{4\pi\varepsilon_0}\vec{D} - \frac{\varepsilon_\infty - 1}{4\pi\varepsilon_\infty}\vec{D} = \frac{\vec{D}}{4\pi}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right) = \frac{\vec{D}}{4\pi}\frac{1}{\varepsilon^*}$$

$$\text{где}\ \frac{1}{\varepsilon^*} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}$$

$$P = \vec{P}_e + \vec{P}_{ion}$$

$$E_b = -\int \frac{\vec{P}_{ion}\vec{D}}{2} dV = \frac{1}{4\pi\varepsilon^*} \int D^2 dV = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon^*} \int \frac{dV}{r^4} =$$

$$= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon^*} \int_{r_p}^{\infty} \frac{4\pi r^2 dr}{r^4} = -\frac{e^2}{\varepsilon^* r_p}$$

Энергия поляризации решетки

$$\boxed{E_b = -\frac{e^2}{\varepsilon^* r_p}}$$

Постоянная электрон-фононного взаимодействия

$$\lambda_{e-ph} = \frac{E_p}{\hbar\omega_0} = \frac{1}{\hbar\omega_0} \frac{e^2}{\varepsilon^* r_p}$$

$$\boxed{\lambda_{e-ph} = \frac{e^2}{\hbar\varepsilon^*} \sqrt{\frac{m^*}{\hbar\omega_0}}}$$

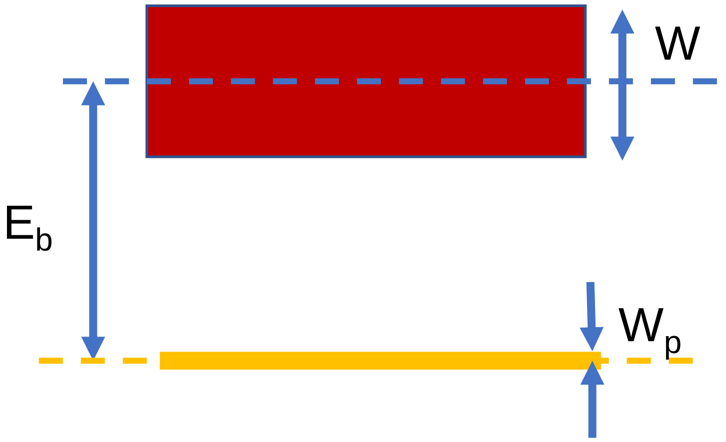
Поляроны

Малого радиуса (ПМР), Холстейна

$E_b>>W$

$\Delta r<a$

$W_p=W*\exp(-\lambda)$

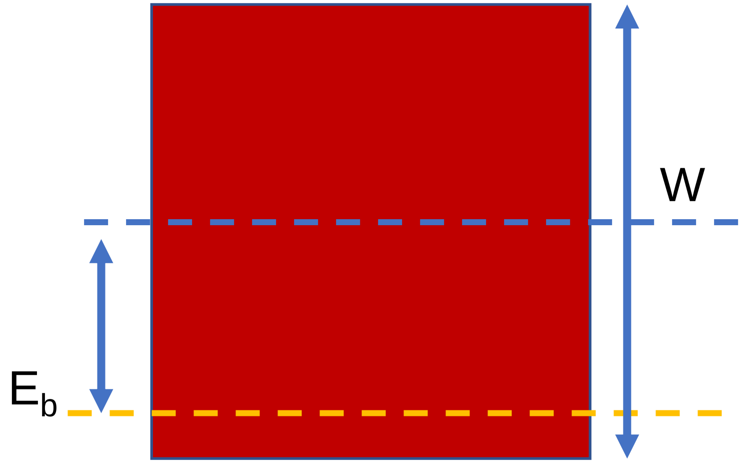


Зона прерывается дефектами
=> локализация на дефектах

Большого радиуса (ПБР), Фрёлиха

$E_b<W$

$\Delta r>a$



Нет жесткой локализации
=> полярон перемещается свободно

Оптические свойства поляронов большого радиуса

$$E_{ground} = E_p - 4E_p + 2E_p = -E_p$$

Энергия основного состояния полярона

Кинетическая энергия “конфайнмента” электрона (из соотн. неопределенностей)

