

# Tema 13

## Apantallament electrostàtic.

Josep Planelles

*Departament de Química Física i Analítica, Universitat Jaume I,  
Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain*

### 1 Interacció electró-fonó

Podem escriure l'hamiltonià d'un cristall com  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ph}$  on, com en molècules, l'hamiltonià electrònic  $\mathcal{H}_e$  inclou l'energia cinètica electrònica, la repulsió interelectrònica i l'atracció electró-nucli. Per això escrivim  $\mathcal{H}_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ , on  $\mathbf{r}_i$  representa les coordenades dels electrons i  $\mathbf{R}_j$  les dels nuclis. Anàlogament,  $\mathcal{H}_{ph}$  inclou energia cinètica nuclear i repulsió internuclear. Assumirem, com és habitual, que els electrons tenen una inèrcia rebutjable en comparació als nuclis, de manera que responen instantàniament al moviment nuclear, cosa que permet aplicar l'aproximació de Born-Oppenheimer: Fixem els nuclis en unes posicions donades i resolem l'equació electrònica,

$$\mathcal{H}_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)\Psi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i) = E_e(\mathbf{R}_j)\Psi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i) \quad (1)$$

Tot seguit escrivim,

$$(\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ph})\Psi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)\Phi(\mathbf{R}_j) = E\Psi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)\Phi(\mathbf{R}_j) \quad (2)$$

multipliquem a esquerra per  $\Psi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)^*$  i integrem sobre les coordenades electròniques obtenint,

$$(\mathcal{H}_{ph} + E_e(\mathbf{R}_j))\Phi(\mathbf{R}_j) = E\Phi(\mathbf{R}_j) \quad (3)$$

si escrivim  $E_e(\mathbf{R}_j) \approx E_e(\mathbf{R}_j^0) + \sum_j \left( \frac{\partial E_e}{\partial \mathbf{R}_j} \right)_0 \delta \mathbf{R}_j + \dots$  fins al terme lineal i anomenem  $\mathcal{H}_{ph}^0 = (\mathcal{H}_{ph} + E_e(\mathbf{R}_j^0))$ , podem considerar l'hamiltonià,

$$\mathcal{H}_{e-ph} = \sum_j \left( \frac{\partial E_e}{\partial \mathbf{R}_j} \right)_0 \delta \mathbf{R}_j \quad (4)$$

com una mena d'hamiltonià que ens proporciona l'energia d'interacció quan els nuclis es mouen de la seua posició d'equilibri (ona fonònica).

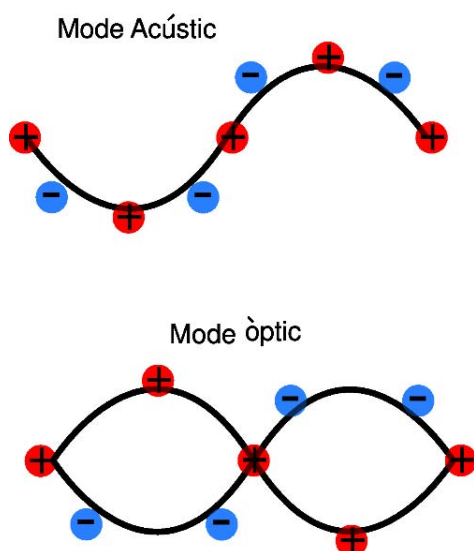


Figure 1: Fonons òptic i acústic

En un tema anterior vam exemplificar l'existència de fonons òptics (d'alta freqüència) i acústics (de baixa freqüència) en el cas d'una cadena lineal amb dos àtoms diferents per cel·la unitària (vegeu fig. 1). En cristalls de dos o més àtoms per cel·la unitària els fonons òptics representen desplaçaments relatius dels àtoms de dins de la cel·la unitària. Aquests modes generen distorsions *microscòpiques* (dins de la cel·la unitària) i per tant, no generen *strain* macroscòpic en el cristall. Contràriament, els fonons acústics no alteren sensiblement la cel·la unitària (no generen efectes *microscòpics*) però, per contra, poden deformar el cristall, produint un *strain* macroscòpic. En conseqüència, un i altre fonó interaccionen de manera diferent amb l'electró i, per això seran estudiats separatament a continuació.

