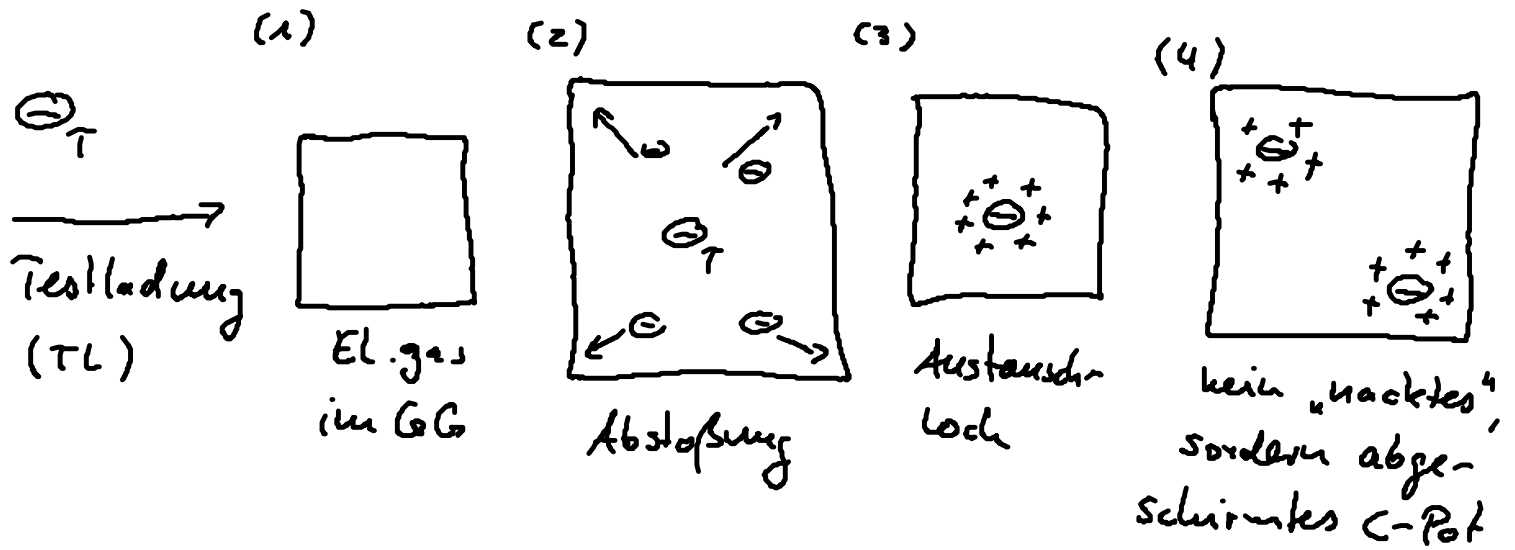


# 5. Plasmonabschirmung

- Frage: Gibt es eff. Einteilchenbild (1T) für ein EL im EL.gas bzw. eff. 1T-Hamiltonian?
- Idee: Präsenz vieler EL schirmt C-Potential ab.



- Berechnung der Plasmonabschirmung:

A um TL ergänzen → eff. Pot. für TL berechnen

$$H_T = e \phi^T(\underline{r}_T) \xrightarrow{\text{2. Q'sierung}} \hat{H}_T = e \sum_{\underline{k}_1, \underline{k}_2} a_{\underline{k}_1}^+ a_{\underline{k}_2} \phi_{\underline{k}_1, \underline{k}_2}^T$$

$$\text{Poissongl.: } \Delta \phi^T = -\frac{\rho_{\text{eff}}^T}{\epsilon_0} = -\frac{e}{\epsilon_0} \delta(\underline{r} - \underline{r}_T) \quad | \text{FT}$$

$$-q^2 \phi^T = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho_D^T(q) \quad \rho_D^T(q) = \frac{e}{V} \int d^3r \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_T) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{e}{V}$$

$$\phi^T = \frac{\rho_D^T(r)}{\epsilon_0 q^2}$$

$$\phi_{\underline{k}_1 \underline{k}_2}^T = \frac{1}{V} \int dV e^{-i \frac{(\underline{k}_1 - \underline{k}_2) \cdot \underline{r}}{q}} \phi^T(r) = \phi^T(q) = \frac{e}{\epsilon_0 V q^2} = V_q$$