Понижение энергии электрона

Энергия деформации решетки

$$E_{electron} = (E_p - 4E_p) = -3E_p$$

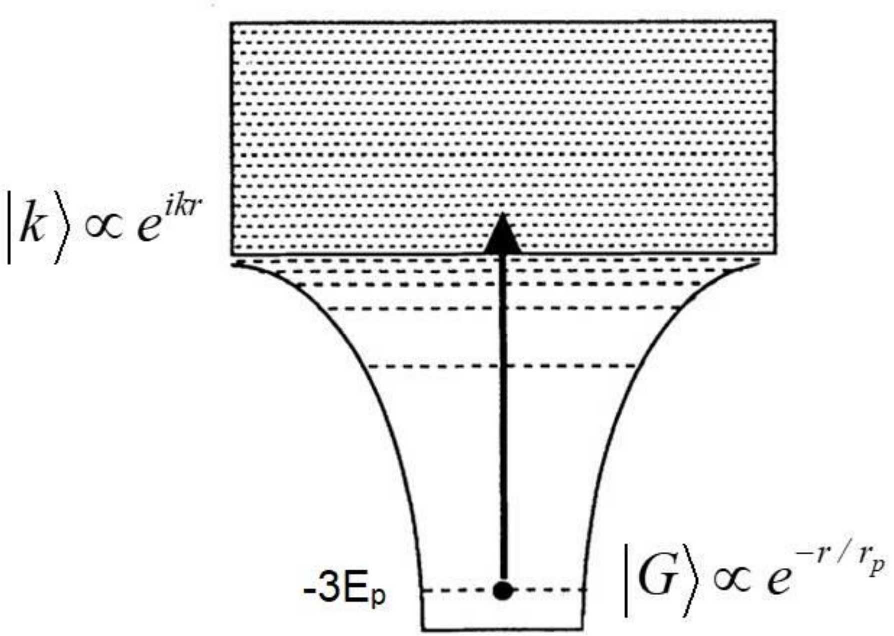
Чисто электронная часть энергии

=> Спектр поглощения должен начинаться с частоты $\omega = 3E_p/\hbar$

Отклик ПБР на внешнее электромагнитное поле

Похожая задача о водородоподобном атоме

Золотое правило Ферми: $w = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V(G \to k)\right|^2 \rho(k)$



$$V(G \to k) = \frac{eA_0\hbar k_a}{mc}\left\langle G|k\right\rangle,\ k_a \uparrow\uparrow A_0 - \textit{вектор} - \textit{потенциал}$$

$$I = \frac{\omega}{2\pi\hbar c}\left|A_0\right|^2,\ k_a = k\cos\theta$$

$$\frac{\alpha_p}{n_p} = \frac{\left(eA_0\hbar k_a\right)^2}{\omega m^2 c}\left|\left\langle G|k\right\rangle\right|^2 \rho(k)$$

$$\left|G\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}r_p^{3/2}}e^{-\frac{r}{r_p}},\ \left|k\right\rangle = L^{-3/2}e^{-\mathrm{ikr}}$$

$$\left\langle G|k\right\rangle = \frac{8\sqrt{\pi}\left(\frac{r_p}{L}\right)^{3/2}}{\left(1+\left(kr_p\right)^2\right)^2},\ \rho(k) = \frac{mL^3k}{(2\pi)^3\hbar^2}\sin\theta d\theta d\varphi$$