## 2 Interacció electró-fonó acústic

Considerem el cas més simple d'una banda  $E_{nk}$  no degenerada (e.g. la banda de conducció d'un semiconductor). Considerem  $\mathcal{H}_{e-ph}$ . El terme  $\left(\frac{\partial E_e}{\partial \mathbf{R}_j}\right)_0$  representa simplement un shift de la banda de de conducció causada per un desplaçament estàtic dels àtoms que, en el cas de l'ona acústica, correspon a una deformació del cristall. Els paràmetres que descriuen aquests canvis en les energies electròniques reben el nom de *potencials de deformació*. Els quocients  $\left(\frac{\partial E_e}{\partial \mathbf{R}_j}\right)_0$  estan, doncs, directament relacionats amb aquests potencials. Per tant, en el cas del fonó acústic, expressarem la interacció electró-fonó en termes dels potencials de deformació.

Si tots els desplaçaments  $\delta \mathbf{R}_j$  són iguals, el cristall efectua una translació i  $E_{nk}$  no varia. Cal doncs que  $(\partial \delta \mathbf{R}_i / \partial \mathbf{R}_j) = d_{ij} \neq 0$ . Aquest tensor, de rang dos, pot descomposar-se en una part simètrica i una antisimètrica,

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(d_{ij} + d_{ji}), \quad f_{ij} = \frac{1}{2}(d_{ij} - d_{ji}) \quad (5)$$

El tensor antisimètric  $f_{ij}$  implica una rotació del cristall<sup>1</sup> i per tant  $E_{nk}$  no varia. El tensor simètric  $e_{ij}$  s'anomena tensor deformació (*strain*) i és el responsable del *shift* de les energies electròniques.

De manera molt simple direm que si l'*strain* provoca un canvi  $\delta V$  en el volum  $V$  de semiconductor, com  $\delta V/V$  és molt petit, podem acceptar la *reposta lineal* i dir que,

$$\delta E_{nk} = a_{nk} \frac{\delta V}{V} \quad (6)$$

on el factor de proporcionalitat  $a_{nk}$  es conegut amb el nom de *potencial de deformació* volumètrica.

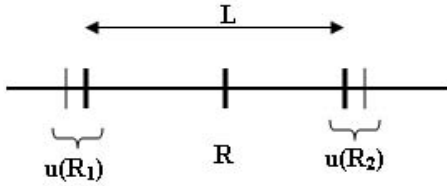


Figure 2: Camp de desplaçaments

És costum representar el camp de desplaçaments  $\delta \mathbf{R}_i$  per  $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ . De la figura tenim que  $\delta L = \mathbf{u}(\mathbf{R}_2) - \mathbf{u}(\mathbf{R}_1) = \delta \mathbf{u}(\mathbf{R})$ . Anàlogament, la variació de la unitat de volum  $\delta V/V$  és la divergència  $\nabla \mathbf{u}$ . Podem doncs modelar  $\mathcal{H}_{e-ph}$ :

$$\mathcal{H}_{e-ph} = a_c \nabla \mathbf{u} \quad (7)$$

L'obtenció de l'hamiltonià mecanoquàntic passa per obtenir prèviament l'operador desplaçament del fonó acústic, la determinació del qual abordem en la següent secció

## 3 Operador desplaçament del fonó acústic longitudinal

Considerem  $N$  partícules de massa  $M$ . La seua energia és:

$$E = \frac{M}{2} \sum_i^N \dot{\mathbf{r}}_i^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (8)$$

Si fem el canvi  $u_j = \alpha_j - \alpha_j^0$  amb  $\alpha = x, y, z$ , aleshores,

$$E = \frac{M}{2} \sum_i^{3N} \dot{u}_i^2 + V(u_1, \dots, u_{3N}) \quad (9)$$

Podem desenvolupar  $V$  fins el terme quàdràtic:

$$V(u_1, \dots, u_{3N}) \approx V_0 + \sum_i \left(\frac{\partial V}{\partial u_i}\right)_0 u_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j}\right)_0 u_i u_j \quad (10)$$

<sup>1</sup>Per a més informació acudiu a F. Rajadell, J. Planelles y J.I. Climente, *Cálculo del tensor de deformaciones en inclusiones*, Revista Española Física 1 (2007) 8-11. I, per a més detall encara, a <http://www3.uji.es/~planelle/strain.pdf>

