9 Polaritonen

9.a Lagrange-Funktion

In diesem Abschnitt wollen wir das Polariton-Problem, das heißt die Kopplung zwischen optischen Phononen und elektrodynamischem Feld in eine quantenmechanische Form bringen. Wir tun das aus zwei Gründen: Zum einen ist es eine gute Gelegenheit, das elektromagnetische Feld in quantisierter Form einzuführen, zum anderen kann man an dieser Stelle lernen, wie man mit bosonischen Erzeugern und Vernichtern umgeht, wenn der Hamilton-Operator sich nicht als Teilchenzahl-Operator schreiben lässt. Allerdings behandeln wir das Problem in etwas vereinfachter Form: Wir vernachlässigen den elektronischen Anteil zur Dielektrizitätskonstante und berücksichtigen hier den Unterschied zwischen lokalem und mittlerem elektrischen Feld nicht.

Wir gehen aus von der Lagrange-Dichte für das elektromagnetische Feld

$$L_{\mathrm{F}} = -\frac{1}{16\pi}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = -\frac{1}{16\pi}(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu)(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) = -\frac{1}{8\pi}(\mathrm{rot}\mathbf{A})^2 + \frac{1}{8\pi}(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \mathrm{grad}\Phi)^2. \quad (9.1)$$

Der rein mechanische Anteil der Lagrange-Funktion lässt sich

$$L_{\mathrm{M}} = \rho_1\dot{\boldsymbol{\eta}}_1^2 + \rho_2\dot{\boldsymbol{\eta}}_2^2 - \frac{C}{2}(\boldsymbol{\eta}_1 - \boldsymbol{\eta}_2)^2 \quad (9.2)$$

schreiben. Wir zerlegen in den akustischen und optischen Anteil (der Einfachheit halber haben wir hier nur den Beitrag zur potentiellen Energie mitgenommen, der von der Verschiebung der beiden Untergitter gegeneinander herrührt.)

$$\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_{\mathrm{a}} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{o}}, \quad \boldsymbol{\eta}_2 = \boldsymbol{\eta}_{\mathrm{a}} - \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{o}}. \quad (9.3)$$

Dann schreibt sich der mechanische Anteil der Lagrange-Funktion

$$L_{\mathrm{M}} = \frac{\rho_1+\rho_2}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_{\mathrm{a}}^2 + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_{\mathrm{o}}^2 - \frac{C}{2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{o}}^2, \quad \hat{\rho} = \frac{\rho_1\rho_2}{\rho_1+\rho_2}, \quad (9.4)$$

wobei wir $\hat{\rho}$ als reduzierte Massendichte bezeichnen können. Im Folgenden lassen wir den akustischen Freiheitsgrad $\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{a}}$ weg und lassen bei dem optischen Freiheitsgrad den Index $_{\mathrm{o}}$ weg.

An dieses wollen wir nun die optischen Phononen ankoppeln. Dieser Kopplungsterm hat die Form

$$L_{\mathrm{K}} = -\frac{1}{c}A^\mu j_\mu = \frac{1}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{j}_{\mathrm{P}} - \Phi\rho_{\mathrm{P}} \quad (9.5)$$

Mit der Polarisations-Stromdichte $\mathbf{j}_{\mathrm{P}} = \dot{\mathbf{P}}$ und der Polarisations-Ladungsdichte $\rho_{\mathrm{P}} = -\mathrm{div}\mathbf{P}$ folgt

$$L_{\mathrm{K}} = \frac{1}{c}\mathbf{A}\cdot\dot{\mathbf{P}} + \Phi\mathrm{div}\mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{P}) + \nabla(\phi\mathbf{P}) - (\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \mathrm{grad}\Phi)\cdot\mathbf{P}. \quad (9.6)$$

Da partielle Zeit- und Ortsableitungen nichts zu den Bewegungsgleichungen beitragen, können wir sie vernachlässigen. Berücksichtigen wir jetzt, dass $\mathbf{P} = nq(\boldsymbol{\eta}_1 - \boldsymbol{\eta}_2) = nq\boldsymbol{\eta}$, dann folgt

$$L_{\mathrm{K}} = -nq(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \mathrm{grad}\Phi)\cdot\boldsymbol{\eta}. \quad (9.7)$$

Zur weiteren Behandlung zerlegen wir die Vektorfelder in ihre longitudinalen und transveralen Anteile. Entwickeln wir $\boldsymbol{\eta}$ nach seinen Fourier-Komponenten,