условие, при котором матр. элементы $\left\langle G|k\right\rangle$

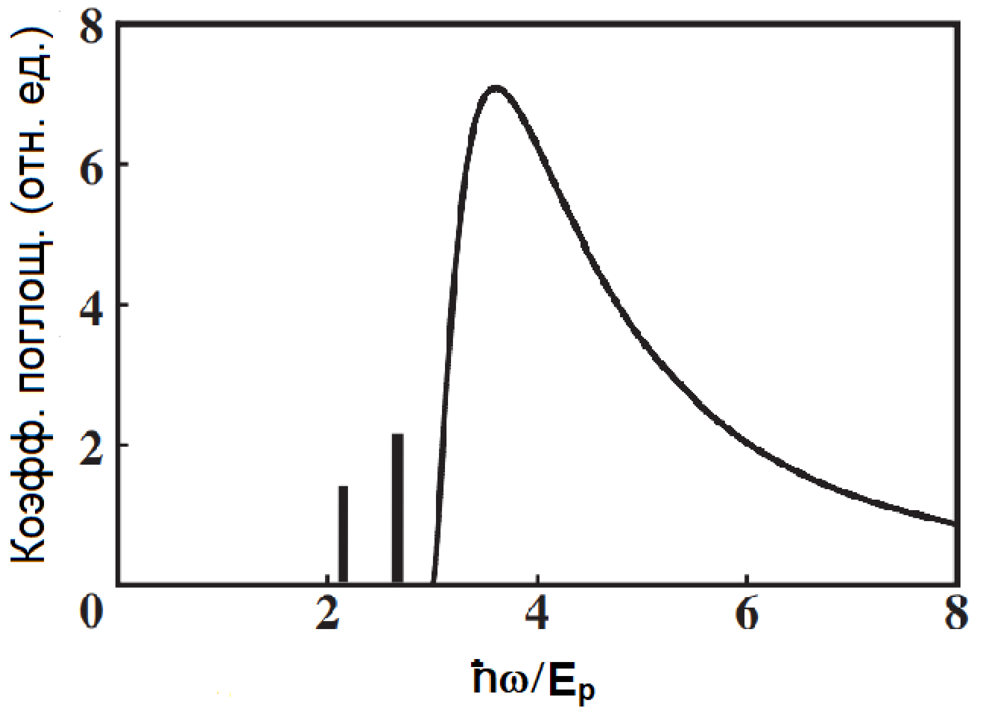
дают значительный вклад: $kr_p < 1$

Благотворительный фонд Владимира Потанина
Стипендиальная программа

Оптические свойства поляронов большого радиуса

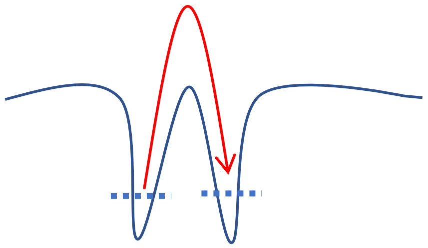
$$k \equiv \sqrt{2m\left(\hbar\omega - 3E_p\right)}\Big/\hbar$$

$$\alpha_p = n_p \frac{128\pi e^2}{3\omega c}\frac{\left(kr_p\right)^3}{\left(1+\left(kr_p\right)^2\right)^4}$$



В зависимости от параметра $\sqrt{2mE_p r_p^2}\Big/\hbar$ положение максимума может смещаться в область больших частот, но начинается поглощение всегда на частоте $3E_p/\hbar$

Отклик ПМР на внешнее электромагнитное поле



Прыжки (хоппинг)

$$H = \sum_{m,g} J(g) a^{+}_{m+g} a_m + \sum_q \hbar\omega_q \left(b_q^{+} b_q + \frac{1}{2} \right) -$$
$$-\sum_m a^{+}_{m+g} a_m \sum_q \hbar\omega_q \left[U^{*}_m(q) b_q + U_m(q) b_q^{+} \right]$$

m-векторный номер узла решетки, J(g) - обменный интеграл между узлами m и m+g, операторы и , соответственно, операторы рождения и уничтожения электрона на i-ом узле, и - фононные операторы, – частота оптического фонона. Безразмерные величины $U_m(q)$ – пропорциональны фрелиховской константе электрон-фононного α взаимодействия и характеризуют смещение m-го узла, возникающее вследствие поляризации решетки электроном, находящемся на этом узле.

