4.5. Coulomb-Exzitonen und Polaritonen

Wir untersuchen die Ausbreitung elem. Wellen in einem Medium, das durch das Lorentz-Drude Modell beschrieben wird. ($\rightarrow$ optische Moden in ionischen Kristallen)
Die Grundgleichungen lauten

$$(1) \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0$$

$$(2) \quad \frac{1}{c} \partial_t \vec{B} + \operatorname{rot} \vec{E} = 0$$

$$(3) \quad \operatorname{div} \vec{E} = -4\pi \operatorname{div} \vec{P}$$

$$(4) \quad -\frac{1}{c} \partial_t \vec{E} + \operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \partial_t \vec{P}$$

$$(5) \quad \partial_t^2 \vec{P} + \omega_0^2 \vec{P} = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \vec{E}$$

wobei wir in der konstituierenden Gleichung den ungedämpften Fall ($\gamma = 0$) betrachten.
Wir setzen wieder für alle Vektorfelder ebene monochromatische Wellen an,
$\vec{A} = \vec{A}_0 \exp[i\varphi(\vec{x},t)]$ mit $\varphi(\vec{x},t) = \vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t$,
und zerlegen die Felder in ihre Anteile parallel und senkrecht zum Wellenvektor $\vec{k}$:

$$\vec{A} = \vec{A}^{\parallel} + \vec{A}^{\perp}$$

$$\vec{A}^{\parallel} = (\vec{k}\cdot\vec{A})\,\vec{k} \,/\, k^2 \qquad \text{(longitudinal)}$$

$$\vec{A}^{\perp} = (\vec{k}\times\vec{A})\times\vec{k} \,/\, k^2 \qquad \text{(transversal)}$$

Aus dem magnetischen Coulombgesetz folgt dann

$$\vec{k}\cdot\vec{B} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \boxed{\vec{B}^{\parallel} = 0} \qquad (1)'$$

Aus dem elektrischen Coulombgesetz folgt

$$\vec{k}\cdot\vec{E} = -4\pi\,\vec{k}\cdot\vec{P} \quad \rightsquigarrow \quad \boxed{\vec{E}^{\parallel} = -4\pi\vec{P}^{\parallel}} \qquad (3)'$$

wobei der Term auf der rechten Seite die Ankopplung der elem. Welle an die Materie beschreibt

Das Faraday'sche Induktionsgesetz besagt

$$\frac{1}{c}(-i\omega)\vec{B} + i\,\vec{k}\times\vec{E} = 0$$

mit $(1)'$ folgt dann

$$-i\frac{\omega}{c}\vec{B}^{\perp} = -i\,\vec{k}\times\vec{E}^{\perp}$$

$$\boxed{\vec{B}^{\perp} = \frac{c}{\omega}\,\vec{k}\times\vec{E}^{\perp}} \qquad (2)'$$

Das Maxwellsche Gesetz ergibt

$$-\frac{1}{c}(-i\omega)\vec{E} + i\,(\vec{k}\times\vec{B}) = \frac{4\pi}{c}(-i\omega)\vec{P}$$

mit $(3)'$ folgt dann

$$\frac{\omega}{c}\vec{E}^{\perp} + \vec{k}\times\vec{B}^{\perp} = -4\pi\frac{\omega}{c}\vec{P}^{\perp}$$

$$\boxed{\vec{E}^{\perp} + 4\pi\vec{P}^{\perp} = -\frac{c}{\omega}\,(\vec{k}\times\vec{B}^{\perp})} \qquad (4)'$$

Die konstituierende Gleichung schliesslich ergibt

$$(-\omega^2 + \omega_0^2)\,\vec{P}^{(\parallel,\perp)} = \frac{\omega_p^2}{4\pi}\vec{E}^{(\parallel,\perp)}$$

also jeweils die identische Relation für die (orthogonalen) transversalen und longitudinalen Komponenten

$$\boxed{\vec{P}^{\parallel,\perp} = \chi(\omega)\, \vec{E}^{\parallel,\perp}} \qquad (5)'$$