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}}\sum_{\mathbf{k}}\boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (9.8)$$

so bezeichnen wir die Anteile von $\boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}}$, die parallel zu $\mathbf{k}$ sind, als longitudinal, die senkrecht dazu stehenden als transversal. Weiter wollen wir die Coulomb-Eichung $\mathrm{div}\mathbf{A} = 0$ verwenden, dann ist das

Vektorpotential rein transversal, und die Lagrange-Funktion kann in einen Anteil, der nur longitudinale Komponenten enthält, und einen, der nur transversale Komponenten enthält, zerlegt werden,

$$L = L_{\mathrm{F}} + L_{\mathrm{K}} + L_{\mathrm{M}} = L_{\mathrm{l}} + L_{\mathrm{t}} \tag{9.9}$$

mit

$$\begin{aligned} L_{\mathrm{l}} &= \frac{1}{8\pi}(\mathrm{grad}\Phi)^2 - nq\,\mathrm{grad}\Phi \cdot \boldsymbol{\eta}_{\mathrm{l}} + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_{\mathrm{l}}^2 - \frac{C}{2}\eta_{\mathrm{l}}^2 && (9.10)\\ L_{\mathrm{t}} &= -\frac{1}{8\pi}(\mathrm{rot}\mathbf{A})^2 + \frac{1}{8\pi c^2}\dot{\mathbf{A}}^2 - \frac{nq}{c}\dot{\mathbf{A}}\dot{\boldsymbol{\eta}}_{\mathrm{t}} + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_{\mathrm{t}}^2 - \frac{C}{2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{t}}^2. && (9.11)\end{aligned}$$

Wir untersuchen zunächst den longitudinalen Anteil. Die Variation nach dem Coulomb-Potential ergibt

$$\frac{\delta L}{\delta\Phi} - \nabla\left(\frac{\delta L}{\delta\nabla\Phi}\right) = -\mathrm{div}\left(\frac{1}{4\pi}\mathrm{grad}\Phi + nq\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{l}}\right) = 0. \tag{9.12}$$

Dies ist die Gleichung für das Coulomb-Potential. Hierdurch wird $\mathrm{grad}\Phi - 4\pi nq\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{l}} = 0$ und man kann

$$L_{\mathrm{l}} = \frac{1}{8\pi}(\mathrm{grad}\Phi - 4\pi nq\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{l}})^2 + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_{\mathrm{l}}^2 - \frac{C + 4\pi n^2q^2}{2}\eta_{\mathrm{l}}^2 \tag{9.13}$$

schreiben, wobei das erste Quadrat identisch verschwindet und auch unter Variation verschwindet, so dass man es weglassen kann. Dann bleibt noch die Lagrangefunktion für den harmonischen Oszillator mit dem Freiheitsgrad η_{l} übrig. Man erhält das Quadrat der longitudinalen Eigenfrequenz

$$\omega_{\mathrm{l}}^2 = \frac{C}{\hat{\rho}} + \frac{4\pi n^2 q^2}{\hat{\rho}}. \tag{9.14}$$

Falls bei der Bewegung der beiden Untergitter gegeneinander kein Dipolmoment entsteht ($q = 0$, Beispiel Diamant), dann ist ω_{l} durch den mechanischen Anteil $\omega_0 = \sqrt{C/\hat{\rho}}$ gegeben. Falls der mechanische Anteil nicht vorhanden wäre, dann bliebe die Schwingung mit der Plasmafrequenz $\omega_{\mathrm{P}} = nq\sqrt{4\pi/\hat{\rho}}$. Insgesamt hat man also

$$\omega_{\mathrm{l}}^2 = \omega_0^2 + \omega_{\mathrm{P}}^2. \tag{9.15}$$

Wir betrachten nun den transversalen Anteil. Wir entwickeln das Vektorpotential

$$\mathbf{A} = \frac{1}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\lambda,\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{\lambda} A_{\lambda,\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{9.16}$$

wobei λ zwei transversale Polarisationen beschreibt. Wir verlangen

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{\lambda} \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{\lambda *} = \mathbf{e}_{-\mathbf{k}}^{\lambda}, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{\lambda} \cdot \mathbf{e}_{-\mathbf{k}}^{\lambda\prime} = \delta_{\lambda,\lambda'}. \tag{9.17}$$