$$\Rightarrow \hat{H}_T = \sum_{\substack{\underline{k}_1 \underline{k}_2 \\ \underline{k}_1 = \underline{k}_2}} a_{\underline{k}_1}^\dagger a_{\underline{k}_2} \frac{e^2}{\epsilon_0 V |\underline{k}_1 - \underline{k}_2|^2} = \sum_{\underline{k} \neq \underline{q}} V_q a_{\underline{k}-\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}} \quad \begin{matrix} \underline{k}_1 = \underline{k}_2 = \underline{q} \\ \underline{k}_2 = \underline{k} \end{matrix}$$

• Berechnung der Dichte:

$$i\hbar \partial_t \langle a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}} \rangle = \left\langle \left[ a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}}, \underline{H}_e + \underline{H}_{e-e} + \underline{H}_T \right] \right\rangle$$

$$\rho_{\underline{k}} = \langle a_{\underline{k}}^\dagger a_{\underline{k}} \rangle = \frac{(\tilde{\epsilon}_{\underline{k}} - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}+\underline{q}}) \langle a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}} \rangle + V_q (\rho_{\underline{k}+\underline{q}} - \rho_{\underline{k}}) \sum_{\underline{k}'} \langle a_{\underline{k}'+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}'} \rangle}{+ V_q (\rho_{\underline{k}+\underline{q}} - \rho_{\underline{k}})} \quad \text{beeinflusst Anordnung der El.}$$

→ Fourier  $e^{-i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}}$  und  $\sum_{\underline{k}}$

$$-i\omega \rho_D(q) = (\tilde{\epsilon}_{\underline{k}} - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}+\underline{q}}) \rho_D(q) + \sum_{\underline{k}} (\rho_{\underline{k}+\underline{q}} - \rho_{\underline{k}}) [V_q \rho_D(q) + V_q]$$

$$\Rightarrow \rho_D(q) = \sum_{\underline{k}} \frac{(\rho_{\underline{k}+\underline{q}} - \rho_{\underline{k}})}{\tilde{\epsilon}_{\underline{k}} - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}+\underline{q}} - i\omega} V_q [1 + \rho_D(q)] \quad \rho_D(q) = \sum_{\underline{k}'} \langle a_{\underline{k}'+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}'} \rangle$$

$P_q$  Polarisationsfkt.

$$S_D(q) = V_q P_q + V_q P_q S_D(q)$$

$$\rightarrow S_D(q) = \frac{V_q P_q}{1 - V_q P_q}$$

Bestimmungsgl. für Fourierkomponenten der LD des EL gases

• Aufstellen des eff. 1T-H-Operators:

$$H = H_c + H_{e-e} \rightarrow H = H_c + H_{\text{eff}}$$

Welches  $\phi_{\text{eff}}$  gehört dazu?

$$\text{mit } H_{\text{eff}} = \sum_{kq} \phi_{\text{eff}}(q) a_{k+q}^\dagger a_k$$

$$\Delta \phi_{\text{eff}}(r) = - \frac{e}{\epsilon_0} \delta(r-r') - \frac{e}{\epsilon_0} S_D(r)$$

TL EL gas

$$\text{FT: } \phi_{\text{eff}}(q) = \frac{e}{V \epsilon_0 q^2} + \frac{e}{V \epsilon_0 q^2} S_D(q) = \left(1 + \underline{S_D(q)}\right) V_q$$

einsetzen

$$H_{\text{eff}} = \sum_{kq} \left(1 + \frac{V_q P_q}{1 - V_q P_q}\right) V_q a_{k+q}^\dagger a_k$$

jetzt Hauptnenner

$$= \sum_{kq} \frac{V_q}{\epsilon_q} a_{k+q}^\dagger a_k \quad \text{mit } \epsilon_q = (1 - V_q P_q)$$

• Bemerkungen:

(a)  $\epsilon_q$  ist die Dielektrische Fkt. und  $V_q$  (Uachtc) wird ersetzt durch ein "abgeschirmtes" C-Pot  $\frac{V_q}{\epsilon_q} = W_q$

(b) Lindhard-Formel: <sup>Fermi-  
fkt.</sup>  $\epsilon_q = 1 - V_q \sum_{k\sigma} \frac{f_{k+\sigma} - f_{k\sigma}}{\hbar\omega + (\epsilon_{k+\sigma} - \epsilon_{k\sigma})}$

(c) Abschirmung ist frequenzabhängig  $P_q = P_q(\omega)$   
 $\rightarrow$  -u- hat zeitl. Dynamik

(d) klass. Grenzfall  $q \rightarrow 0$  (stat. Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$ )

$$\begin{aligned} \epsilon_q &= 1 - V_q \sum_k \frac{f_{k+q} - f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} && \text{Taylor 1. Ordnung in } q \\ &\approx 1 - V_q \sum_k \sum_\alpha \frac{q^\alpha \partial_\alpha f_k}{\frac{\hbar^2}{m} k \cdot q} && f_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \\ &= 1 - V_q \sum_k \sum_\alpha \frac{q^\alpha \partial_\alpha \epsilon_k \partial_{\epsilon_k} f_k}{\frac{\hbar^2}{m} k^\alpha q^\alpha} && \partial_\alpha \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k_\alpha}{m} \\ &= 1 - V_q \sum_k \partial_{\epsilon_k} f_k \end{aligned}$$

$$= 1 + V_q \partial_\mu \underbrace{\sum_k f_k}_{N \text{ Teilchenzahl}} = 1 + \frac{e^{\epsilon}}{V_0 q^2} \partial_\mu N$$

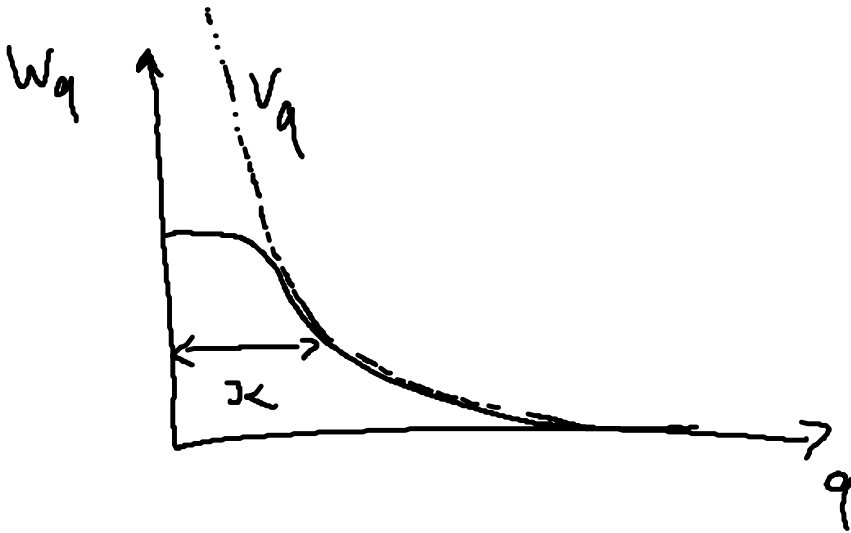
$$n = \frac{N}{V}$$

$$\epsilon_q = 1 + \left( \frac{\kappa}{q} \right)^2 \text{ mit Abschirmlänge } \kappa = \sqrt{\frac{e^2}{\epsilon_0} \partial_\mu n}$$

Damit folgt für das eff. 1T-Pot:

$$W_q = \frac{V_q}{\epsilon_1} = \frac{V_q}{1 + \left(\frac{\kappa}{q}\right)^2} \quad \left| \frac{q^2}{q^2} \right.$$

$$= \frac{e^2}{\epsilon_0 V} \frac{1}{q^2 + \kappa^2} \quad \Rightarrow \text{TL hat anderes Potential als im Vakuum } \sim \frac{1}{q^2}$$

