Wdh. 3.6. <u>Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern</u>

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

positive effektive Masse
pos. Ladung bei WW mit äußeren Feldern

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

Zerlegung der Feldoperatoren in Valenz + Leitungsbandanteil

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_k{}' a^+_{k,v} \varphi^*_{k,v}(x) + \sum_k{}' a^+_{k,L} \varphi^*_{k,L}(x)$$

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

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

Vertauschungsrelationen

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

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

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

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1k_2k_3k_4 \\ j_1j_2j_3j_4}} a^+_{k_1j_1} a^+_{k_2j_2} a_{k_3j_3} a_{k_4j_4} \langle k_1j_1 k_2j_2 | V | k_3j_3 k_4j_4 \rangle$$

Mit: $a^+_{kV} a_{k,V} = 1 - d^+_k d_k \qquad (a^+_{kV} \to d_k)$

$a^+_{k'L} a_{kL} = a^+_k a_k$

3.6.1 WW mit Erhaltung der Teilchenzahl (Exzitonen)

Annahme: Erhaltung der Elektronenzahl im Valenzband und Leitungsband (keine Interbandübergänge) ← später

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

identische Beiträge — identische Beiträge

$$\sum_{\substack{k_i = k_1k_2k_3k_4 \\ j_i = j_1j_2j_3j_4}} = \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_i \in L}}}_{\substack{H_{LL} \\ \text{WW der LB-El untereinander}}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_i \in V}}}_{\substack{H_{VV} \\ \text{WW der VB-El}}} + \underbrace{\underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1j_4 \in V \\ j_2j_3 \in L}} + \sum_{\substack{k_i \\ j_1j_4 \in L \\ j_2j_3 \in V}}}_{H^{(1)}_{LV}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1j_3 \in V \\ j_2j_4 \in L}} + \sum_{\substack{k_i \\ j_1j_3 \in L \\ j_2j_4 \in V}}}_{H^{(2)}_{LV}}}_{H_{LV}}$$

H_{LV}: WW zwischen Elektronen und Löchern

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

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

$$= \frac{1}{2} \sum_{k_i} \Big\{ \delta_{k_2k_3} \delta_{k_1k_4} - \delta_{k_1k_2} \delta_{k_3k_4} - \delta_{k_2k_3} d^+_{k_4} d_{k_1} + \delta_{k_1k_3} d^+_{k_4} d_{k_2} - \delta_{k_1k_4} d^+_{k_3} d_{k_2} + \delta_{k_2k_4} d^+_{k_3} d_{k_1} + \underbrace{d^+_{k_3} d^+_{k_4} d_{k_1} d_{k_2}}_{\text{WW der Defektelektronen}} \Big\} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle$$

$$\hat{H}^{(1)}_{LV} = \sum_{k_i} \Big(\underbrace{a^+_{k_1} a_{k_4} \delta_{k_2k_3}}_{\text{WW eines Elektrons mit vollem VB}} - \underbrace{a^+_{k_1} a_{k_4} d^+_{k_3} d_{k_2}}_{\text{Streuung eines Elektrons am Loch}} \Big) \langle k_{1L} k_{2V} | V | k_{3V} k_{4L} \rangle$$

$\hat{H}^{(2)}_{LV}$ = Austauschterm (Vertauschung von $k_1 \leftrightarrow k_2$)

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

H_{el-D} $\Downarrow$ WW zwischen El und Löchern

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

Fall: nur ein Loch + ein Elektron

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

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

$\Rightarrow$ Wasserstoff-ähnliches EW-Spektrum

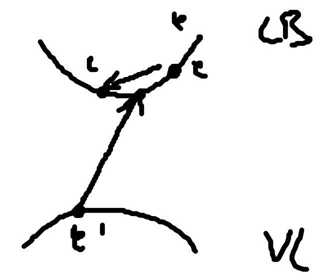
Exziton!