$$\chi(\omega) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

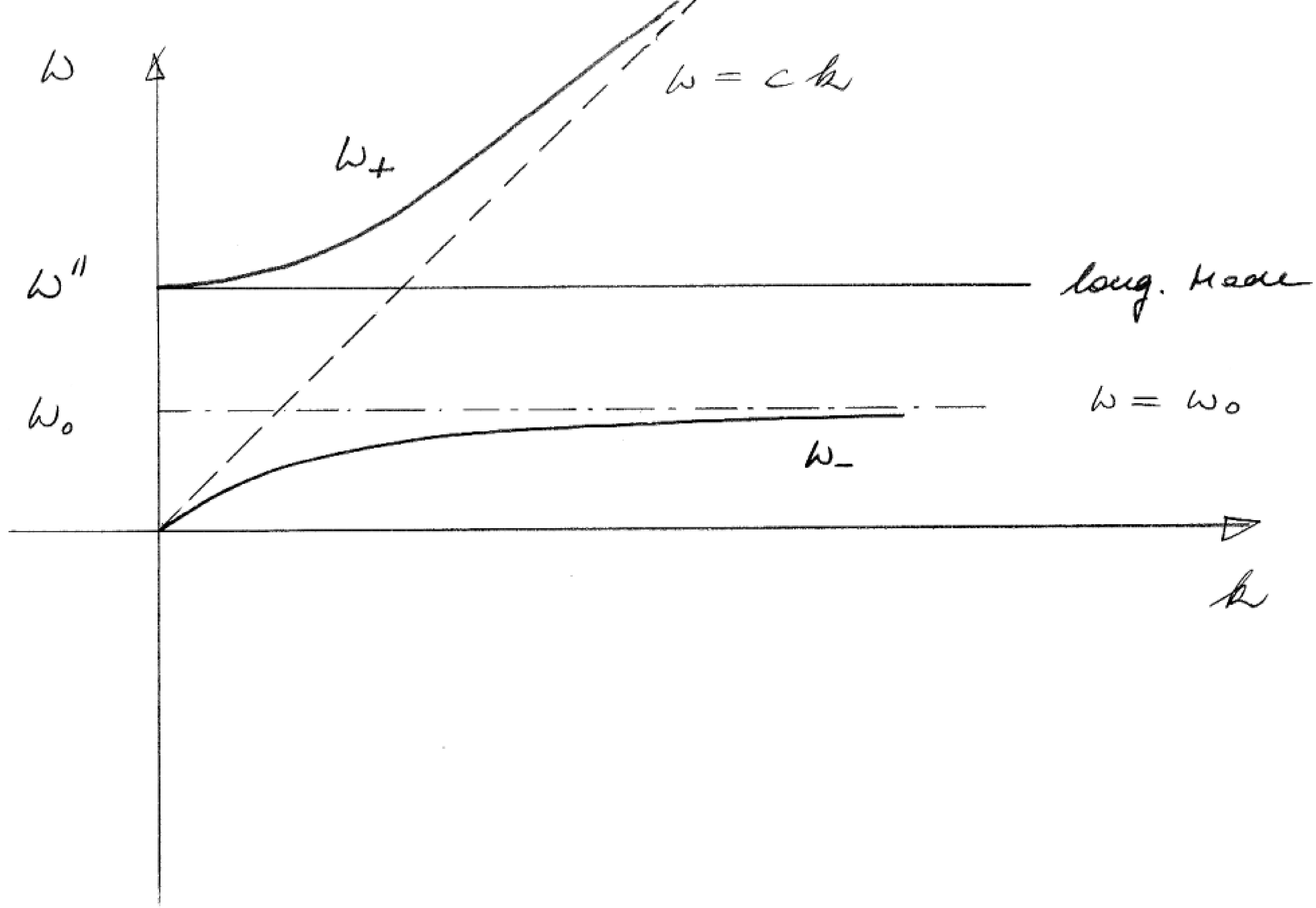
$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi \chi(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

Damit haben wir das Problem in zwei unabhängige Teilprobleme für longitudinale und transversale Wellen zerlegt!

Zunächst diskutieren wir den ungekoppelten Fall, d.h. Materie und elem. Wellen koppeln nicht über die Polarisation. Dann gilt für den longitudinalen Sektor:

$E^{\parallel} = 0 = B^{\parallel}$ (keine long. elem. Welle)
Für $P^{\parallel} \neq 0$ führt die Polarisation Eigenschwingungen mit der Frequenz ω_0 aus

Für den transversalen Sektor gilt:
Es gibt 2 (entartete) transversale Wellen mit $\vec{E}^{\perp} \neq 0$ und der Dispersionsrelation $\omega = ck$ (siehe $(2)'$ und $(4)'$ mit $\vec{P}^{\perp} = 0$)