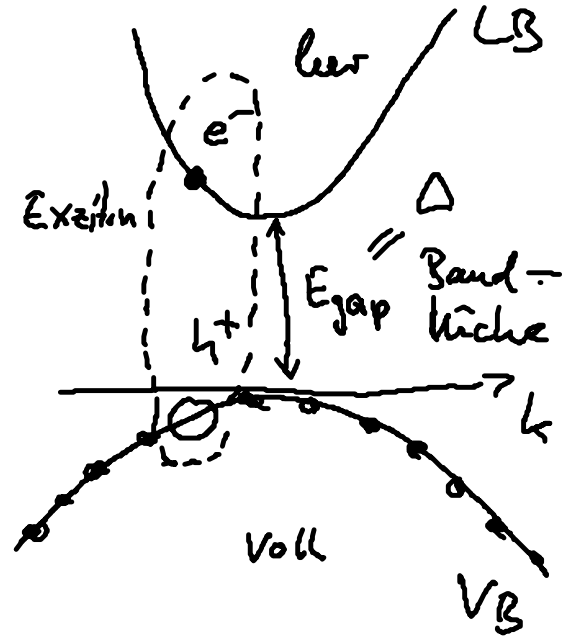


## 6. Exzitonen

C-WV sorgt im HL für die Ausbildung von gebundenen Zuständen zw Leitungsband EL und Valenzband Löcher

→ Quasiteilchen: Exziton (unne Masse u. Energie)

- Annahmen:
  - 2 Bandmodell  $\lambda=c, v$
  - WW zw EL in einem Band vernachlässigen
  - C-WW zw. EL und Löchern



• Hamiltonian:  $H = H_c + H_{c-v}$

$$H = \sum_{\underline{k}} \epsilon_{v\underline{k}} a_{v\underline{k}}^\dagger a_{v\underline{k}} + \epsilon_{c\underline{k}} a_{c\underline{k}}^\dagger a_{c\underline{k}}$$

Arbeit in  $\lambda$ -Summe  
so daß nur WW  
zw. EL in c und  
v

$$+ \sum_{\substack{\underline{k}_1 \underline{k}_2 \\ \underline{k}_3 \underline{k}_4}} \sqrt{v_{\underline{k}_1 \underline{k}_2} c_{\underline{k}_2} v_{\underline{k}_3 \underline{k}_4} c_{\underline{k}_4}} a_{v\underline{k}_1}^\dagger a_{c\underline{k}_2}^\dagger a_{v\underline{k}_3} a_{c\underline{k}_4}$$

- eff. Massennäherung:  $\epsilon_{v\underline{k}} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$   $\epsilon_{c\underline{k}} = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$

eff. Massen

• EL-Loch-Bild: Loch im VB erzeugen, wenn dort ein EL verwickelt wurde

$$\Rightarrow a_{v\underline{k}} = h_{\underline{k}}^\dagger \quad a_{c\underline{k}} = e_{\underline{k}} \quad \text{erfüllen Fermioni. Vertauschungsrol.}$$

$$a_{v\underline{k}}^\dagger = h_{\underline{k}} \quad a_{c\underline{k}}^\dagger = e_{\underline{k}}^\dagger$$

H mit EL und Löchern:

$$H = \sum_k \frac{t^2 \hbar^2}{2m v} h_k^\dagger h_k + \left( \frac{t^2 \hbar^2}{2m v} + \Delta \right) e_k^\dagger e_k$$

pos. eff. Masse

$$+ \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V_{34}^{12} h_{k_1}^\dagger e_{k_2}^\dagger h_{k_3}^\dagger e_{k_4}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{S_{k_1 k_3} - h_{k_3}^\dagger h_{k_1}}$

C-WW im EL-Loch  
Bild

$$= \dots - \underbrace{\sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V_{34}^{12} e_{k_2}^\dagger e_{k_4} S_{k_1 k_3}}_{\text{Renormalisierung der IT-Energie}} + \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V_{34}^{12} h_{k_3}^\dagger h_{k_1}^\dagger e_{k_2}^\dagger e_{k_4}$$

- Grundzustand : VB voll mit EL (keine Löcher)  
LB leer

$$|\phi_0\rangle = \prod_k a_{v k}^\dagger |0\rangle = \prod_k h_k |0\rangle \quad \left. \begin{array}{l} \text{Vakuum-} \\ \text{Zustand} \end{array} \right\}$$

