

IX. Optische Eigenschaften und Exzitation

Nächste Woche Di: 16.6.15
VL fällt aus!

IX.1 Optische Absorption durch Interbandübergänge

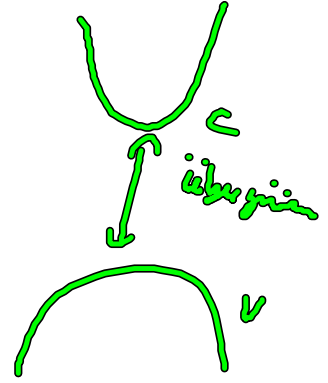
Ziel des Abschnitts ist es opt. Übergänge zwischen Bändern in Halbleitern zu verstehen.

1. Schritt: Aufstellen des Hamiltonoperators

$$H_{\text{ges}} = \sum_k \epsilon_k^{\text{el}} a_{\text{el}k}^{\dagger} a_{\text{el}k} \quad (\text{langsam Anteil})$$

Es fehlt die Elektron-Licht Wechselwirkung
Anderer Anteil: Elektron-Licht Wechselwirkung im Dipolnäherung

$$H_{\text{el-Licht}} = \int dV \underbrace{\psi^{\dagger}(r) \sigma_x \cdot E(r) \psi(r)}_{\text{Dipolwechselwirkung}}$$



Dies ist 2. Ordnung (nur die Anteil Band-Band Übergänge):

$$H_{\text{el-Licht}} \approx - \sum_k (a_{\text{el}k}^{\dagger} a_{\text{ph}k} + \text{h.c.})$$

Bemerkung: Die korrekte (!) Herleitung der Elektron-Licht Wechselwirkung ist sehr subtil wegen der Periodizität

Folgende Probleme treten auf:

- (i) Herleitung als Fundamentell. A-p-o Wechselwirkung $H = \frac{(p - e\hbar A)^2}{2m}$
(Addition in A-p-o gibt es oft Probleme mit Term $e \hbar^2$)

(ii) Die Dipol-Wechselwirkung wird über die Poincaré-Zieman-Wooley Transformante als der $A \cdot p$ Wechselwirkung.

Problem dabei: a) periodische Randbedingungen

b) die Wahl der Eichungszellen

kann zu unterschiedlichen Ergebnissen führen, falls Oberfläche integriert verdrillt wird.

Das Lichtfeld wird in folgender klassischer behandelt.

Eine Theorie, die die Materie quantenmechanisch behandelt und das Lichtfeld klassisch nennt man „semi-klassisch“.

Häufig wird für eine erste Charakterisierung, die Suszeptibilität des Materials verwendet $\chi(\omega) = \frac{P(\omega)}{E(\omega)}$ für Absorptions-Experiment in linearer Optik!

Da $\alpha(\omega) \propto \text{Im}(\chi(\omega))$

Wir müssen daher die Polarisation $P(\mathbf{r}, t)$ berechnen:

$$\langle \hat{P}(\mathbf{r}, t) \rangle = \int d\mathbf{r} \hat{q}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) - e \mathbf{r} \hat{q}(\mathbf{r}, t)$$



$$\underline{P}(t) \propto \sum_k d_{c\nu, k} \underbrace{\langle a_{c\nu, k}^{\dagger} a_{\nu k} \rangle}_{\text{mikroskopische Polarisation}} + \text{c.c.}$$

Häufig bei Bewegung für $\langle a_{c\nu, k}^{\dagger} a_{\nu k} \rangle$

$$\partial_t \langle a_{c\nu, k}^{\dagger} a_{\nu k} \rangle = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c, k} - \epsilon_{\nu, k}) \langle a_{c\nu, k}^{\dagger} a_{\nu k} \rangle$$

$$+ \frac{i}{\hbar} d_{\nu c, k} \cdot \underline{E}(t) (\langle a_{\nu, k}^{\dagger} a_{\nu k} \rangle - \langle a_{c\nu, k}^{\dagger} a_{c\nu, k} \rangle)$$

Bachyodite \rightarrow (i) unterhalb (ii) oben

$$\partial_t \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = -\partial_t \langle a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \rangle = \frac{i}{\hbar} \int dV E(x,t) \cdot d_{vc} \langle a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \rangle - c.c.$$

Initial ist das System im Grundzustand $\langle a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \rangle = 1$
(volle Vakuumbel) und $\langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = 0$.