$\left(\frac{\partial V}{\partial u_i}\right)_0 = 0$  (mínim en la posició d'equilibri). Tanmateix, sempre puc triar l'origen d'energies i dir  $V_0 = 0$ . Finalment, anomenem  $V_{ij} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j}\right)_0$ . Aleshores tenim que:

$$E = \frac{M}{2} \sum_i^{3N} \dot{u}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} u_i u_j = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{u}}^t \dot{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^t \mathbf{V} \mathbf{u} \quad (11)$$

Considerem un canvi de coordenades  $\Theta$  que diagonalitza  $\mathbf{V}$ :  $\mathbf{Q} = \Theta \mathbf{u}$ . També  $\dot{\mathbf{Q}} = \Theta \dot{\mathbf{u}}$ . Les coordenades  $\mathbf{u}$  són ortogonals i també les  $\mathbf{Q}$ , per tant,  $\Theta$  és una transformació ortogonal:  $\Theta^t \Theta = \mathbf{1}$ . Podem escriure doncs que:

$$E = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{u}}^t \Theta^t \Theta \dot{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^t \Theta^t \underbrace{\Theta \mathbf{V} \Theta^t}_{\Lambda} \Theta \mathbf{u} = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{Q}}^t \dot{\mathbf{Q}} + \frac{1}{2} \mathbf{Q}^t \Lambda \mathbf{Q} = \sum_i^{3N} \left( \frac{M}{2} \dot{Q}_i^2 + \frac{1}{2} \Lambda_i Q_i^2 \right) \quad (12)$$

Com els autovalors  $\Lambda_i$  no poden ser negatius escrivim  $\Lambda_i = M\omega_i^2$ . Veiem que hem descomposat l'energia com una suma d'energies  $E_i$  d'oscil·ladors harmònics independents,

$$E_i = \frac{M}{2} \dot{Q}_i^2 + \frac{1}{2} M\omega_i^2 Q_i^2 = \frac{P_i^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega_i^2 Q_i^2 \quad (13)$$

Considerem el cas de l'ona acústica longitudinal en una xarxa monoatòmica unidimensional.

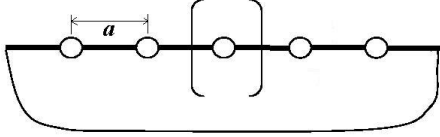


Figure 3: Condicions de von Karman

Per trobar els modes normals considerem les condicions de contorn de von Karman (figura 3). Veiem que el problema passa a tenir simetria  $C_n$ , amb irreps unidimensionals. Els modes normals han de ser base d'aquestes irreps. Veiem doncs que en aquest cas tan simple no ens cal procedir a la diagonalització de  $\mathbf{V}$  ja que directament sabem que els elements de  $\Theta$  han de ser els caràcters  $e^{iqal}$  de les irreps (que etiquetem amb  $q$ ).

Per tant, si hi ha  $N$  coordenades tenim que:

$$Q_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell}^N u_{\ell} e^{-iqal} \quad (14)$$

on  $a$  és la constant de la xarxa.

La transformació inversa ens proporciona  $u$  en funció de  $Q$ :

$$u_{\ell} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q^N Q_q e^{iqal} \quad (15)$$

Com resulta que  $u_{\ell}$  és real,  $u_{\ell} = u_{\ell}^*$ . Aleshores,

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q^N Q_q^* e^{-iqal} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q^N Q_q e^{iqal} \quad (16)$$

Per tant,  $Q_q = Q_{-q}^*$ . Tanmateix:

$$\sum_q^N Q_{-q} e^{-iqal} = \sum_q^N Q_q e^{iqal} \quad (17)$$

És convenient escriure:

$$u_{\ell} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_q^N (Q_q e^{iqal} + Q_q^* e^{-iqal}) \quad (18)$$

Si procedim ara a quantificar els oscil·ladors tenim que:

$$\hat{\mathcal{H}}_q = \frac{1}{2M} \hat{P}_q^2 + \frac{1}{2} M \omega_q^2 Q_q^2 \quad (19)$$

on  $\hat{P}_q = -i \hbar \frac{\partial}{\partial Q_q}$ .