<u>ohne Kopplung:</u>

2 (rechts und links pol.) transv. Wellen ; $\omega = ck$

1 long. Welle ; $\omega = \omega_0$

<u>mit Kopplung:</u>

- unterer Zweig ω_- : Bei kleinen Wellenzahlen verhält sich die elem. Welle so als ob sie sich in einem gewöhnlichen dielektr. Medium mit der DK ε_0 ausbreiten würde. Die Wellengeschw. ist $v = c/\sqrt{\varepsilon_0}$. Mit wachsendem k nähert sich die Frequenz ω_0 an, d.h. $\chi(\omega) \to \infty$. Folglich führen kleine Amplituden der äußeren elektrischen Felder zu extrem großen Polarisationen. Die Strahlung ändert sich von lichtartig bei kleinen k zu phononartig bei großen k.

Man nennt die Mode, die aus der Kopplung zwischen Licht und Phononen (Gitterschwingungen) entsteht auch POLARITONEN.

- oberer Zweig ω_+: Bei kleinen k besitzt diese transversalen Moden eine zur longitudinalen Mode vergleichbare Frequenz. Bei großen k propagiert die Welle wie im Vakuum mit der Lichtgeschwindigkeit c.

Bemerkungen:

* $\omega_0 = 0$ $\rightsquigarrow$ Coulomb Exzitonen

$$\left(\frac{ck}{\omega}\right)^2 = \frac{\omega_{\parallel}^2 - \omega^2}{-\omega^2}$$

$$\rightsquigarrow \underline{\underline{\omega_{\perp}^2}} = \omega_{\parallel}^2 + (ck)^2$$

$$= \underline{\underline{\omega_p^2 + (ck)^2}}$$

2 fach entartet

und $\underline{\underline{\omega_{\parallel}^2 = \omega_p^2}}$

* Übungsaufgabe: Was passiert wenn man die Dämpfung berücksichtigt; $\gamma \neq 0$?

Fall, elm. Wellen und Materie koppeln gar

(a) <u>Longitudinale Wellen</u>

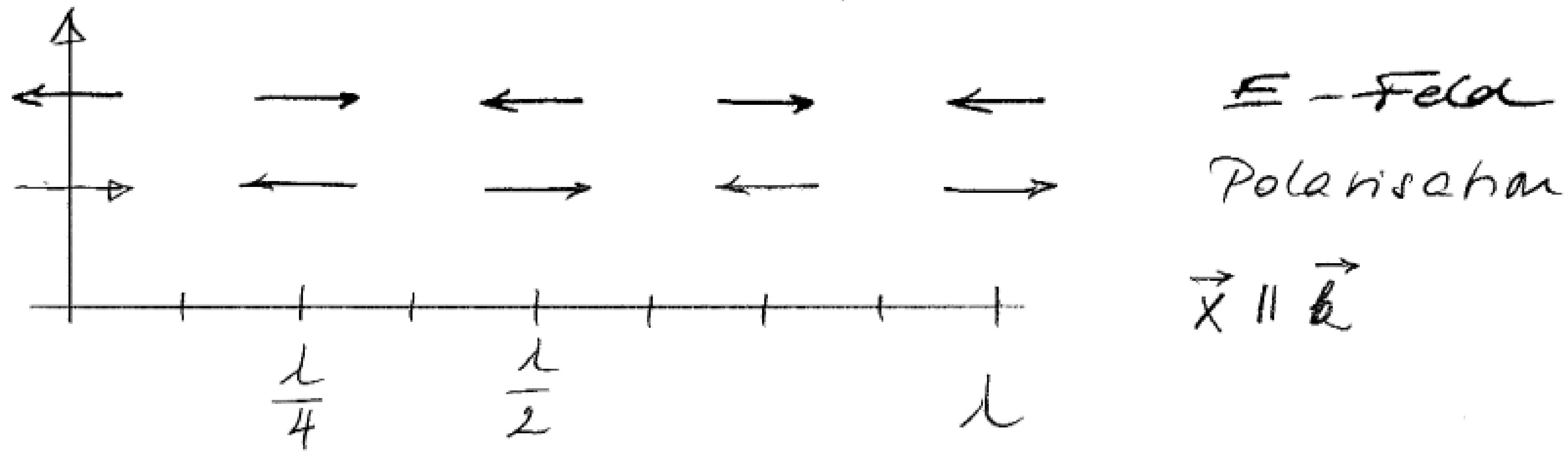
$$\vec{P}_0^{\parallel} = P_0 \frac{\vec{k}}{k}, \quad \vec{B}_0^{\parallel} = 0, \quad \vec{E}_0^{\parallel} = -4\pi \vec{P}_0^{\parallel}$$

