3.6. Wechselwirkung zwischen Elektronen + Löchern

Wdh.: Hamiltonoperator der Defektelektronen

$$\hat{H}_D = \sum_k d_k^+ d_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_V} - E_{0,V} \right)$$

pos. effektive Masse
pos. Ladung bei WW mit äußeren Feldern

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^+(x)\, h(x)\, \hat{\psi}(x)\, d^3x + \frac{1}{2} \iint \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x)\, d^3x\, d^3x'$$

Zerlegung der Feldoperatoren in Valenz + Leitungsband Anteil

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_k a_{k,V}^+ \varphi_{k,V}^*(x) + \sum_k a_{k,L}^+ \varphi_{k,L}^*(x)$$

$\varphi_{k,L}$: WF seien gegeben durch $H_{eff} \varphi = E \varphi$ und bestmöglich selbstkonsistent bestimmt worden

es gilt $\langle ki | k'j \rangle = \delta_{kk'} \delta_{ij}$ $\quad i,j = L,V$

Vertauschungsrelationen

$$\{ a_{k,i} , a_{k',j}^+ \} = \delta_{kk'} \delta_{ij}$$

freie Bewegung der Teilchen

$$\Rightarrow \hat{H} = H_0 + H_{WW}$$

$$H_0 = \sum_{kk'ij} a_{k,i}^+ a_{k',j} \langle ki | h | k'j \rangle$$

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 k_4 \\ j_1 j_2 j_3 j_4}} a_{k_1 j_1}^+ a_{k_2 j_2}^+ a_{k_3 j_3} a_{k_4 j_4} \langle k_1 j_1\, k_2 j_2 | V | k_3 j_3, k_4 j_4 \rangle$$

<u>Mit:</u> $a_{k,V}^+ a_{k,V} = 1 - d_k^+ d_k$

$a_{k,L}^+ a_{k,L} = a_k^+ a_k$

<u>3.6.1. WW mit Erhaltung der Teilchenzahl (Exzitonen)</u>

Annahme: Erhaltung der Elektronenzahl im Valenzband und Leitungsband (keine Intraband Übergänge → später)

Zerlegung der Summe in $\hat{H}_{WW}$

$$\sum_{\substack{k_i \\ j_i \\ i=1,2\ldots 4}} = \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_i \in L}}}_{H_{LL}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_i \in V}}}_{H_{VV}} + \underbrace{\underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1, j_4 \in V \\ j_2, j_3 \in L}} + \sum_{\substack{k_i \\ j_1 j_4 \in L \\ j_2 j_3 \in V}}}_{H_{LV}^{(1)}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1 j_3 \in V \\ j_2 j_4 \in L}} + \sum_{\substack{k_i \\ j_1, j_3 \in L \\ j_2, j_4 \in V}}}_{H_{LV}^{(2)}}}_{H_{LV}}$$

identische Beiträge — identische Beiträge

H_{LL}: WW der LB-El untereinander

H_{VV}: WW der VB-El untereinander

H_{LV}: WW zwischen El. und Löcher

$$H_{LL} = \frac{1}{2} \sum_{k_i} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_3} a_{k_4} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle$$

$$H_{VV} = \frac{1}{2}\sum_{k_i} d_{k_1} d_{k_2} d_{k_3}^+ d_{k_4}^+ \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{k_i} \Big\{ \delta_{k_2 k_3}\delta_{k_1 k_4} - \delta_{k_1 k_3}\delta_{k_2 k_4} - \delta_{k_2 k_3} d_{k_4}^+ d_{k_1} + \delta_{k_1 k_3} d_{k_4}^+ d_{k_2} - \delta_{k_1 k_4} d_{k_3}^+ d_{k_2} + \delta_{k_2 k_4} d_{k_3}^+ d_{k_1} + \underbrace{d_{k_3}^+ d_{k_4}^+ d_{k_1} d_{k_2}}_{\text{WW der Defektelektronen}} \Big\} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle$$

