

.

|

3

2

.

7

7

Uli

Lo

3

.



Wiederholung:

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

	freies Elektron	Kristallelektron
Wellenfkt.	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$
Eigenwerte	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E_n(\mathbf{k})$ $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Bandstruktur
Impuls $\langle p \rangle$	$\hbar \mathbf{k}$	$\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} E_n(\mathbf{k})$
$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_i \partial \mathbf{k}_j}$	$\frac{1}{m} \delta_{ij}$	Tensor des effektiven Masse
Erzeugeroperator	$a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$	$a_{n\mathbf{k}}^{\dagger}$

3.5.2. Defektelektromen (Lücher)

Annahme: 2 Bändermodell



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

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

Defektelektromen

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

Zustand einer Fehlstelle im VB mit

Wellenzahl k

Neue Erzeuger, Vernichter $d_k^\dagger = a_{\nu k}$

↑
Vertauschungs-
relation bekannt

wobei $d_k |\phi_\nu\rangle = a_{\nu k}^\dagger |\phi_\nu\rangle = 0$

d.h. $|\phi_\nu\rangle$ entspricht für Teiltheorie-
operatoren d_k dem Vakuumzustand

→ Umkehrreiben der Hamilton-
operators

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

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

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

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

$$\hat{H}_{\text{Feld}} = \underbrace{E_\nu}_{\text{Beiträge ohne Operatoren}} + \underbrace{H_0}_{\text{Beiträge mit } d^\dagger d} + H_{DD} \quad \text{Beiträge mit } d^\dagger d^\dagger d d$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$H_D = - \sum_l d_l^\dagger d_l E_{z,l}$$

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

$\hat{=}$ Energie des Defektteilchens ohne LW

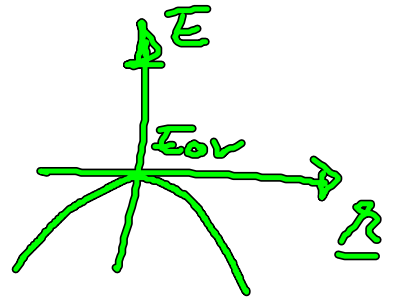
$$\hat{H}_{DD} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell u \\ \ell' u'}} d_u^\dagger d_{\ell'}^\dagger d_\ell d_u \quad (\text{kin } |V| \ell' u')$$

≙ Coulombwechselwirkung der Doppelleitungen

$$\hat{H}_{\text{Held}} = E_V (-1) \sum_{\ell} d_\ell^\dagger d_\ell E_{2, \nu} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell_1, \ell_2 \\ \ell_3, \ell_4}} d_{\ell_1}^\dagger d_{\ell_2}^\dagger d_{\ell_3} d_{\ell_4} \quad (\ell_3 \ell_4 |V| \ell_1 \ell_2)$$

negative Energie??
Nein!

$$E_{2, \nu} = E_{0, \nu} - \frac{\hbar^2 \ell^2}{2m_\nu}$$



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

$$\rightarrow \hat{H}_{\text{Held}} = \sum_{\ell} d_\ell^\dagger d_\ell \left(\frac{\hbar^2 \ell^2}{2m_\nu} - E_{0, \nu} \right)$$

→ Doppelleitungen sind Teilchen mit positivem effektives Masse m_ν

Ladung der Löcher:

Operator der Ladungsdichte der Elektronen

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

(entwickelt nach Blochfunktionen)

Relation (1): $a_{\nu \ell} = d_\ell^\dagger$, $d_\ell = a_{\nu \ell}^\dagger$
 $a_\ell a_u = \delta_{\ell u} - d_u^\dagger d_\ell$

$$\rightarrow \hat{g}(x) = e \underbrace{\sum_{\ell} |\psi_\ell(x)|^2} - e \sum_{\ell \ell'} \psi_{\ell'}(x) \psi_\ell^\dagger(x) d_\ell^\dagger d_{\ell'}$$

Ladungsdichte
des vollen Valenz-
bandes

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

Erwartungswert bzgl. eines Zustandes mit einem
Dopplehlohn bei \underline{R}_0 ($|\Phi_0\rangle = d_{R_0}^\dagger |\Phi_V\rangle$)

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

$$d_{R_0} d_R^\dagger d_{R'}^\dagger d_{R_0}^\dagger = \dots \delta_{R'} \delta_{R_0} d_{R_0} d_R^\dagger | \Phi_V \rangle$$

$$- d_{R_0} d_{R'}^\dagger d_{R_0}^\dagger d_{R'} | \Phi_V \rangle = 0$$

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

↗ Valenzelektron
↖ positive Ladung des Lochs

- Wechselwirkung des Dopplehlohns mit
einem äußeren Feld

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

äußeres elektrisches Feld

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

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

wobei $M_{\lambda \lambda'} = \langle \psi_{\lambda} | (-e) E_V | \psi_{\lambda'} \rangle$
 falls E konstant
 $= E \Theta_{\lambda \lambda'}$ (Dipolmatrix)

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

potentielle Energie
 des vollen VB

positive Ladung der
 WW mit auflagen
 Feld

(wirdes Kommutator durch
 des Grundzust.)

\Rightarrow Halb-Erft anordnen
 (Beobachtung von grundlegenden
 Quantenfeldtheoretischen
 Eigenschaften (anti-Sym))

3.6. Wechselwirkung zwischen Elektronen + Löcher

$$H_0 = \sum_n d_n^\dagger d_n \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_{0n} \right)$$

positive effektive Masse

positive Ladung bei GW mit anderen Teilchen

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

Zerlegung des Teiloperators in
Valenz- und Leitungsbandanteile

$$\psi^\dagger(x) = \sum_k a_{k,v}^\dagger \psi_{k,v}^\dagger(x) + \sum_k a_{k,c}^\dagger \psi_{k,c}^\dagger(x)$$

$\psi_{k,v,c}$: Wellenfunktionen sind gegeben
durch $H_0 \psi = E \psi$

und sollen bestimmte Selbstkonsistenz
bestimmt werden

$$\langle \psi_{k,v} | \psi_{k',v'} \rangle = \delta_{kk'} \delta_{ij} \quad i, j \in \{c, v\}$$

Vertauschungsrelationen

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

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

freie Entwicklung des Teiloperators

$$H_0 = \sum_{k,k',ij} a_{k,i}^\dagger a_{k',j} \langle \psi_{k,i} | h | \psi_{k',j} \rangle$$

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

$$\text{mit } a_{\mu\nu}^t a_{\mu\nu} = 1 - d_2^t d_2$$

$$a_{\mu\nu}^t a_{\mu\nu} = a_2^t a_2$$