$$H = \frac{p_m^2}{2M} + \frac{p_{m+g}^2}{2M} + \frac{M\omega_0^2 q_m^2}{2} + \frac{M\omega_0^2 q_{m+g}^2}{2} + \lambda\left(q_m a^{+}_m a_m + q_{m+g} a^{+}_{m+g} a_{m+g}\right)$$

где M - масса ядра, ω_0 - частота фонона, p_i и q_i - импульс и смещение соответствующего узла решетки, λ - константа электрон-фононного взаимодействия. Операторы и , соответственно, операторы рождения и уничтожения электрона на i-ом узле. Введем новые переменные:

$$q = q_m - q_{m+g}$$

$$Q = q_m + q_{m+g}$$

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{M\omega_0^2 q^2}{2} + \frac{\lambda q}{2}(a_m^+ a_m - a_{m+g}^+ a_{m+g}) +$$

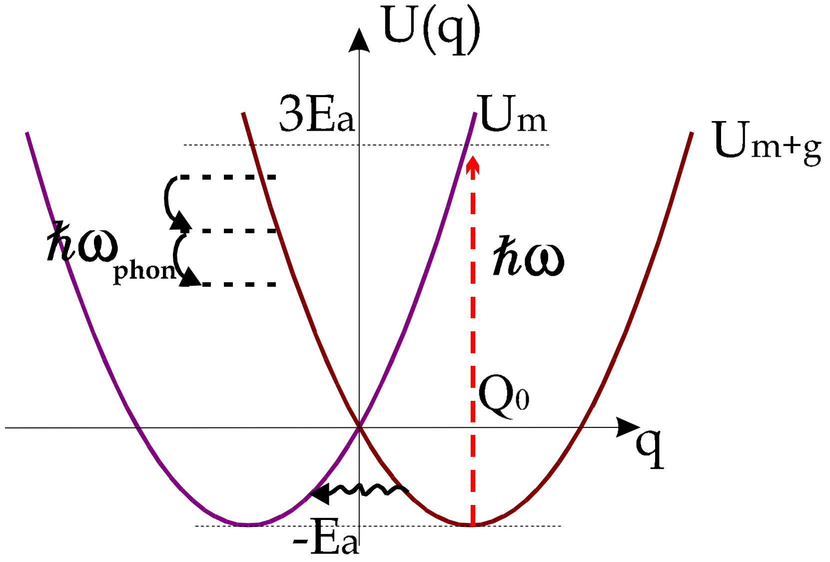
$$\frac{P^2}{2M} + \frac{M\omega_0^2 Q^2}{2} + \frac{\lambda Q}{2}(a_m^+ a_m + a_{m+g}^+ a_{m+g})$$

Кривые эффективной потенциальной энергии ядер (конфигурационные кривые) представляются следующим образом:

$$U_m = \frac{M\omega_0^2}{4}(q + Q_0)^2 - E_a$$

$$U_{m+g} = \frac{M\omega_0^2}{4}(q - Q_0)^2 - E_a$$

$$Q_0 = \frac{A}{M\omega_0^2} \qquad E_a = \frac{A^2}{4M\omega_0^2}$$



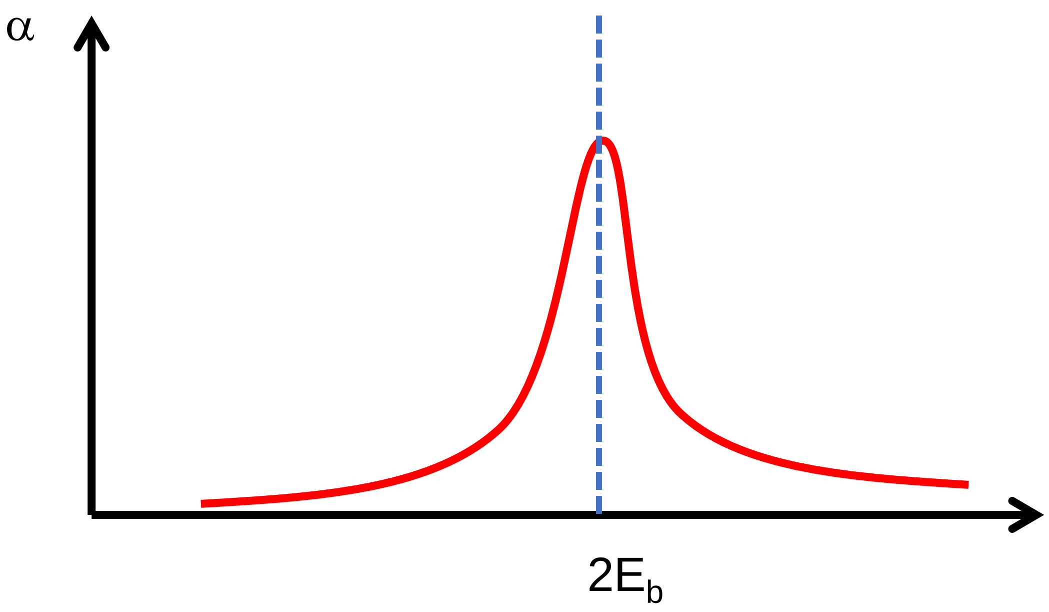
Величина $E_p=2E_a$ имеет смысл поляронного сдвига, возникающего вследствие поляризации решетки электроном, E_a - энергия термо-активации перескоков электрона.

Оптические свойства поляронов малого радиуса

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{nc}\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$$

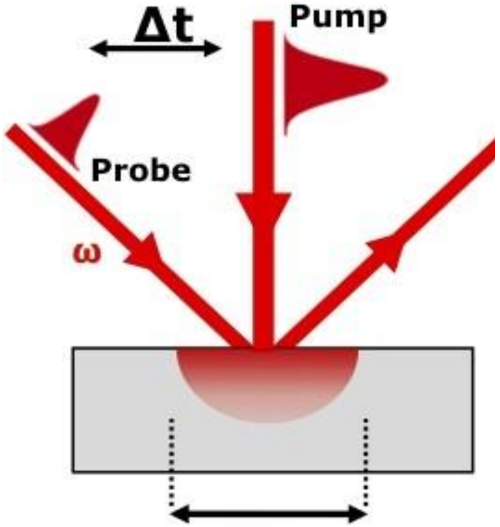
$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) = \frac{1}{2V_0\hbar\omega}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t}\left[< j_x(t)\, j_x(0) > - < j_x(0)\, j_x(t) >\right]$$ Формула Кубо