3.6.2 WW ohne Teilchenzahlerhaltung

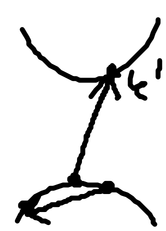
$\Rightarrow H_{VL}$ enthält noch weitere als die in 3.6.1. diskutierten Glieder

Band-Band Übergang

e Stoßionisation
(e+h stoßen → 2e)



h-Auger Rekombination
(h+h stoßen → e+h)

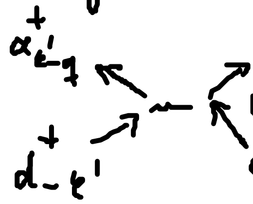


$$\sum_{\substack{k_i\\ j_i}} \longrightarrow \left.\underbrace{\sum_{LLLV} + \sum_{LLVL}}_{\text{e-Auger Rekombination}} + \underbrace{\sum_{LVLL} + \sum_{VLLL}}_{\text{e-Stoßionisation}}\right\} \hat{H}^e_{ii}$$

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

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

stellt Impulserhaltung sicher



Impuls nach hin: $k' + k$

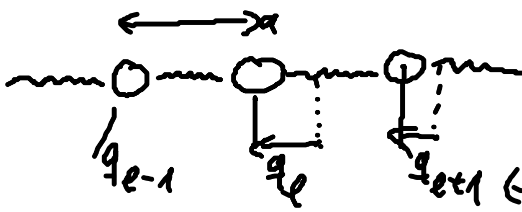
WW ist die Coulomb-WW

Impuls vorher: $k' + k$

3.7. Phononen: 3.7.1 Die lineare Kette

Gitteratom l mit Masse M

N Anzahl der Atome



zeitabhängige Auslenkungen des l-ten Gitteratoms

$$(1) \quad M\ddot q_l = K(q_{l+1} - q_l) - K(q_l - q_{l-1}) = K(q_{l+1} + q_{l-1} - 2q_l)$$

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

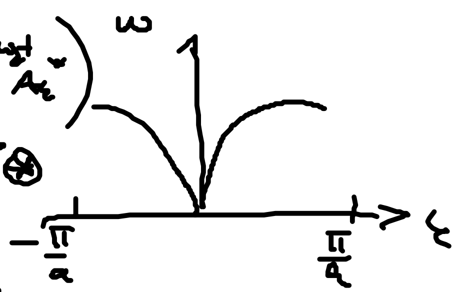
Ansatz: ebene Wellen $q_l(t) = \frac{1}{\sqrt N} e^{ikla} B_k(t)$ $\qquad k = \frac{2\pi n}{N}$ (Wellenzahl k, n ganze Zahl)

einsetzen in (1)

$$\rightarrow \ddot B_k = \frac{K}{M}\left(e^{ika} - e^{-ika} - 2\right) B_k \qquad \text{einfache Schwingungsgl.}$$

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

$$\rightarrow q_l = \sum_k \left(\frac{1}{\sqrt N} e^{ikla} e^{-i\omega_k t} A_k + \frac{1}{\sqrt N} e^{-ikla} e^{i\omega_k t} A_k^*\right)$$



$$\boxed{q_l = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}}\,(b_k + b^*_{-k})\, e^{ikla}} \ ⊛$$

$$a_k = A_k \sqrt{\frac{2M\omega_k}{\hbar}}, \quad b_k = e^{-i\omega_k t} a_k$$

Impulse: $p = M\dot q_l \Rightarrow p_l = -i\sum_k \sqrt{\frac{\hbar M\omega_k}{2N}}\,(b_k - b^+_{-k})\, e^{ikla}$

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

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

$\Rightarrow$ Lagrange Funktion L bekannt

Legendre Trafo $\longrightarrow$ Hamiltonfunktion H

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

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

Quantentheoretische Behandlung: Vertauschungsrel. fordern zwischen Ort und Impuls

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

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

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

$\hat{b}_k^+$: Erzeugung eines Schwingungszustands mit Wellenvektor $\underline{k}$

Phononen

Wegen obiger Vertauschungsrelation $\longrightarrow$ $[b_k, b_l^+] = \delta_{kl}$

$[b_k, b_l] = 0$

$\Rightarrow$ Phononen sind Bosonen

3.1.2 Wechselwirkung zwischen Phononen und Elektronen