

|

2

2

7

7

Uli

La

3

.

—

①
②

.

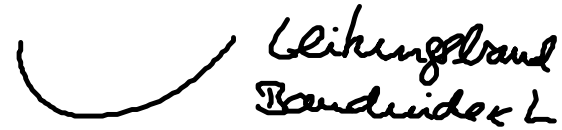
Wiederholung:

Kristallelektroden sind Quarzelektroden,
die die WW mit dem statischen Zitter
bereits enthalten.

	freies Elektron	Kristall- elektron
Wellenfkt.	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
Eigenwerte	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E_n(\mathbf{k})$ Bandstruktur
Impuls $\langle p \rangle$	$\hbar \mathbf{k}$	$\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} E_n(\mathbf{k})$
$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$	$\frac{1}{m} \delta_{ij}$	Tensor des effektiven Masse
Erzeuger- operator	$a_{\mathbf{k}}^+$	$a_{n\mathbf{k}}^+$

3.5.2. Defektelchonen (Lücher)

Annahme: 2 Bändermodell



Zustandsfunktion eines überschüssigen Elektrons (Valenzband ist voll)
1 EL im LB

$$|\phi_{\mathbf{k}}^e\rangle = a_{L\mathbf{k}}^+ \underbrace{\left(a_{V\mathbf{k}_1}^+, a_{V\mathbf{k}_2}^+, \dots, a_{V\mathbf{k}_n}^+ \right)}_{|\phi_V\rangle \text{ Zustandsfunktion des VB}} |0\rangle$$

$$= a_{L\mathbf{k}}^+ |\phi_V\rangle$$

Defektelchons

$$|\phi_{\mathbf{k}}^h\rangle = a_{V\mathbf{k}} |\phi_V\rangle$$

Zustand einer Fehlstelle im VB mit

Wellenzahl k

Neue Erzeuger, Vernichter $d_k^\dagger = a_{\sqrt{2}k}$
 \uparrow
 Vertauschungs-
 relation bekannt

wobei $d_k |\phi_v\rangle = a_{\sqrt{2}k}^\dagger |\phi_v\rangle = 0$

d.h. $|\phi_v\rangle$ entspricht für Teilchenzahl-
 operatoren d_k dem Vakuumzustand

→ Umzuschreiben der Hamilton-
 operators

$$(1) a_k^\dagger a_m = \underbrace{d_k d_m^\dagger}_{\uparrow} = \delta_{km} - d_m^\dagger d_k \quad (\text{wegen bekannter Vertauschungsrelationen})$$

$$(2) a_k^\dagger a_m^\dagger a_{m'} a_{k'} = \underbrace{d_k d_m^\dagger d_{m'}^\dagger d_{k'}}_{\uparrow}$$

$$= \delta_{mm'} \delta_{kk'} - \delta_{mm'} d_{k'}^\dagger d_k - \delta_{m'k'} \delta_{mk} + \delta_{m'k'} d_m^\dagger d_k + \delta_{kk'} d_{m'}^\dagger d_m - \delta_{kk'} d_m^\dagger d_{m'} + d_m^\dagger d_{k'}^\dagger d_k d_{m'}$$

Einsetzen von (2) in $\hat{H}_{\text{feld}} = \sum_{km} \langle k | \hat{h} | m \rangle a_k^\dagger a_m + \frac{1}{2} \sum_{\substack{kl' \\ mm'}} \langle km | \hat{V} | l'm' \rangle a_k^\dagger a_m^\dagger a_{m'} a_{l'}$

$$\hat{H}_{\text{feld}} = \underbrace{E_v}_{\text{Beiträge ohne Operator}} + \underbrace{H_0}_{\text{Beiträge mit } d^\dagger d} + \underbrace{H_{DD}}_{\text{Beiträge mit } d^\dagger d^\dagger d d}$$

$$E_V = \sum_l \epsilon_l + \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | V | lm \rangle - \frac{1}{2} \sum_{lm} \langle lm | V | ml \rangle$$