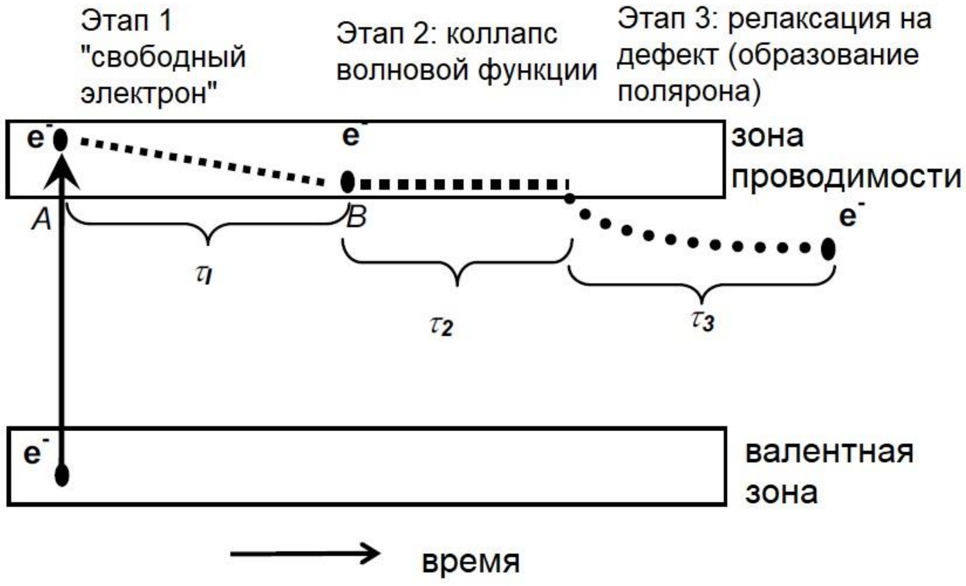
$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) \propto \left(\frac{J}{\hbar}\right)^2 \cdot \exp\left[-\frac{(\hbar\omega - 4E_a)^2}{16E_aT}\right]$$