Damit die Felder reell sind, verlangt man z.B. $\boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}}^* = \boldsymbol{\eta}_{-\mathbf{k}}$. Wir finden dann den transversalen Anteil der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L}_{\mathrm{t}} = \sum_{\lambda,\mathbf{k}} \left(-\frac{1}{8\pi}k^2 A_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{8\pi c^2}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}\dot{A}_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}}\dot{\eta}_{\lambda-\mathbf{k}} - \frac{C}{2}\eta_{\lambda\mathbf{k}}\eta_{\lambda-\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}\eta_{\lambda-\mathbf{k}} \right). \tag{9.18}$$

Hieraus erhält man die zu $\mathbf{A}$ und $\boldsymbol{\eta}$ kanonisch konjugierten Impulse

$$M_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{\mathrm{d}\mathcal{L}_{\mathrm{t}}}{\mathrm{d}\dot{A}_{\lambda-\mathbf{k}}} = \frac{1}{4\pi c^2}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\eta_{\lambda\mathbf{k}}, \tag{9.19}$$

$$\Pi_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{\mathrm{d}\mathcal{L}_{\mathrm{t}}}{\mathrm{d}\dot{\eta}_{\lambda-\mathbf{k}}} = \hat{\rho}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} \tag{9.20}$$

Mittels der Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}M_{\lambda\mathbf{k}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\mathcal{L}_{\mathrm{t}}}{\partial A_{\lambda-\mathbf{k}}}, \quad \frac{\mathrm{d}\Pi_{\lambda\mathbf{k}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\mathcal{L}_{\mathrm{t}}}{\partial\eta_{\lambda-\mathbf{k}}} \tag{9.21}$$

folgt

$$\frac{1}{4\pi c^2}\ddot{A}_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} = -\frac{1}{4\pi}k^2 A_{\lambda\mathbf{k}}, \tag{9.22}$$

$$\hat{\rho}\ddot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} = -C\eta_{\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}. \tag{9.23}$$

Setzt man wieder das Zeitverhalten proportional zu $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ an, so muss die charakteristische Matrix

$$\begin{pmatrix} -\frac{\omega^2}{4\pi c^2} + \frac{k^2}{4\pi} & \frac{nq\mathrm{i}\omega}{c} \\ -\frac{nq\mathrm{i}\omega}{c} & -\omega^2\hat{\rho} + C \end{pmatrix} \tag{9.24}$$

verschwinden, woraus sich die Eigenwertgleichung

$$\omega^4 - \omega^2\omega_\mathrm{l}^2 - \omega^2 c^2 k^2 + c^2 k^2 \omega_0^2 = 0 \tag{9.25}$$

für ω ergibt.

9.b Hamilton-Operator und Quantisierung

Wir können nun den Hamilton-Operator für den transversalen Anteil bestimmen,

$$H_\mathrm{t} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} (M_{\lambda-\mathbf{k}}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}} + \Pi_{\lambda-\mathbf{k}}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}}) - \mathcal{L}_\mathrm{t} \tag{9.26}$$

$$= \sum_{\lambda\mathbf{k}} \Big(2\pi c^2 M_{\lambda\mathbf{k}}M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{k^2}{8\pi}A_{\lambda\mathbf{k}}A_{\lambda-\mathbf{k}} + 4\pi cnq\eta_{\lambda\mathbf{k}}M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{2\hat{\rho}}\Pi_{\lambda\mathbf{k}}\Pi_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{2}(C + 4\pi q^2 n^2)\eta_{\lambda\mathbf{k}}\eta_{\lambda-\mathbf{k}}\Big). \tag{9.27}$$

Als kanonisch konjugierten Variablen bestehen zwischen M und A die Kommutator-Relationen

$$[M_{\lambda\mathbf{k}}, A_{\lambda'-\mathbf{k}'}] = \mathrm{i}\hbar\delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \tag{9.28}$$