Les energies són  $(n_q + 1/2) \hbar \omega_q$  i les funcions pròpies venen en termes de polinomis d'Hermite. Podem doncs definir operador de creació/aniquilació. Ara be, el fet que  $Q_q = Q_{-q}^+$  obliga a que:

$$a_q^+ = \frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_q}} (M \omega_q Q_{-q} - i \hat{P}_q) \quad a_q = \frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_q}} (M \omega_q Q_q + i \hat{P}_{-q}) \quad (20)$$

Per tant

$$Q_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}} (a_{-q}^+ + a_q) \quad (21)$$

de manera que

$$Q_{-q}^+ = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}} (a_q + a_{-q}^+) = Q_q \quad (22)$$

Aleshores,<sup>2</sup>

$$u_\ell = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_q}} (a_q e^{i q a \ell} + a_q^+ e^{-i q a \ell}) \quad (23)$$

En un cristall 3D:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \sum_q \mathbf{e}_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_q}} (a_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^+ e^{-i \mathbf{q} \mathbf{r}}) \quad (24)$$

on  $\mathbf{e}_q$  és el vector unitari en la direcció del desplaçament. La divergència  $\nabla \mathbf{u}$  implica la derivació de l'exponencial, de manera que finalment,

$$\hat{\mathcal{H}}_{e-ph} = a_c \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_q}} (i \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{q}) [a_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}} - a_{\mathbf{q}}^+ e^{-i \mathbf{q} \mathbf{r}}] \quad (25)$$

amb  $N = \rho V$  densitat per volum.<sup>3</sup>

## 4 Interacció electró-fonó òptic

En cristalls polars, un fonó òptic implica desplaçament d'àtoms carregats dins de la cel·la unitat (vegeu fig. 1). Aquest desplaçament relatiu de càrregues genera un camp macroscòpic, el qual pot interaccionar amb els electrons. Aquesta interacció és anomenada interacció de Fröhlich.

Considerem un cristall polar amb dos àtoms per cel·la unitat. Considerem un fonó longitudinal òptic (LO) com responsable de la polarització oscil·lant macroscòpica que genera un camp elèctric  $\mathbf{E}_{LO} = F \mathbf{u}_{LO}$ , on

$$u_{LO} = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{LO}^{(q)}}} (a_q e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}} + a_q^+ e^{-i \mathbf{q} \mathbf{r}}) \quad (26)$$

Aquest camp elèctric pot derivar formalment d'un potencial  $\phi_{LO}$ , de manera que  $\mathbf{E}_{LO} = -\nabla \phi_{LO}$ . Si ara tenim en compte que  $\nabla(-\frac{i}{q} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}}) = e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}}$  i que la interacció  $\hat{\mathcal{H}}_{Fr} = -e \phi_{LO}$ , trobem que l'hamiltonià de Fröhlich queda:

$$\hat{\mathcal{H}}_{Fr} = \sum_q (\gamma_q a_q e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}} + \gamma_q^* a_q^+ e^{-i \mathbf{q} \mathbf{r}}) \quad (27)$$

on  $\gamma_q$  és inversament proporcional a  $q$ .

<sup>2</sup>Cal tenir present que  $\omega_q = \omega_{-q}$ ,  $\sum_q a_{-q}^+ e^{i q a \ell} = \sum_q a_q^+ e^{-i q a \ell}$ ,  $\sum_q a_{-q} e^{-i q a \ell} = \sum_q a_q e^{i q a \ell}$ , etc.

<sup>3</sup>Més detalls en Ch. Hamaguchi, Basic Semiconductor Physics Springer, 2010.

## 5 Concepte de polaró

Si introduïm un electró o un forat en un semiconductor que presente enllaços heteropolars, la càrrega introduïda polaritzarà la xarxa. Per exemple, un electró en excés atraurà els cores amb càrrega positiva i repel·lerà aquells que presenten densitat de càrrega negativa. Podem descriure la distorsió de la xarxa com una superposició de fonons òptics, preferentment longitudinals. Per tant, podem dir que l'electró lliure en excés va acompanyat d'un núvol fonònic. Anomenem *polaró* a l'entitat formada per l'electró en excés més el núvol de fonons. Si el radi del núvol de fonons és més gran que la constant de cel·la del semiconductor parlem de *polaró gran* i si és menor, com succeeix en aïllants iònics, *polaró petit*. La massa efectiva del polaró és major que la de l'electró lliure en una xarxa rígida ( $m_{rig}^*$ ). En el model de Haken del que parlarem després,

$$m^* \approx m_{rig}^* \left(1 + \frac{\alpha}{6}\right) \quad (28)$$

on  $\alpha$  és una quantitat adimensional que incorpora l'acoblament de Fröhlich amb els fotons òptics.