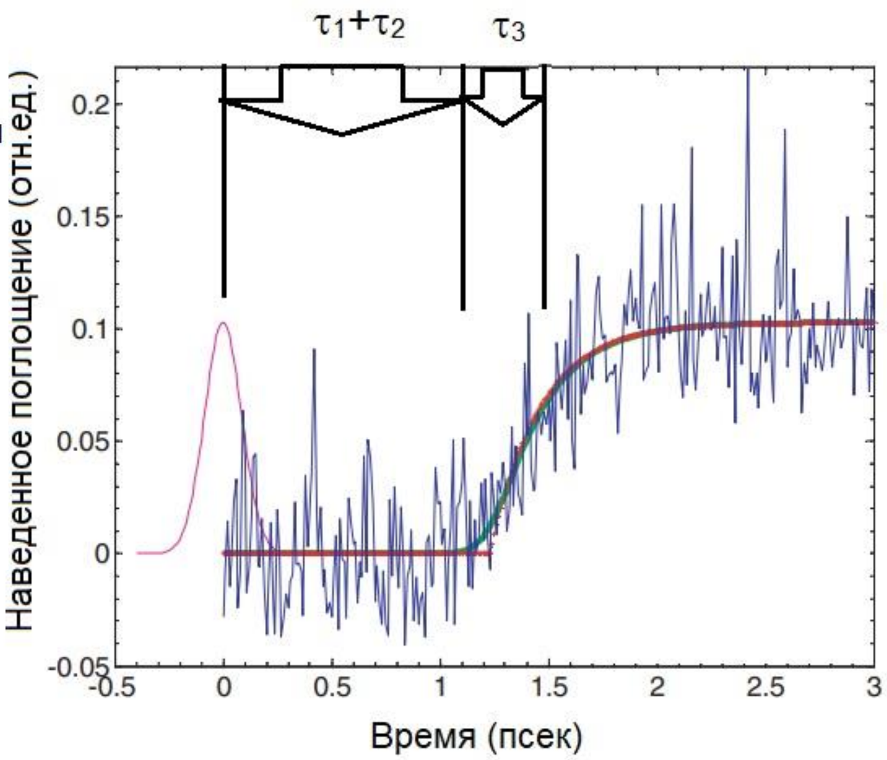


Кинетика поляронного поглощения

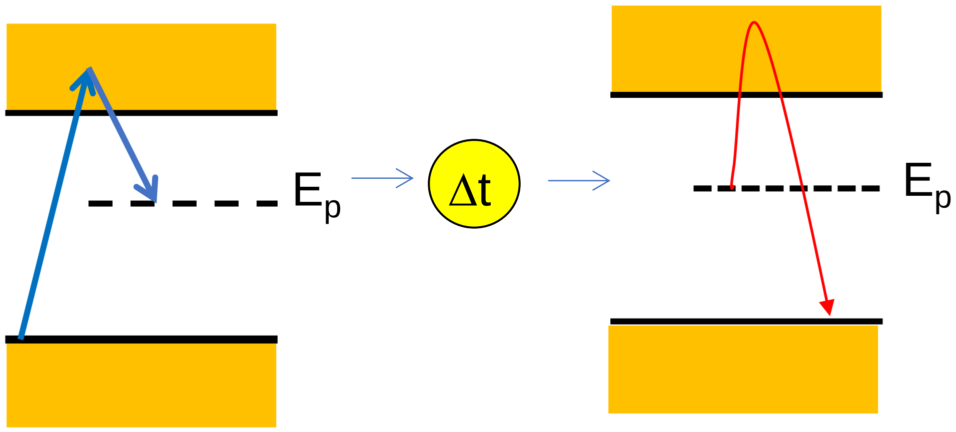
Эксперименты типа “накачка-зондирование”