$$P_0 = A e^{i\delta}; \quad P = P_0 e^{i\varphi} \rightsquigarrow$$

$$P(\vec{x},t) = A \cos(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t + \delta)$$

reelle Lösung

$\vec{E}^{\parallel}$ und $\vec{P}^{\parallel}$ schwingen in Gegenphase



Aus (5)' und (3)'

$$\left[-\omega^2 + \omega_0^2 + \omega_p^2\right] \vec{P}^{\parallel} = 0$$

Für $\vec{P}^{\parallel} \neq 0$ folgt $\omega^2 = \omega_0 + \omega_p^2$

d.h. die Dispersionsrelation lautet nun

$$\boxed{\omega^{\parallel} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_p^2}}$$

Mit dieser longitudinalen Frequenz (Mode des gekoppelten Materie-ED Systems) kann man $\varepsilon(\omega)$ umschreiben

$$\underline{\underline{\varepsilon(\omega)}} = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2} = \frac{\omega_0^2 - \omega^2 + \omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

$$= \underline{\underline{\frac{(\omega^{\parallel})^2 - \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2}}}$$

Die Nullstelle von $\varepsilon(\omega)$ ist also die Frequenz der longitudinalen Mode.

(b) <u>Transversale Wellen</u> $(2)', (4)', (5)'$

wegen $\vec{B}_0^\perp = \frac{c}{\omega} \vec{k} \times \vec{E}_0^\perp$ bilden (wie im Vakuum) $\vec{E}_0^\perp$, $\vec{B}_0^\perp$ und $\vec{k}$ ein rechtsorientiertes Dreibein.

$(5)'$: $$\vec{P}_0^\perp = \chi(\omega) \vec{E}_0^\perp$$

$$4\pi \chi(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

so dass für $\omega < \omega_0$ $\vec{P}_0^\perp$ mit $\vec{E}_0^\perp$ in Phase und für $\omega > \omega_0$ in Gegenphase schwingen.

Unter Verwendung des Durchflutungsgesetzes $(4)'$ kann man die Dispersionsrelation der transversalen Wellen gewinnen:

$$\vec{E}_0^\perp + 4\pi \chi(\omega) \vec{E}_0^\perp = -\frac{c}{\omega} (\vec{k} \times \vec{B}_0^\perp)$$

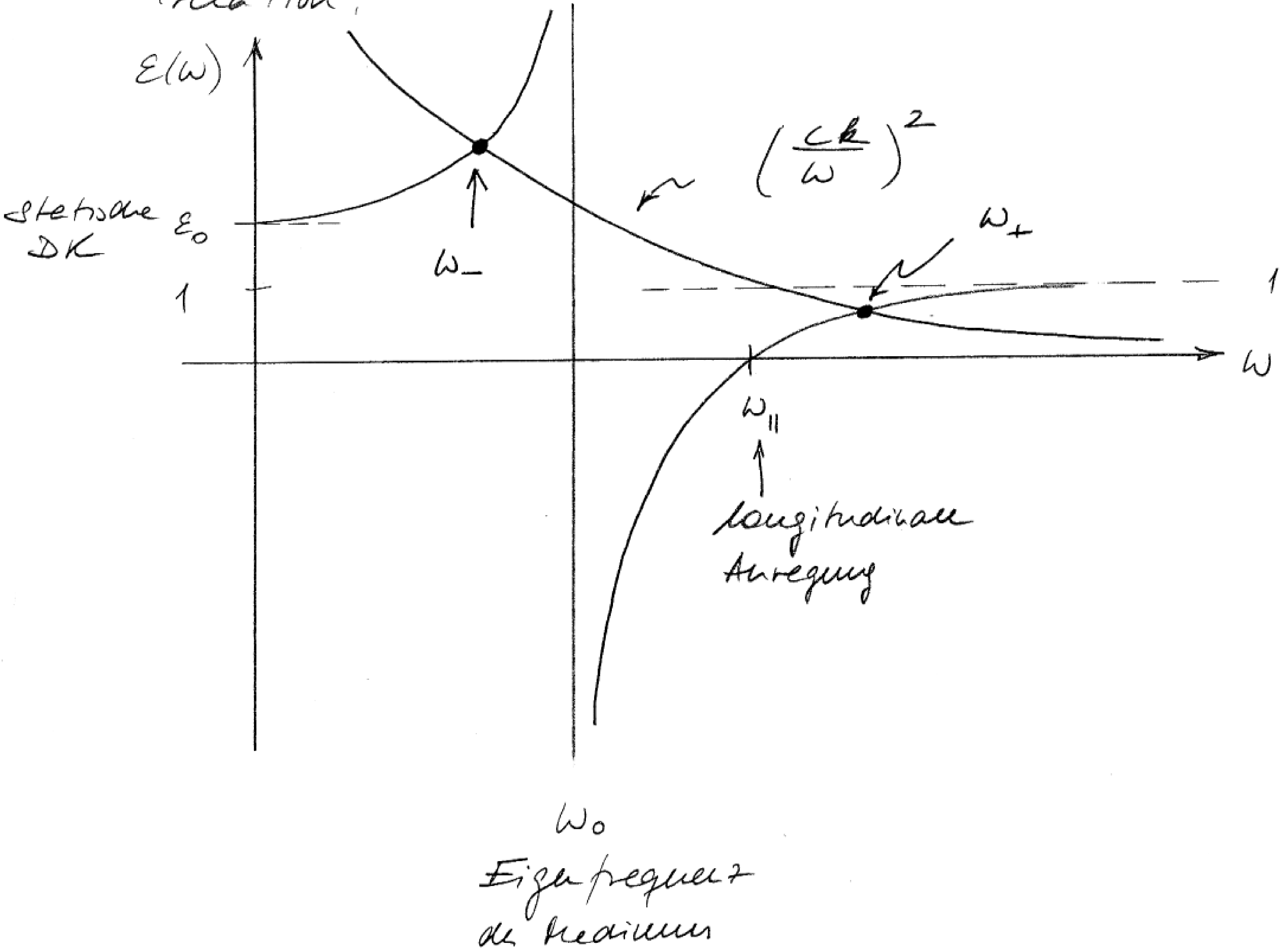
$$= -\left(\frac{c}{\omega}\right)^2 \underbrace{\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{E}_0^\perp)}_{= -k^2 \vec{E}_0^\perp}$$