Damit können wir analog zum harmonischen Oszillator Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Photonen einführen. Ohne Kopplung zur Materie haben wir für das elektromagnetischem Feld

$$H_\mathrm{Ft} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \Big(2\pi c^2 M_{\lambda\mathbf{k}}M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{k^2}{8\pi}A_{\lambda\mathbf{k}}A_{\lambda-\mathbf{k}}\Big) = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar ck(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}b_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) \tag{9.29}$$

mit

$$A_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k}}(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} + b_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad M_{\lambda\mathbf{k}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar k}{8\pi c}}(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} - b_{\lambda-\mathbf{k}}) \tag{9.30}$$

und

$$[b_{\lambda,\mathbf{k}}, b^\dagger_{\lambda',\mathbf{k}'}] = \delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad [b_{\lambda,\mathbf{k}}, b_{\lambda',\mathbf{k}'}] = 0, \quad [b^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}, b^\dagger_{\lambda',\mathbf{k}'}] = 0. \tag{9.31}$$

Wir haben jetzt tatsächlich diskrete Anzahlen von Photonen, die mit den Photonenzahl-Operatoren $b^\dagger b$ gemessen werden. Die zugehörige Energie eines Photons ist $\hbar ck = \hbar\omega$. Wir haben bei dieser Rechnung die Polarisation durch die Elektronen(bänder) nicht mit berücksichtigt.

Für die Gitterschwingungen können wir nun wieder ähnlich wie früher, aber bereits unter Einbeziehung des Polarisations-Termes proportional zu $4\pi q^2 n^2$ mit $C + 4\pi q^2 n^2 = \hat{\rho}\omega_\mathrm{l}^2$ die Erzeuger und Vernichter für die Phononen einführen

$$\eta_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\mathrm{l}}}\hat{\rho}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} + a_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad \Pi_{\lambda\mathbf{k}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar\omega_\mathrm{l}\hat{\rho}}{2}}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} - a_{\lambda-\mathbf{k}}), \tag{9.32}$$

so dass der Phononen-Beitrag zum Hamilton-Operator

$$H_\mathrm{Pt} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar\omega_\mathrm{l}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) \tag{9.33}$$

lautet.

Zwischen beiden Beiträgen gibt es die Kopplung

$$H_{\mathrm{Kt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} 4\pi c n q \eta_{\lambda\mathbf{k}} M_{\lambda-\mathbf{k}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} + a_{\lambda-\mathbf{k}})(b^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} - b_{\lambda\mathbf{k}}) \tag{9.34}$$

mit

$$\beta = nq\sqrt{\frac{\pi c}{\omega_{\mathrm{l}}\hat{\rho}}}. \tag{9.35}$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Polaritonen sind nun Linearkombinationen der bisherigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

$$\alpha^\dagger_{\mathbf{k}} = w a^\dagger_{\mathbf{k}} + x b^\dagger_{\mathbf{k}} + y a_{-\mathbf{k}} + z b_{-\mathbf{k}}. \tag{9.36}$$

Sie müssen

$$[H, \alpha^\dagger_{\mathbf{k}}] = \hbar\omega_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} \tag{9.37}$$

erfüllen, wobei $\omega_{\mathbf{k}}$ die Anregungsfrequenzen sind. Für positive $\omega_{\mathbf{k}}$ hat man tatsächlich Erzeugungs-Operatoren, für negative Vernichter. Dass dies Erzeugungs-(und Vernichtungs-)Operatoren sind, sieht man folgendermaßen: Es sei $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Dann gilt

$$H(\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}|\psi\rangle) = [H, \alpha^\dagger_{\mathbf{k}}]|\psi\rangle + \alpha^\dagger_{\mathbf{k}} H\psi\rangle = (\hbar\omega_{\mathbf{k}} + E)(\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}|\psi\rangle). \tag{9.38}$$

Daher ist der Zustand $\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}|\psi\rangle$ Eigenzustand von H mit der Energie $\hbar\omega_{\mathbf{k}} + E$, also mit einer um $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ erhöhten Energie.

Man berechnet daher die Kommutatoren

$$\begin{aligned}
[H, a^\dagger_{\mathbf{k}}] &= \hbar\omega_{\mathrm{l}} a^\dagger_{\mathbf{k}} + \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(b^\dagger_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}}), && (9.39)\\
[H, a_{-\mathbf{k}}] &= -\hbar\omega_{\mathrm{l}} a_{-\mathbf{k}} - \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(b^\dagger_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}}), && (9.40)\\
[H, b^\dagger_{\mathbf{k}}] &= \hbar ck b^\dagger_{\mathbf{k}} - \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^\dagger_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}), && (9.41)\\
[H, b_{-\mathbf{k}}] &= -\hbar ck b_{-\mathbf{k}} - \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^\dagger_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}). && (9.42)
\end{aligned}$$