(im Prinzip wie im Kapitel "Defektelektronen")

$$H_{LV}^{(1)} = \sum_{k_i} \Big(\underbrace{a_{k_1}^+ a_{k_4} \delta_{k_2 k_3}}_{\text{WW eines Elektrons mit vollem VB}} - \underbrace{a_{k_1}^+ a_{k_4} d_{k_3}^+ d_{k_2}}_{\text{Streuung eines Elektrons am Loch}} \Big) \langle k_1 L\, k_2 V | V | k_3 V\, k_4 L \rangle$$

$H_{LV}^{(2)}$ Austauschterm (Vertauschung $k_1 \leftrightarrow k_2$)

$\Rightarrow$

$$\hat{H} = \underbrace{H_{el}}_{\text{Energie der El. im VB ohne WW}} + \underbrace{H_D}_{\text{Energie der Löcher ohne WW}} + \boxed{H_{el-D}} + \underbrace{H_{D-D} + H_{el-el}}_{\text{WW im VB bzw. LB}} + \underbrace{W_{voll}}_{\text{Energie des vollen VB}}$$

$$\Downarrow$$

WW zwischen EL & Löchern

$$H_{el\text{-}D} = \sum_{k_i} \Big(- a^+_{k_1} a_{k_4} d^+_{k_3} d_{k_2} \langle k_1 L\, k_2 V | V | k_3 V, k_4 L \rangle$$
$$+ a^+_{k_2} d_{k_4} d^+_{k_3} d_{k_1} \langle k_1 V\, k_2 L | V | k_3 V\, k_4 L \rangle \Big)$$

Fall: nur ein Elektron + 1 Loch

Ansatz für Eigenfunktionen von $H_{el\text{-}D}$: Zweiteilchensystem

$$|\phi\rangle = \sum_{k_1,k_2} c_{k_1 k_2} a^+_{k_1} d^+_{k_2} |\phi_0\rangle$$

-> wasserstoffähnliches EW Spektrum

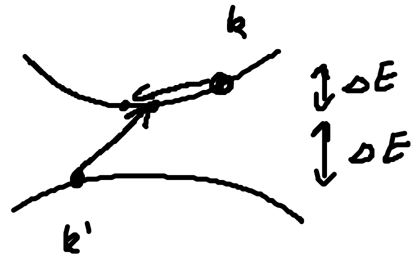
Exziton!

3.6.2. WW ohne Teilchenzahlerhaltung

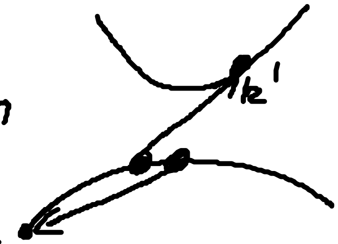
-> H_{VL} enthält noch weitere als die in 3.6.1. diskutierten Glieder

Band Band Übergang

e Stoßionisation
($e^- + h$ stoßen -> $2e^-$)



h - Auger Rekombination
($h + h$ stoßen -> $e + h$)



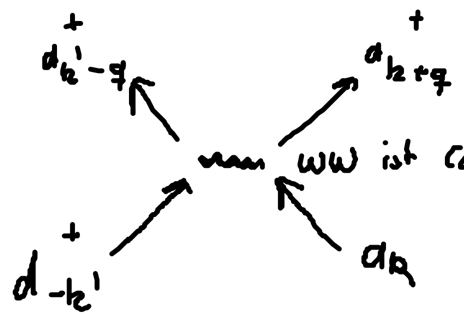
$$\sum_{\substack{k_i\\ j_i}} \longrightarrow \left.\underbrace{\sum_{LLLV} + \sum_{LLVL}}_{e-\text{Auger Rekomb.}} + \underbrace{\sum_{LVLL} + \sum_{VLLL}}_{e-\text{Stoßionisation}}\right\} \hat{H}_{ii}^{e}$$

$$\left.+ \underbrace{LVVV + VLVV}_{h-\text{Auger Rekomb.}} + \underbrace{VVLV \quad VVVL}_{h-\text{Stoßionisation}}\right\} \hat{H}_{ii}^{h}$$