über alle VB Zustände $\hat{=}$ Energie des vollen VB in HF-Näherung

$\hat{=}$ Energie des vollen VB in Hartree-Fock-Näherung

$$H_D = - \sum_{lm} \langle l | \hat{H} | m \rangle d_m^\dagger d_l - \frac{1}{2} \sum_{ll'm' \substack{sm \\ +}} d_l^\dagger d_l d_{l'm'}^\dagger d_{l'm'} \langle ll'm' | V | l'l'm' \rangle$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{m'l'm} d_{m'l}^\dagger d_{m'l} \langle l'm' | V | l'm \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{m'l'm} d_{m'l}^\dagger d_l \langle ll'm' | V | m'l \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{l'l'm} d_l^\dagger d_{m'l} \langle ll'm' | V | l'l \rangle$$

$$H_D = - \sum_{lm} d_m^\dagger d_l \left\{ \langle l | \hat{H} | m \rangle + \sum_{m'} \langle ll'm' | V | m'm \rangle - \langle ll'm' | V | m'm \rangle \right\}$$

$$= - \sum_{lm} d_m^\dagger d_l \langle l | \hat{H}_{\text{eff}} | m \rangle$$

effektive Hamilton-Operatoren, das die Wirkung des Valenzelektrons durch ein eff. Potential beschreibt und $|m\rangle$ ist Eigenfunktion von \hat{H}_{eff} mit E_m als Eigenwert

$$H_D = - \sum q_2^\dagger q_2 E_{x,v}$$

$\hat{=}$ zulässigen Quasi-Impulse im Kristall

$\hat{=}$ Energie des Defizitelektrons ohne ψ

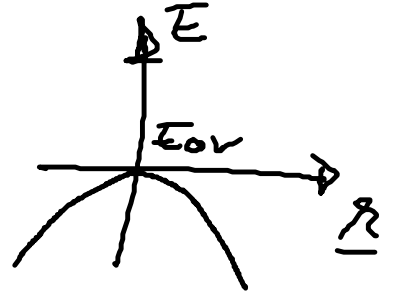
$$\hat{H}_{DD} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l, l' \\ l' \neq l}} d_{l'}^+ d_l^+ d_l d_{l'} \quad (\text{kin } |V| \text{ in } m)$$

≙ Coulombwechselwirkung der Doppellektronen

$$\hat{H}_{\text{feld}} = E_V (-1) \sum_{\underline{z}} d_{\underline{z}}^+ d_{\underline{z}} E_{\underline{z}, V} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\underline{z}_1, \underline{z}_2, \\ \underline{z}_3, \underline{z}_4}} d_{\underline{z}_1}^+ d_{\underline{z}_2}^+ d_{\underline{z}_3} d_{\underline{z}_4} \quad (\text{kin } |V| \text{ in } \underline{z}_2)$$

negative Energie??
Nein!

$$E_{\underline{z}, V} = E_{0V} - \frac{\hbar^2 \underline{z}^2}{2m_V}$$



(ohne \hat{H}_{DD})

$$\rightarrow \hat{H}_{\text{feld}} = \sum_{\underline{z}} d_{\underline{z}}^+ d_{\underline{z}} \left(\frac{\hbar^2 \underline{z}^2}{2m_V} - E_{0V} \right)$$

→ Doppellektronen sind Teilchen mit positivem effektives Masse m_V

Ladung der Löcher:

Operator der Ladungsdichte der Elektronen

$$\begin{aligned} \hat{g}(x) &= e \psi^\dagger(x) \psi(x) \\ &= e \sum_{\underline{z}, \underline{z}'} \psi_{\underline{z}}^\dagger(x) \psi_{\underline{z}'}(x) a_{\underline{z}}^\dagger a_{\underline{z}'} \end{aligned}$$

(entwickelt nach Blochfunktionen)

$$\text{Relation (1): } a_{\underline{z}}^\dagger a_{\underline{z}} = d_{\underline{z}}^\dagger, \quad d_{\underline{z}} = a_{\underline{z}}^\dagger$$

$$a_{\underline{z}} a_{\underline{z}'} = \delta_{\underline{z}, \underline{z}'} - d_{\underline{z}}^\dagger d_{\underline{z}'}$$

$$\rightarrow \hat{g}(x) = e \underbrace{\sum_{\underline{z}} |\psi_{\underline{z}}(x)|^2}_{\text{hole density}} - e \sum_{\underline{z}, \underline{z}'} \psi_{\underline{z}'}(x) \psi_{\underline{z}}^\dagger(x) d_{\underline{z}}^\dagger d_{\underline{z}'}$$

Ladungsdichte
des vollen Valenz-
bandes

(wird gerade kompensiert von den
positiven Ionen, da Sand nicht
elektrisch neutral)