Die Eigenfrequenzen ergeben sich als Eigenwerte der Determinante

$$\begin{pmatrix}
\omega_{\mathrm{l}} & 0 & \mathrm{i}\beta\sqrt{k} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k}\\
0 & -\omega_{\mathrm{l}} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & \mathrm{i}\beta\sqrt{k}\\
-\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & ck & 0\\
-\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & 0 & -ck
\end{pmatrix}. \tag{9.43}$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\omega^4_{\mathbf{k}} - \omega^2_{\mathbf{k}}(c^2k^2 + \omega^2_{\mathrm{l}}) + \omega^2_0 c^2 k^2 = 0, \tag{9.44}$$

wobei $\omega^2_{\mathrm{l}} c^2 - 4c\omega_{\mathrm{l}}\beta^2 = \omega^2_0 c^2$ verwendet wurde. Damit ergeben sich wieder die gleichen Eigenfrequenzen.

Grundzustand

Wie kann man den Grundzustand für das System beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$H_{\mathrm{t}} = H_{\mathrm{Ft}} + H_{\mathrm{Pt}} + H_{\mathrm{Kt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar ck(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} b_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathrm{l}}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda\mathbf{k}} \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} + a_{\lambda-\mathbf{k}})(b^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} - b_{\lambda\mathbf{k}}) \tag{9.45}$$

angeben? Er hat die Form

$$|\psi\rangle = \mathrm{e}^B|0\rangle, \tag{9.46}$$

wobei B bilinear in den Erzeugungs-Operatoren $a^\dagger$ und $b^\dagger$ ist

$$B = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mathbf{k}}(u_{\lambda\mathbf{k}} a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} + w_{\lambda\mathbf{k}} b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} b^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} + v_{\lambda\mathbf{k}}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} b^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} + b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}}) \tag{9.47}$$

Hierzu verwendet man

$$He^B = e^B \sum_n \frac{1}{n!} H_n, \quad H_0 = H, \quad H_n = [H_{n-1}, B]. \tag{9.48}$$

Wir wollen zunächst diese Beziehung zeigen. Dazu setzen wir die Entwicklung nach λ an

$$e^{-\lambda B} H e^{\lambda B} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} H_n. \tag{9.49}$$

Wir differenzieren die linke Seite nach λ und erhalten $[e^{-\lambda B} H e^{\lambda B}, B]$. Setzen wir nun die Entwicklung ein und differenzieren die rechte Seite von (9.49), so folgt

$$\sum_n \frac{\lambda^n}{n!}[H_n, A] = \sum_n \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} H_n. \tag{9.50}$$

Setzt man nun links und rechts die Koeffizienten von λ^{n-1} gleich und berücksichtigt, dass für $\lambda = 0$ in (9.48) $H = H_0$ übrig bleibt, so ist (9.48) gezeigt.

Wenn nun B bilinear in den Erzeugungs-Operatoren ist, dann ergibt der Kommutator $H_1 = [H, B]$ wieder einen bilinearen Ausdruck von Erzeugungs-Operatoren, auch einen, in dem ein Faktor Erzeuger und einer Vernichter ist und eine Konstante. Bilden wir nun $H_2 = [H_1, B]$, so ist dieser Ausdruck bilinear in den Erzeugungs-Operatoren und H_3 und höhere verschwinden, da H_2 und B kommutiert, da alle Erzeugungs-Operatoren miteinander kommutieren. Damit lautet die Gleichung

$$He^B|0\rangle = e^B(H + [H, B] + \frac{1}{2}[[H, B], B])|0\rangle \tag{9.51}$$

Damit wir einen Eigenzustand erhalten, muss der Anteil von $H + [H, B] + \frac{1}{2}[[H, B], B]$, der bilinear in den Erzeugungs-Operatoren ist, verschwinden. Das ergibt die Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten in B, die Konstante ergibt die Energie und die Terme von $H + [H, B] + \frac{1}{2}[[H, B], B]$, die einen Vernichter enthalten, ergeben angewandt auf $|0\rangle$ ohnehin Null. Man kann stattdessen auch fordern, dass die Vernichter α angewandt auf den Grundzustand null ergeben, das heißt dann, dass sich die Erzeugungs-Operatoren $a^\dagger$ und $b^\dagger$ in $\alpha + [\alpha, B]$ wegheben müssen.