També, la relaxació de la xarxa produeix un escurçament del *gap* en una quantitat  $\Delta E_g^{e,h} = \alpha_{e,h} \hbar \omega_{LO}$ . Tanmateix, el radi del polaró  $r_p^{e,h}$  el podem estimar

$$r_p^{e,h} = \left( \frac{\hbar}{2 m_{rig}^{e,h} \omega_{LO}} \right)^{1/2}. \quad (29)$$

Cal dir que com les masses efectives d'electrons i forats es determinen experimentalment i, en el cristall, la xarxa està relaxada (no podem fer cristalls rígids), aquestes, així com els *gaps*, són polarònics.

A banda de la renormalització de la massa i energia del *gap*, la interacció electró-fonó pot donar lloc a un *scattering* (dispersió) inelàstic:

$$E_e^{(i)} = E_e^{(f)} \pm \hbar \omega_{fon}; \quad k_e^{(i)} = k_e^{(f)} \pm \hbar k_{fon} \quad (30)$$

## 6 Interacció electró-forat en semiconductors polars: Potencial de Haken

L'hamiltonià d'un parell electró-forat acoblats als fonons òptics longitudinals del bulk el podem escriure:<sup>4</sup>

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{e-h}^{(0)} + \hat{\mathcal{H}}_{ph}^{(0)} + \hat{\mathcal{H}}_{eh-ph}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \underbrace{\frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |r_e - r_h|}}_{\hat{\mathcal{H}}_{eh}^{(0)}} + \underbrace{\hbar \omega_{LO} \sum_q a_q^+ a_q}_{\hat{\mathcal{H}}_{ph}^{(0)}} + \sum_q [\gamma_q a_q (e^{iqr_e} - e^{iqr_h}) + \gamma_q^* a_q^+ (e^{-iqr_e} - e^{-iqr_h})] \quad (31)$$

Si l'electró i forat estan separats a una distància gran ens trobem amb dues quasipartícules, el polaró electrònic i el polaró del forat. Aquest polarons estan caracteritzats per la seua autoenergia ( $-\alpha_{e,h} \hbar \omega_{LO}$ ) i massa efectiva  $m_{e,h} (1 + \alpha_{e,h}/6)$ . Si les distàncies  $r_{eh}$  són grans comparades amb els radis polarònics cal esperar que aquests interaccionen coulombicament apantallats per la xarxa iònica i els altres electrons. Si la distància  $r_{eh}$  decreix, els núvols de polarització començaran a interferir i parcialment a neutralitzar-se. En teoria de camps, diríem que els fonons virtuals emesos per l'electró són absorbits pel forat i vice-versa. L'efecte net és una alteració de la interacció  $e-h$ . Aquest efecte hauria de créixer si  $R/r_{eh}$  créix, on  $R$  és el radi del polaró. Finalment, si  $r_{eh}$  és molt petit en comparació amb  $R$ , aleshores, electró i forat deixaran d'estar influenciats per la xarxa i la interacció coulombica estarà apantallada per  $\epsilon_\infty$  (vegeu e.g. Mahanty i Varma, PRB 6 (1972) 2209).

Han hagut diversos estudis per deduir un *potencial efectiu dinàmic* per a la intracció electró-forat. El treball pioner és el de Haken (Nuovo Cimento 10 (1956) 1230). En ell, Haken parteix de l'hamiltonià complet (eq. 31) i considerava la següent funció d'ona per a l'excitó:

$$\Phi = \sum_{k_e k_h} c_{k_e k_h} \phi_{k_e}^{(e)}(r_e, a_q^+) \phi_{k_h}^{(h)}(r_h, a_q^+) \quad (32)$$

<sup>4</sup>En un punt quàntic  $\hat{\mathcal{H}}_{e-h}^{(0)}$  inclou també els potencials confinants, veure e.g. Senger i Bajaj, PRB 68 (2003) 045313.

on  $\phi_{k_i}^{(i)}(r_i, a_q^+)$  representa la funció del polaró lliure corresponent a la partícula  $i$ . Aproximava aquestes funcions per  $\phi_{k_i}^{(i)}(r_i, a_q^+) = e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}_i} U^{(i)}$ , on  $U^{(i)} = \exp \left[ \sum_q \left( f_q^{(i)} a_q^+ - f_q^{(i)*} a_q \right) \right] |0\rangle$  representa la part fonònica. Com els valors  $f_q^{(i)}$  *no són coneguts*, són optimitzats variacionalment, i s'obté un hamiltonià efectiu per a l'excitó mitjançant la integració de la part fonònica:

$$E = \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle = \langle \phi_{eh} | \mathcal{H}_{eff} | \phi_{eh} \rangle \quad (33)$$