- Grundzustandsenergie :  $E_0 = \sum_k \epsilon_{v k}$

Anregungen nur durch Übergänge von EL vom VB ins LB

- Angeregte Zustand : EL-Loch-Paare

$$|\phi\rangle = \sum_{kk'} d_{kk'} e_k^\dagger h_{k'}^\dagger |\phi_0\rangle$$

Linearkombi über alle Mgl. El-Loch-Paare zu erzeugen

→ Koeffizienten  $d_{kk'}$  bestimmen

$$H|\phi\rangle = \sum_{kk'} d_{kk'} (\epsilon_{ck} - \epsilon_{vk'}) e_k^\dagger h_{k'}^\dagger |\phi_0\rangle + E_0 |\phi_0\rangle - \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V \begin{matrix} v_{k_1} c_{k_2} \\ v_{k_3} c_{k_4} \end{matrix} d_{k_1 k_2} e_{k_1}^\dagger h_{k_2}^\dagger |\phi_0\rangle$$

Nutzen der Vertauschungsrelation und  $e|\phi_0\rangle = 0$

$$H_{e,v}|\phi\rangle = -\epsilon_{vk'} |\phi\rangle + \underbrace{\sum_{k_1} \epsilon_{vk_1}}_{E_0} |\phi\rangle$$

Analog für  $H_{e,c}$

$$H_{e,c}|\phi\rangle = \epsilon_{ck} |\phi\rangle$$

• Eigenwertgl.:  $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

$$\sum_{kk'} \left\{ d_{kk'} (E_0 - E + \epsilon_{ck} - \epsilon_{vk'}) - \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} d_{k_1 k_2} V \begin{matrix} v_{k_1} c_{k_2} \\ v_{k_3} c_{k_4} \end{matrix} \right\} \underbrace{e_k^\dagger h_{k'}^\dagger |\phi_0\rangle}_{\text{ONS bilden}} = 0$$

→  $\stackrel{!}{=} 0$

• Grenzfall  $V = 0$ :

$$\delta E = E - E_0 = \epsilon_{ck} - \epsilon_{vk'} = \Delta + \frac{t_k^2 \hbar^2}{2m_c} + \frac{t_{k'}^2 \hbar^2}{2m_v}$$



Der niedrigste angeregte Zustand liegt um Bandbreite  $\Delta$  über der Grundzustandsenergie  $E_0$  ( $k=k'=0$ )

•  $V \neq 0$ : Anregungsenergie gegenüber WW-freien

Ladungsträgern abgesenkt um  $\sum_{k_2, k_4} \alpha_{k_2, k_4} V_{k_2, k_4} c_{k_1} c_{k_3}$

→ C-Elemente einsetzen  $V_{34}^{12} = \frac{e^2}{\epsilon_0 V} \frac{1}{|k_2 - k_4|} \delta_{k_1 + k_2, k_3 + k_4}$

$$\alpha_{k, k'} (\delta E - \Delta) = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_v} \right) \alpha_{k, k'} - \sum_q \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2} \alpha_{k, k' + q}$$

$k_2 = k$   
 $k_3 = k'$

Im Ortsraum ist die EW-Gl für  $\alpha_{k, k'}$  äquivalent zur 2T-Schrödinger gl:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla_{r_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_{r_2}^2 - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} \right) \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = E \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$$

• Ansatz:  $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{k_1, k_2} \alpha_{k_1, k_2} e^{i(k_1 \underline{r}_1 + k_2 \underline{r}_2)}$

2T-Wellenfkt.  $\hat{=}$  linear kombi ebener Wellen

$$\sum_{k_1, k_2} \left[ \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_v} - E - \underbrace{\sum_q \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2} e^{iq(r_1 - r_2)}}_{\text{FT v. } \frac{1}{|\Omega r \Omega_2|}} \right] \alpha_{k_1, k_2} e^{i(k_1 r_1 - k_2 r_2)} = 0$$

$$\sum_{k_1, k_2} \left[ \left( \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_v} - E \right) \alpha_{k_1, k_2} - \sum_q \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2} \alpha_{k_1 - q, k_2 + q} \right] e^{i(k_1 r_1 - k_2 r_2)} = 0$$

$\left. \begin{matrix} k_1 \rightarrow k_1 - q \\ k_2 \rightarrow k_2 + q \end{matrix} \right\} \rightarrow e^{iq(r_1 - r_2)} \text{ verschwindet}$

EL und Loch verhalten sich wie ZT mit Masse  $m_v$  u  $m_c$  mit entgegengesetzten Elementarladungen.