Kohärenzen sind in der Regel zufällig $\langle a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = 0$

In linearer Optik wird die Gleichung für die mikroskopisch Polarisation
(erste Ordnung in E , ersetzt in Term mit E alle Größen durch den Infinitesimalwert)

$$\partial_t \langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \rangle = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,k} - \epsilon_{v,k}) \langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \rangle + \frac{i}{\hbar} d_{vc} \int dV E(x,t) (f_{v,k}^0 - f_{c,k}^0) - \gamma \langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \rangle$$

Bemerkung: In dem Fall ohne Vielteilchenwechselwirkungen
wie (ob/owd), sind Größen mit wechselwirkung k
komplett entkoppelt! ↖ Phänomenologisch
Dünnpol.

Die Gleichung in nicht-linearer Fall mit man optisch
Blochgleichung!

Nächster Schritt Lösung in Fourier Raum!

$$i\omega \langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \rangle(\omega) = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,k} - \epsilon_{v,k} + i\gamma\hbar) \langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \rangle(\omega) + \frac{i}{\hbar} d_{vc} \int dV E(\omega) (f_{v,k}^0 - f_{c,k}^0)$$

$$i(\omega - \frac{\epsilon_{c,k}}{\hbar} + \frac{\epsilon_{v,k}}{\hbar} - i\gamma\hbar) \langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \rangle(\omega) = \frac{i}{\hbar} d_{vc} \int dV E(\omega) (f_{v,k}^0 - f_{c,k}^0)$$

$$\langle a_{ck}^\dagger a_{ck} \rangle(\omega) = \frac{\frac{1}{\hbar} d_{ck} - \underline{E}(\omega)}{i \left(\omega - \frac{\epsilon_{ck}}{\hbar} + \frac{\epsilon_{ck}}{\hbar} - i\gamma \right)} \quad (\epsilon_{ck}^0 - \epsilon_{ck}^0)$$

Die Polarisation in Frequenz

$$\underline{P}(\omega) = \sum_k \frac{d_{ck}^* d_{ck} \cdot \underline{E}(\omega)}{\hbar \omega - \epsilon_{ck} + \epsilon_{ck} - i\gamma} \quad (\epsilon_{ck}^0 - \epsilon_{ck}^0)$$

Die Absorption ist $\alpha(\omega) \propto \text{Im} \underline{P}(\omega)$ in erster Näherung

Wir nehmen jetzt $\gamma \rightarrow 0$ (Es gilt $\frac{1}{\omega \pm i\gamma} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \mathcal{P} \frac{1}{\omega} \pm i\delta(\omega)$)

$$\alpha(\omega) \propto \sum_k |d_{ck}|^2 (\epsilon_{ck}^0 - \epsilon_{ck}^0) \delta(\hbar\omega - \epsilon_{ck} + \epsilon_{ck})$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \epsilon_{c,k} - \epsilon_{v,k} &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_c} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} k^2 \\ &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_c} k^2 + \frac{\hbar^2}{2m_v} k^2 \\ &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_p} k^2 \end{aligned}$$

↑
positiv
↑
Lohnmasse

mit der reduzierten Masse $\frac{1}{m_p} = \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_v} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$

Die Besetzung im Valenz $\epsilon_{v,k}^0$ wird als Lochbesetzung oder Änderung bzgl. des Stützpunkts $(1 - f_k^v)$

$$\alpha(\omega) \propto \sum_k |d_{ck}|^2 (1 - f_k^v - f_k^c) \delta(\hbar\omega - E_g - \frac{\hbar^2}{2m_p} k^2)$$

Nächster Schritt Umwandlung in ein Integral

(für die Fälle 3D (Bulk), 2D (Wellen), 1D (Nanowire))

unter der Annahme eines isotropen Bandes.