$$\Big[\underbrace{1 + 4\pi \chi(\omega)}_{= \varepsilon(\omega)} - \left(\frac{kc}{\omega}\right)^2\Big] \vec{E}_0^\perp = 0$$

$\curvearrowright$ Dispersionsrelation

$$\boxed{\varepsilon(\omega) = \left(\frac{kc}{\omega}\right)^2}$$

Graphische Lösung der transversalen Dispersionsrelation:



$$\varepsilon(\omega) = \frac{\omega_\parallel^2 - \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \rightarrow \begin{cases} \varepsilon_0 = \left(\frac{\omega_\parallel}{\omega_0}\right)^2 & ; \ \omega = 0 \\ 1 & ; \ \omega \rightarrow \infty \end{cases}$$

$$\varepsilon_0 = \left(\frac{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_p^2}}{\omega_0}\right)^2 > 1$$

2 Lösungszweige : $\omega_\pm(\vec{k})$

(1) $\omega_+ > \omega_\parallel$, monoton wachsend in k

$\omega_+(k=0) = \omega_\parallel$

$\omega_+(k \rightarrow \infty) = ck$ (Lichtwelle)

(2) $\omega_- > 0$, $\omega_- < \omega_0$

$\omega_-(k \rightarrow 0)$: $\frac{ck}{\omega} = \varepsilon_0 \Longrightarrow \omega = v k$; $v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_0}}$

$\omega_-(k \rightarrow \infty) \rightarrow \omega_0$

Bemerkungen

1) Die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ in ionischen Kristallen hat im allgemeinen die Form

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{\infty} \left[\frac{\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_L^2}{\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_T^2} \right]$$

so dass $\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} = \left(\frac{\omega_L}{\omega_T}\right)^2$ gilt

(Lyddane - Teller - Sachs Relation)

Beispiel: CdS

$$\varepsilon_0 = 8.9 \,, \quad \varepsilon_\infty = 5.4$$

$$\frac{\omega_T}{2\pi c} = 232 \text{ cm}^{-1}$$

$$\frac{\gamma}{2\pi c} = 6.9 \text{ cm}^{-1}$$

Dann

$$\omega_+(k) = \begin{cases} \omega_L & k \to 0 \\ \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_\infty}} k & k \to \infty \end{cases}$$

$$\omega_-(k) = \begin{cases} \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_0}} k & k \to 0 \\ \omega_T & k \to \infty \end{cases}$$