El procediment matemàtic és complex (veure e.g. Pollmann i Büttner, PRB 16 (1997) 4480) i dóna lloc a un hamiltonià efectiu  $H = \frac{p^2}{2\mu^*} + V(r)$  amb:

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_\infty r} + \frac{e^2}{r} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \left[ 1 - \frac{e^{-\beta_e r} + e^{-\beta_h r}}{2} \right] \quad (34)$$

$$= -\frac{e^2}{\epsilon_s r} - \frac{e^2}{2r} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) (e^{-\beta_e r} + e^{-\beta_h r}) \quad (35)$$

on  $\beta_i$  és la inversa del radi del polaró:  $\beta_i = \left( \frac{2m_i \omega}{\hbar} \right)^{1/2}$ ,  $1/\mu^* = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ ,  $m_i^* = m_i (1 + \alpha_i/6)$ .

A partir de  $V(r)$  podem definir:

$$\frac{1}{\epsilon(r_{eh})} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \left[ 1 - \frac{e^{-\beta_e r} + e^{-\beta_h r}}{2} \right] \quad (36)$$

equivalent a

$$\frac{1}{\epsilon(r_{eh})} = \frac{1}{\epsilon_s} + \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{1}{2} (e^{-\beta_e r} + e^{-\beta_h r}) \quad (37)$$

En resum, Haken mostra l'aparició d'un nou potencial atractiu tipus Yukawa (i.e., exponencial) que fa créixer la interacció a curtes distàncies respecte de la interacció completament apantallada ( $\epsilon_s$ ) a distàncies llargues.

El potencial de Haken però s'ha vist que exagera l'energia d'enllaç de l'excitó. La font d'error en aquest potencial deriva de l'elecció de la funció variacional com un producte de dues autofuncions polaròniques (que, per tant, no inclou efectes de correlació).

Hi ha diversos intents d'amillorar el potencial de Haken, des de la correcció empírica de Bajaj (Solid State Comm. 15 (1974) 1221):

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_s r} - \frac{e^2}{2r} \left( \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_s} \right)^{3/5} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) (e^{-\beta_e r} + e^{-\beta_h r}) \quad (38)$$

al potencial de Pollman i Büttner (PRB 16 (1977) 4480) en que intervenen més paràmetres.

En general s'assumeix que els electrons es mouen molt més ràpid que els ions que l'envolten, de manera que el camp fonònic experimenta l'efecte d'una distribució electrònica estàtica (aproximació adiabàtica). En el cas d'una impuresa estàtica, l'apantallament ha de considerar-se complet ( $\epsilon_s$ ). Per exemple, en Atzmüller et al. PRB 10 (1979) 3118, en que un excitó està enllaçat a una impuresa neutra (sistema de tres electrons i una impuresa donora) el termes impuresa-electró no inclouen el potencial tipus Yukawa.

Finalment, la presència d'interfases dielèctriques (e.g. un QD enterrat en un medi) genera fonons tipus *bulk* i fonons superficials (LO i SO). Cal considerar separatament una i altra interacció (veure e.g. Melnikov i Flower PRB 64 (2001) 245320).

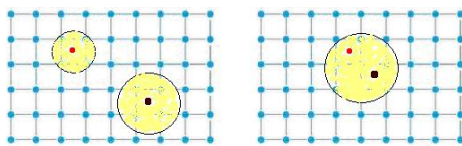


Figure 4: Polarons: la part de l'esquerra correspon a  $a_{ex} \gg R$  i la de la dreta al cas contrari  $a_{ex} \ll R$ .

Cal remarcar per acabar la secció que hi ha un paràmetre clau en la interacció efectiva: és el radi  $a_{ex}$  de l'excitó en comparació al radi  $R$  del polaró. Per exemple (Senger i Bajaj, PRB 68 (2003) 045313):

$$\lim_{a_{ex}/R \rightarrow 0} E_{self} = 0 \quad (39) \quad \lim_{a_{ex}/R \rightarrow \infty} E_{self} = -(\alpha_e + \alpha_h) \hbar \omega_{LO} \quad (40)$$

Cal distingir aquesta self-energy d'interacció partícula carregada - xarxa iònica del potencial d'autopolarització partícula carregada-interfase dielèctrica.