$\Rightarrow$  eff. H-Problem: Loch im VB  $\hat{=}$  Protonen

(1) Einführung neuer Koordinaten

SP Koord. :  $\underline{R} = \frac{m_c \underline{r}_1 + m_v \underline{r}_2}{m_c + m_v}$

R Koord. :  $\underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$

red. Masse  
 $\mu = \frac{m_c m_v}{m_c + m_v}$

(2) S. gl.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2(m_c + m_v)} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right) \Psi = E \Psi$$

(3) Separationsansatz:  $\Psi(\underline{R}, \underline{r}) = A(\underline{R}) B(\underline{r})$

→ SP verhält sich wie freies Teilchen

→ R eff. H-Problem lösen

(4) Lösung

H-Eigenfkt.

(a) Eigenfkt.:  $\psi_{\underline{k}, \mu}(\underline{r}, t) = e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} \psi_{\mu}(r)$

Freies SP

Haupt QZ  
(Niveaus)

(b) Eigenenergie:  $E_{\underline{k}, \mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_c + m_v)} - \frac{\mu c^2}{2 \epsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{u^2}$

Absenkung Bindungsenergie  $E_b$

(Analog zur Ergd bei H)

→ Bildung eines El-Loch Paares aufgrund der  $\epsilon$ -Anziehung

→ neues Quasiteilchen: Exziton (X)

(gebundene Zustände des X sind H-ähnlich)

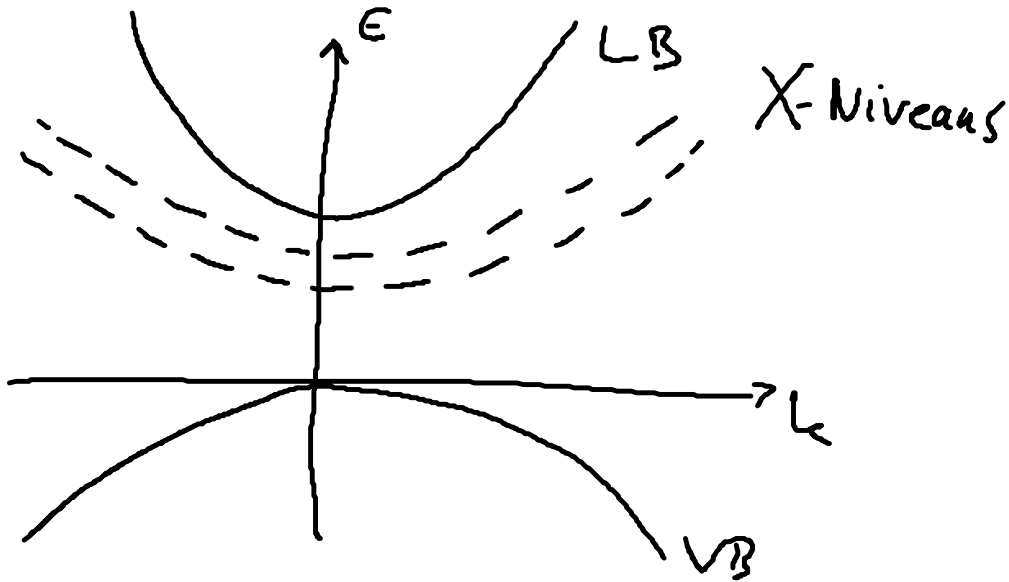
• Energie: Diff. zw. angeregten X-Zuständen und dem GZ ( $E = SE - \Delta$ )

$$SE = E + \Delta = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_c + m_v)} - E_b \frac{1}{u^2} + \Delta = E_{gr}$$