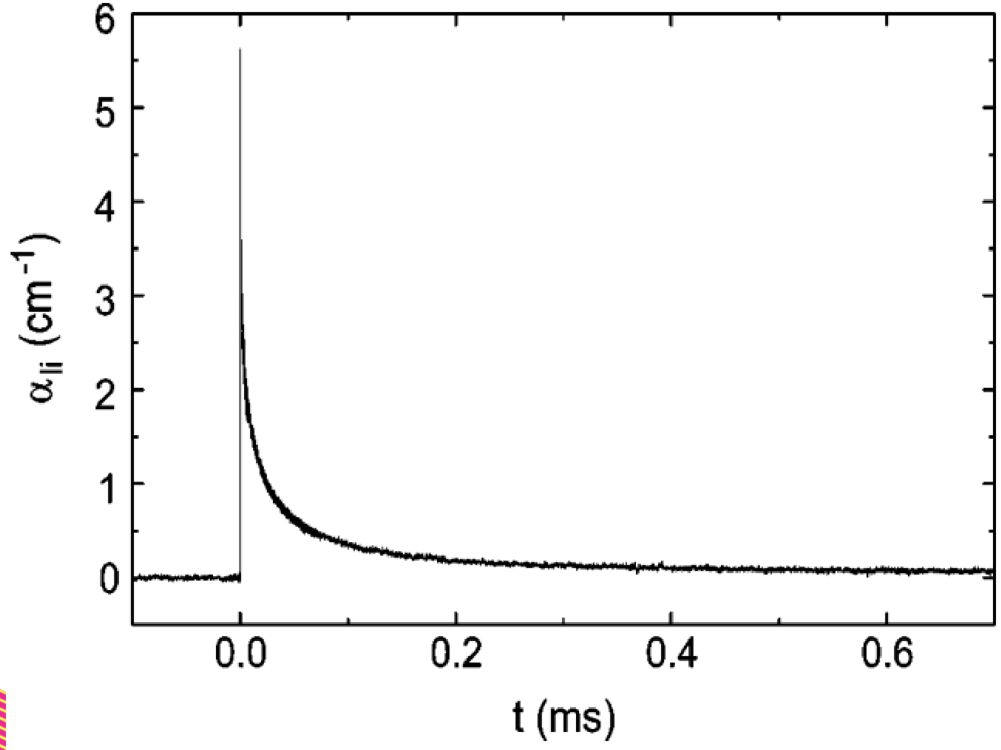


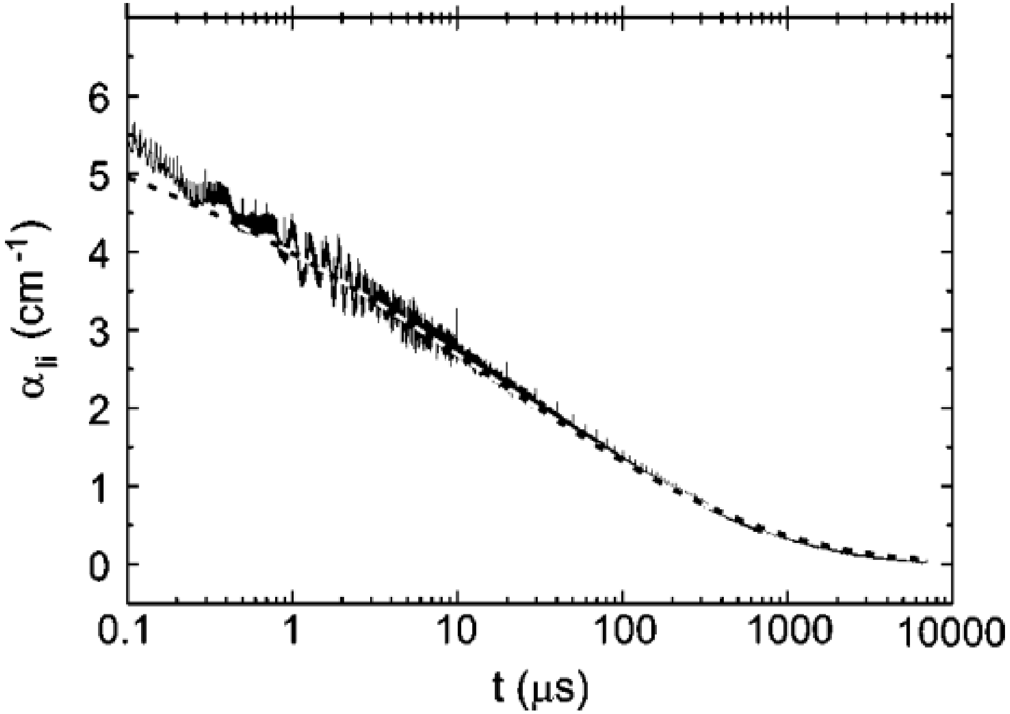




Что будет на больших временах?

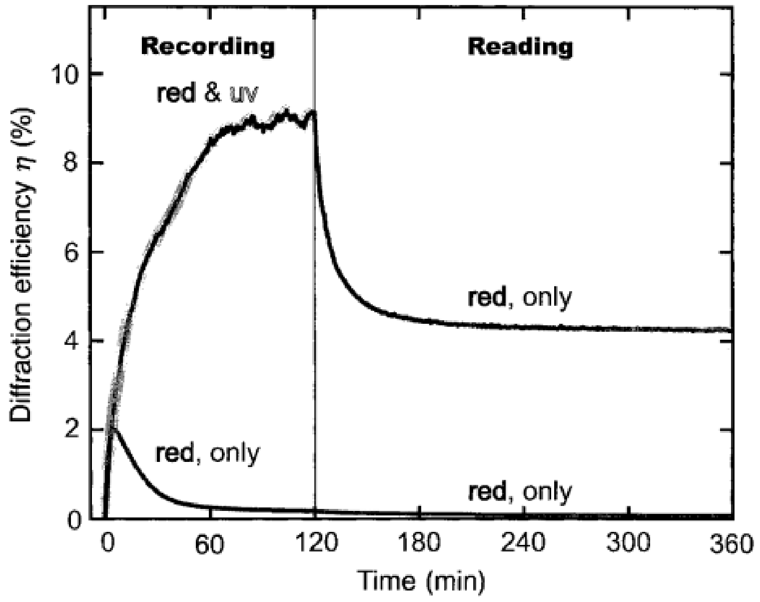






Возможные приложения:

1. Двухчастотная «невозмущающие» запись/считывание информации (двухчастотная голография)



2. Квантовая информация (поляронные и биполяронные кубиты, декогеренция, энтропия Шеннона, квантовое запутывание и т.д.)

$$\left|\Psi_{01}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|0\right\rangle + \left|1\right\rangle\right)$$

Спасибо за внимание!