Anàlogament,  $\lim_{a_{ex}/R \rightarrow 0} V_{eff}(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_\infty r}$  etc.

## 7 Apantallament dielèctric dinàmic: biexcitó vs. $H_2$

Katriel i Murat (Phys. Lett. 71A (1979) 143) han mostrat en cas senzill i conegut que la consideració d'un apantallament dinàmic pot introduir canvis essencials en el comportament d'un sistema. Consideren l'anàleg de la molècula  $H_2$ , el biexcitó. De la mateixa manera que en el  $H_2$ , la diferent massa d'electró i forat permet l'aplicació de l'aproximació de Born-Oppenheimer (BO) i la representació de curves d'energia. En particular, estudien el triplet més estable, que en el cas de la molècula  $H_2$  és un estat *no lligat*.

Amb l'aproximació BO, anomenant 1 i 2 als electrons i A i B al nuclis, l'hamiltonià electrònic de la molècula  $H_2$  és,

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2m_e} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2B}} + \frac{1}{r} + \frac{1}{R} = -\frac{1}{2m_e} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \sum_{i=1}^2 \sum_{j=A}^B \frac{1}{r_{ij}} + \frac{1}{r} + \frac{1}{R} \quad (41)$$

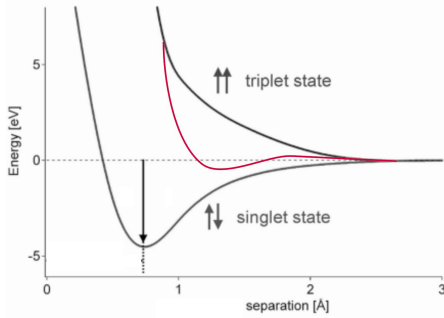
En el cas del biexcitó considerem la presència del medi que apantalla dinàmicament amb un potencial tipus Haken:

$$\frac{1}{r_{ij}} \rightarrow \frac{1}{r_{ij}} \left[ \frac{1}{\epsilon_s} + \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{1}{2} (e^{-\beta_e r_{ij}} + e^{-\beta_h r_{ij}}) \right] \quad (42)$$

$$\frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r} \left[ \frac{1}{\epsilon_s} + \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) e^{-\beta_e r} \right] \quad (43)$$

$$\frac{1}{R} \rightarrow \frac{1}{R} \left[ \frac{1}{\epsilon_s} + \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) e^{-\beta_h R} \right] \quad (44)$$

$$(45)$$



Introduint aquestes correccions en  $\hat{\mathcal{H}}$  i considerant una funció variacional per al triplet de menor energia  ${}^3\Sigma_u$  de la forma  $\Phi = \sum_{ij} c_{ij} \phi_{ij}$  on  $\phi_{ij} = \sigma_g^{(i)}(1)\sigma_u^{(j)}(2) - \sigma_g^{(i)}(2)\sigma_u^{(j)}(1)$ , troba un mínim estable (línia vermella en fig. 5) per a aquest triplet  ${}^3\Sigma_u$  de l'excitó [calcula el sistema definit pels paràmetres:  $\epsilon_s = 20$ ,  $\epsilon_\infty = 3.3$ ,  $m_e = 0.2$ ,  $m_h = 20$ ,  $\hbar\omega = 107$  meV ( $\omega$  és la freqüència del fonó òptic. Aquesta determina el radi del polaró (la inversa de  $\beta$ )  $\beta_{e,h} = \sqrt{2m_{e,h}\omega/\hbar}$ ]. La *binding energy* així calculada resulta ser 8.1 meV.

Figure 5: Singlet i triplet fonamentals en l'hidrogen i el biexcitó

El potencial de tipus Yukawa origina un orbital  $\sigma_u$  molt difús. Si  $\epsilon_s$  la fem petita, aleshores la binding energy decreix molt. En el límit  $\epsilon_s = \epsilon_\infty$  es recupera l'estat no enllaçant típic de la molècula  $H_2$ , degut a que desapareix la component tipus Yukawa del potencial.

Cal dir que aconseguir que el triplet de menor energia siga enllaçant implicaria la possibilitat de poder generar biexcitons triplets de llarga vida mitjana perquè la simetria d'espín impediria el decaïment al singlet fonamental.