Matrixelement

$$\hat{H}_{ii}^{e} = \underbrace{\sum_{kk'q} M_q^e a^+_{k+q} a^+_{k'-q} d^+_{-k'} a_k}_{\text{Stoßionisation}} + \underbrace{\sum_{kk'q} M_{-q}^{e*} a^+_{k+q} d_{-(k'-q)} a_{k'} a_k}_{\text{Auger}}$$

$kk'q$ ← stellt Impulserhaltung sicher



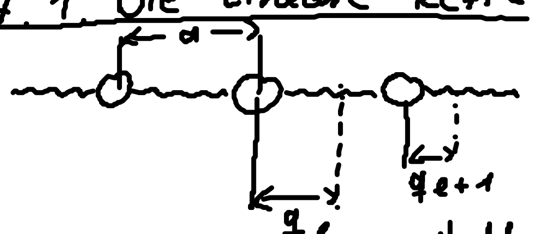
Impuls nachher: $k'+k$

Impuls vorher: $k'+k$

Löcher analog $d \longleftrightarrow a$

3.7. Phononen

3.7.1. Die Lineare Kette



Gitterionen ℓ mit Masse M

N Anzahl der Atome

zeitabhängige Auslenkung des ℓ-ten Gitterions

(1) $M\ddot{q}_\ell = K(q_{\ell+1} - q_\ell) - K(q_\ell - q_{\ell-1}) = K(q_{\ell+1} + q_{\ell-1} - 2q_\ell)$

zyklisch geschlossen $q_\nu = q_{\nu+N}$

<u>Ansatz:</u> ebene Wellen

Wellenzahl, ganze Zahl

$$q_\ell(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik\ell a} B_k(t) \qquad k = \frac{2n\pi}{Na}$$

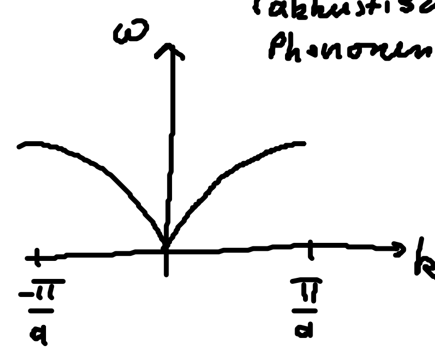
Amplitude

$$\xrightarrow{\text{in (1)}} \ddot{B}_k = \frac{K}{M}\left(e^{ika} - e^{-ika} - 2\right) B_k$$

einfache Schwingungsgleichung

$$\text{Ansatz: } B_k = e^{-i\omega_k t} A_k \quad \longrightarrow \quad \omega_k = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

Dispersionsrelation (akkustische Phononen)



$$\longrightarrow q_\ell = \sum_k \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik\ell a} e^{-i\omega_k t} A_k + \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik\ell a} e^{i\omega_k t} A_k^* \right)$$

$$\boxed{q_\ell = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \left(b_k + b_{-k}^+\right) e^{ik\ell a}} \quad (*)$$

dimensionslose Amplituden

$$a_k = A_k \sqrt{\frac{2M\omega_k}{\hbar}}$$

$$b_k = e^{-i\omega_k t} a_k$$

Impulse: $p = M\dot{q}_l$

$$p_l = -i\sum_k \sqrt{\frac{\hbar M \omega_k}{2N}} \left(b_k - b_{-k}^+\right) e^{ikla}$$

=>

$$T = \sum_{l=1}^{N} \frac{M}{2} \dot{q}_l^2$$

$$V = \frac{1}{2} K \sum_{l=1}^{N} \left(q_l - q_{l+1}\right)^2$$

=> Lagrange Funktion L bekannt

Legendre Trafo zur Hamiltonfunktion H

⟶

$$H = \sum_l p_l \dot{q}_l - L(q, \dot{q}, t)$$ einsetzen von (*)