Absenkung d. Energie  
für gebundene X-Zustände

Für niedrigsten angeregten Zustand ( $u=1$ ) gilt:

$$\delta E_1 = \Delta - E_b$$



Wannier-Exziton  $\longleftrightarrow$  Frenkel-Exziton  
 (großer Bandradius) (stark lokalisiert)

hier: nicht-WW EL u Löcher als quasi-frei Teilchen  
 mit ebenen Wellen

$\longrightarrow$  X delokalisiert, Wannier

## 7. Boltzmann-Gleichung

Ähnlich zur Boltzmann-Gl. für die EL-Phon-WW

$$i\hbar \partial_t \langle a_{1h}^\dagger a_{2h} \rangle = \langle [a_{1h}^\dagger a_{2h}, H_e + H_{e-e}]_- \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= (\epsilon_{2k} - \epsilon_{1k}) \langle a_{1k}^\dagger a_{2k} \rangle \quad A, B, C \hat{=} \begin{matrix} \text{Bandindex,} \\ \text{Wellenzahl} \end{matrix} \\
&+ \sum_{ABC} \left[ V_{BC}^{2kA} \left\{ \langle a_{1k}^\dagger a_B \rangle \langle a_A^\dagger a_C \rangle - \langle a_{1k}^\dagger a_C \rangle \langle a_A^\dagger a_B \rangle \right\} \right. \\
&\quad \left. - V_{1kC}^{AB} \left\{ \langle a_A^\dagger a_{2k} \rangle \langle a_B^\dagger a_C \rangle - \langle a_A^\dagger a_C \rangle \langle a_B^\dagger a_{2k} \rangle \right\} \right] \\
&+ \sum_{ABC} \left[ V_{BC}^{2kA} \langle a_{1k}^\dagger a_A^\dagger a_C a_B \rangle^c - V_{1kC}^{AB} \langle a_A^\dagger a_B^\dagger a_C a_{2k} \rangle^c \right] \\
&\quad \text{Bew. gl. für Korrel. fkten}
\end{aligned}$$

• Ansatz: Korrel.entwicklung 2. Ordnung, d.h.  
 $\langle a^\dagger a^\dagger a^\dagger a a a \rangle \rightarrow 0$

• Vereinfachung: 1 Band  $\epsilon_{2k} \rightarrow -\epsilon_{1k}$   $\epsilon_{2k} - \epsilon_{1k} \Big|_{k \rightarrow -k} = 0$   
 Beitrag von  $H_c$

• Frage: Änderung der Besetzungswahrs.  $\rho_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$   
 unter Einfluß der EL-EL-WW

$$\begin{aligned}
&\dot{\rho}_k \approx d_t \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle^c - (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4) \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle^c \\
&+ (V_{34}^{21} - V_{43}^{12}) \left[ \rho_4 \rho_3 (1 - \rho_2) (1 - \rho_1) - (1 - \rho_4) (1 - \rho_3) \rho_2 \rho_1 \right] \\
&+ f \left( \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle^c, \langle a^\dagger a^\dagger a^\dagger a a a \rangle^c \right) \\
&\quad \rightarrow
\end{aligned}$$

führen zur Abschirmung  
vernachlässigen

- Jetzt:
- Markov-Approx.
  - $\langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle$  formal lösen
  - einsetzen in Bewgl. für  $S_u$

• Boltzmann gl.:

$$\dot{S}_u(t) = \frac{4\bar{u}}{t^2} \sum_{u' < u} [2V_q - V_q V_{u-t}] \delta(z_u + z_{u+q} - z_{u'} - z_{u'+q})$$

E-erhaltung bei Stoß

$$\times \left\{ -S_u(t) S_{u'+q}(t) [1 - S_{u+q}] [1 - S_{u'}] \right\} \text{ Ausstreuung}$$

$$+ \underbrace{[1 - S_u] [1 - S_{u'+q}]}_{\sim \text{Nichtbesetzung}} \underbrace{S_{u+q} S_{u'}}_{\sim \text{Besetzung}} \left. \right\} \text{ Einstreuung}$$