Erwartungswert bzgl. eines Zustandes mit einem
Dopfelelektron bei \underline{R}_0 ($|\phi_{R_0}\rangle = d_{R_0}^\dagger |\phi_V\rangle$)

$$\langle \hat{g} \rangle = \langle \phi_V | d_{R_0} \sum_{R,R'} (-e) \psi_{R'}^\dagger \psi_R^\dagger d_{R'}^\dagger d_R d_{R_0}^\dagger | \phi_V \rangle$$

$$d_{R_0} d_R^\dagger d_{R'}^\dagger d_{R_0}^\dagger = \dots \delta_{R'} \delta_{R_0} d_{R_0} d_R^\dagger | \phi_V \rangle - d_{R_0} d_{R'}^\dagger d_{R_0}^\dagger \underbrace{d_{R'}^\dagger | \phi_V \rangle}_{=0}$$

$$= -e |\psi_{R_0}|^2$$

↑
Valenzelektron Wellenfunktion

positive Ladung des Lochs

- Ausdehnung der Dopfelelektronen mit
einem äußeren Feld

$$\hat{V}_{\text{Feld}} = \int \hat{\psi}^\dagger(x) [-e E x] \hat{\psi}(x) dx^3$$

äußere elektrisches Feld

Feldoperatoren:

$$\text{mit } \psi^{\dagger}(x) = \sum_{\mu} \psi_{\mu}^{\dagger}(x) a_{\mu}^{\dagger}$$

(Bemerkung: analog kann auch \hat{H} hergeleitet werden
 $\hat{H} = \int \psi^{\dagger}(x) h(x) \psi(x) dx$
 $= \sum_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} E_{\mu}$)

$$\hat{V}_{\text{Feld}} = \sum_{\mu, \mu'} M_{\mu\mu'} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'}$$

wobei $M_{\mu\mu'} = \langle \psi_{\mu} | (-e) E_V | \psi_{\mu'} \rangle$
 falls E Konstant
 $= E \Theta_{\mu\mu'}$ (Dipoloperator)

$$\hat{V}_{\text{Feld}} = \sum_{\mu} M_{\mu\mu} \left(- \sum_{\mu'} d_{\mu'}^{\dagger} d_{\mu'} (M_{\mu'\mu})^* \right)$$

potenzielle Energie
 des vollen VSB

positive Ladung bei
 WW mit auferen
 Feld

(wirdes Kommutator durch
 das Grundgitter)

\Rightarrow Hall-Effekt angedeutet

(Beobachtung von fundamentalen
 Quantenfeldtheoretischen
 Gesetzmäßigkeiten (anti-Symmetrie))

3.6. Wechselwirkung zwischen Elektronen + Löcher

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{r}^2}{2m} - E_{0V} \right)$$

positive effektive Masse

positive Ladung bei qV mit äußeren Felder

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

Zerlegung des Teiloperators in
Valenz- und Leitungsbandanteile

$$\psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r},V}^\dagger \psi_{\mathbf{r},V}^\dagger(\mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r},L}^\dagger \psi_{\mathbf{r},L}^\dagger(\mathbf{x})$$

$\psi_{\mathbf{r},L}$: Wellenfunktionen sind gegeben
durch $H_0 \psi = E \psi$

und sollen bestmögliche Selbstkonsistenz
bestimmt werden

$$\text{es gilt } \langle \psi_i | \psi'_j \rangle = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta_{ij} \quad i, j \in \{L, V\}$$

Vertauschungseigenschaften

$$\{ a_{\mathbf{r},i}, a_{\mathbf{r}',j}^\dagger \} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta_{ij}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + H_{ew}$$

freie Expansion des Teiloperators

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}' ij} a_{\mathbf{r},i}^\dagger a_{\mathbf{r}',j} \langle \psi_i | h | \psi'_j \rangle$$

$$H_{ew} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4 \\ j_1 j_2 j_3 j_4}} a_{\mathbf{r}_1, j_1}^\dagger a_{\mathbf{r}_2, j_2}^\dagger a_{\mathbf{r}_3, j_3} a_{\mathbf{r}_4, j_4} \langle \psi_{j_1 j_2} | V | \psi_{j_3 j_4} \rangle$$

$$\text{mit } a_{\mu\nu}^+ a_{\mu\nu} = 1 - d_{\mu\nu}^+ d_{\mu\nu}$$

$$a_{\mu\nu}^+ a_{\mu\nu} = a_{\mu\nu}^+ a_{\mu\nu}$$