=>

$$H = \sum_k \hbar \omega_k \frac{1}{2} \left(b_k^+ b_k + b_k b_k^+\right)$$

Quantentheoretische Behandlung: Vertauschungsrelation fordern zwischen Ort q_l und Impuls p_l

$$[\hat{q}_l, \hat{q}_j] = 0$$

$$[\hat{q}_l, \hat{p}_j] = \delta_{lj} \frac{\hbar}{i} \qquad (2)$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{ph} = \sum_k \hbar\omega_k \, \hat{b}_k^+ \hat{b}_k + \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k$$

Erzeuger eines Schwingungszustand mit Wellenvektor $\underline{k}$ — Phonon

Es gilt wegen (2)

$$[b_k, b_l^+] = \delta_{kl}$$
$$[b_k, b_l] = 0$$

$\Rightarrow$ Phononen sind Bosonen

3.7.2. Wechselwirkung zwischen Phononen + Elektronen

Bisher: Entkopplung der Elektronen- und Gitterdynamik (Born-Oppenheimer)

Korrektur in der Größenordnung $\sqrt{\frac{m_e}{m_i}} \approx 10^{-2}$

$\to$ Störungstheoretische Behandlung der WW möglich

Ionen R_n

$R_n^{(0)} + q_l(t)$

$\downarrow$

Phononen

$\hat{=}$ quantisierte Gitterschwingungen

Elektronen $\underline{r}_j$

$$\sum_n V_{e-i}(r_i - R_n^{(0)})$$

$\downarrow$

Quasielektronen E_{nk} im periodischen Pot.

Ziel: dynamisches Ionengitter

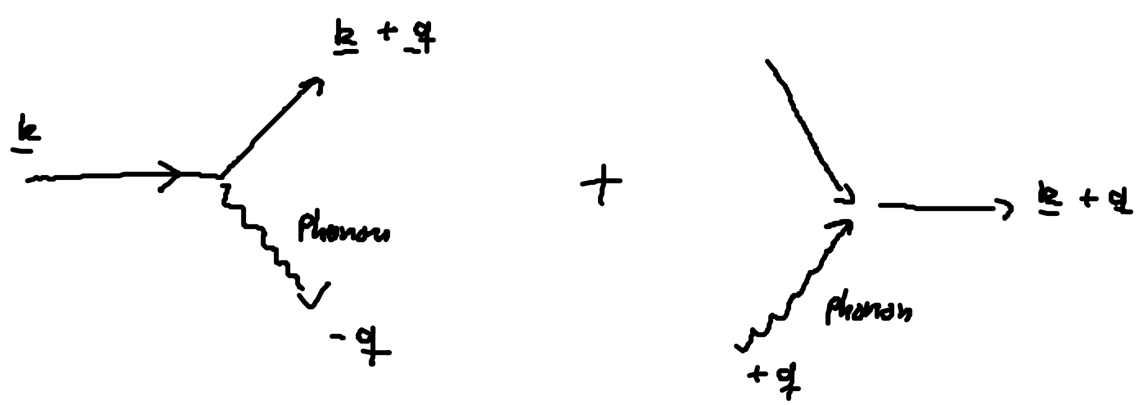
Vorgehen: $$H_{e-i} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{n=1}^{N_i} V_{e-i}(\underline{r}_i - \underline{R}_n(t))$$

Taylor Entw. des Potenzials um Ruhelage
$$= \underbrace{\sum_i \sum_n V_{e-i}(\underline{r}_i - R_n^{(0)})}_{\text{0. Ordnung}} + \underbrace{\sum \sum q_n \nabla_{R_n} V(r_i - R_n)\Big|_{R_n^0}}_{\text{1. Ordnung}}$$

0. Ordnung: Bewegung im starren Gitter
-> bereits behandelt durch Blochfunktion

1. Ordnung: WW mit zeitabh. Ionenpotenziale

$$\Rightarrow H_{e-ph} = \sum_{\underline{k}\underline{q}} M_{\underline{k}\underline{q}} \underbrace{(b^+_{-q} + b_q)}_{\text{resultiert von } q_\ell} a^+_{k+q} a_k$$



Emission + Absorption eines Phonons