$$\alpha(\omega) \propto \frac{1}{(2\pi)^d} \Omega_d \int_0^\infty dk k^{d-1} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_g + E_0^{(d)} - \hbar\omega\right) (1 - f_2^0(\hbar\omega) - f_4^0(\hbar\omega))$$

↑
Räumliches
in d-R
↑
Nullplatzenergie
im geschickten
Rahmen

Nächste Schritt Variable substituieren

$$x = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} x^{\frac{1}{2}}$$

Subst.

$$E_0^{(d)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$$

↑
Länge in z-Richtung
(wo Tische Kosten)

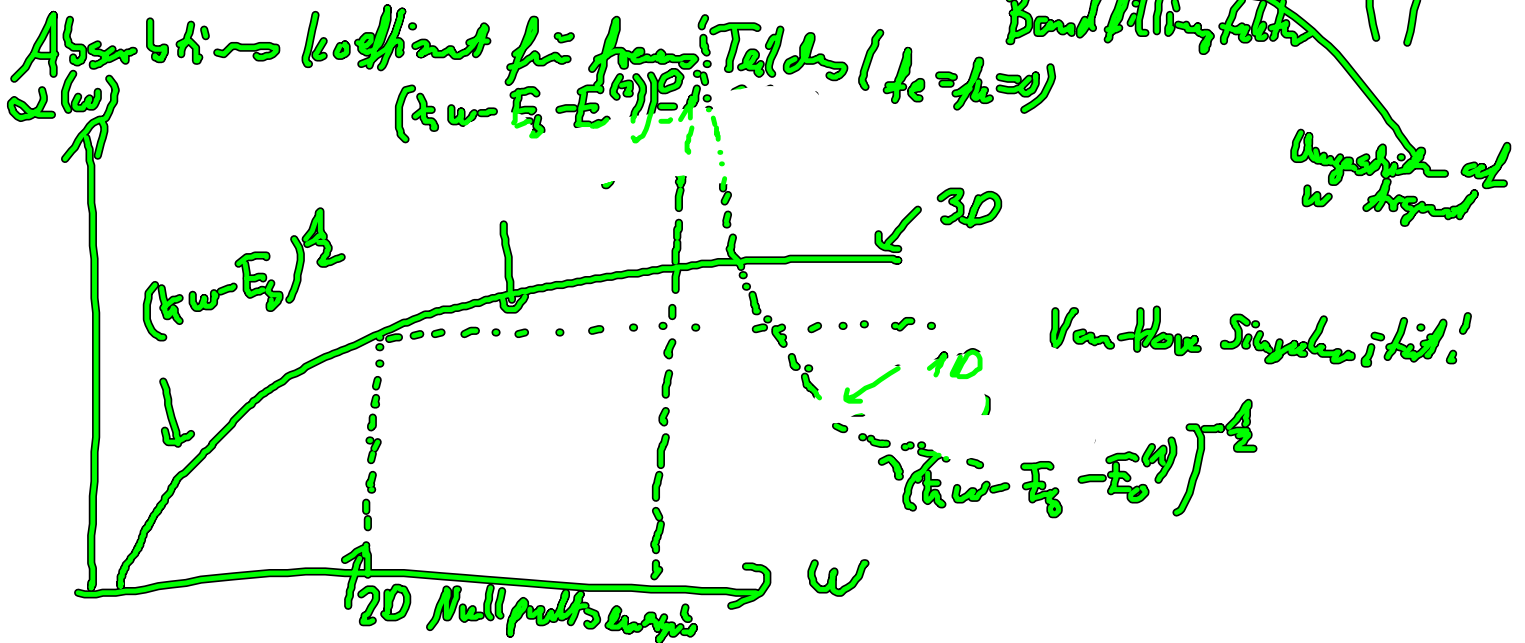
$$dk = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{x^{\frac{1}{2}}}$$

Wir erhalten dann:

$$\alpha(\omega) \propto \frac{1}{(2\pi)^d} \Omega_d \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} \int_0^\infty dx x^{\frac{(d-2)}{2}} \delta(x + E_g + E_0^{(d)} - \hbar\omega) (1 - f_2^0(x) - f_4^0(x))$$

ergibt:

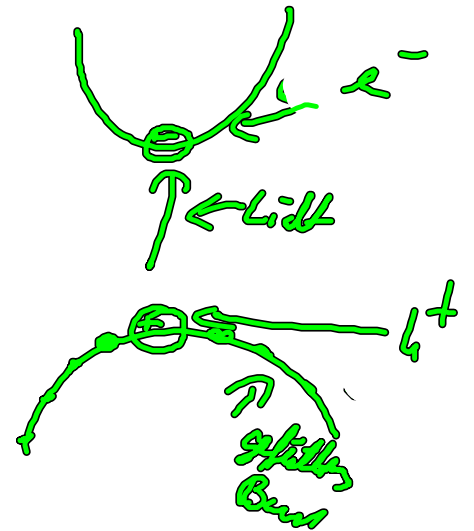
$$\alpha(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} (\hbar\omega - E_g - E_0^{(d)})^{\frac{(d-2)}{2}} \Theta(\hbar\omega - E_g - E_0^{(d)}) (1 - f_2(\hbar\omega) - f_4(\hbar\omega))$$



IX.2 Exzitonen gebundenes Elektron-Lochpaar

Schauen wir uns die mikroskopische Polarisation genauer an:

$\langle a_{c,k}^+ a_{v,k} \rangle$
 $e_k^+ = a_{c,k}^+$
 Elektron bleibt z.B.
 Rechts Fermi!
 $[e_{k'}, e_k^+]_{\pm} = \delta_{k'k}$
 $[h_{k'}, h_k^+]_{\pm} = \delta_{k'k}$



$a_{v,k}$
 könnte als
 $h_k^+ = a_{v,k}^+$
 als Erzeugende
 eines Lochs aufgefasst
 werden.

$\langle e_k^+ h_k^+ \rangle$

Im Prinzip wird beschreibt das ein Elektron-Loch Paar durch Licht erzeugt wird!

T-Komplex: Das ist analog zu Elektron, Positron Paarzeugung durch Gammastrahlung!

D.h. durch Lichtanregung entsteht ein positiv und ein negativ geladene Teilchen! Diese müssen sich durch Coulomb Wechselwirkung anziehen!

Nächster Schritt Coulomb hinzufügen!

Hamiltonoperator der Coulomb-Wechselwirkung

$$H_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ q \neq 0}} V_q a_{c,k_1}^+ a_{c,k_2}^+ a_{v,k_1} a_{v,k_2}$$

Wir haben nur die Terme behalten, die die Anzahl der Elektronen innerhalb eines Bandes erhält!

(Vernachlässigung von Kugelmoment, (Spin multipliziert etc. aber unverändert wegen Energieerhaltung.)

Konkrete Form für Valenz- und Leitungsband:

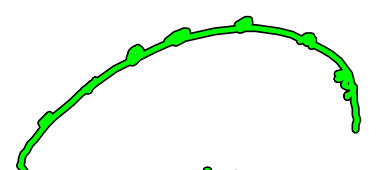
$$H_{\text{rot}} = \frac{A}{2} \sum_{k_1, k_2} V_g \left(a_{c, k_1}^\dagger a_{c, k_2}^\dagger a_{c, k_1} a_{c, k_2} + a_{v, k_1}^\dagger a_{v, k_2}^\dagger a_{v, k_1} a_{v, k_2} \right) + 2 \sum_{k_1, k_2} a_{c, k_1}^\dagger a_{v, k_2}^\dagger a_{v, k_1} a_{c, k_2}$$

(A)
(B)

(A)
(B)

Zunächst Konstruktion des Grundzustands vor optischer Anregung

$$|\phi_0\rangle = \prod_k a_{v, k}^\dagger |0\rangle \Leftrightarrow \text{Valenzband}$$



Der Grundzustand muss ein Eigenzustand sein.

komplett gefülltes Valenzband

Daher ist der nächste Schritt zu überprüfen, wie die verschiedenen Coulombanteile auf $|\phi_0\rangle$ wirken.