VII Festkörperoptik

1) Dipolnäherung f. halbklassische Optik

gehe von System von Festkörperelektronen $\psi_{\lambda k}$ mit

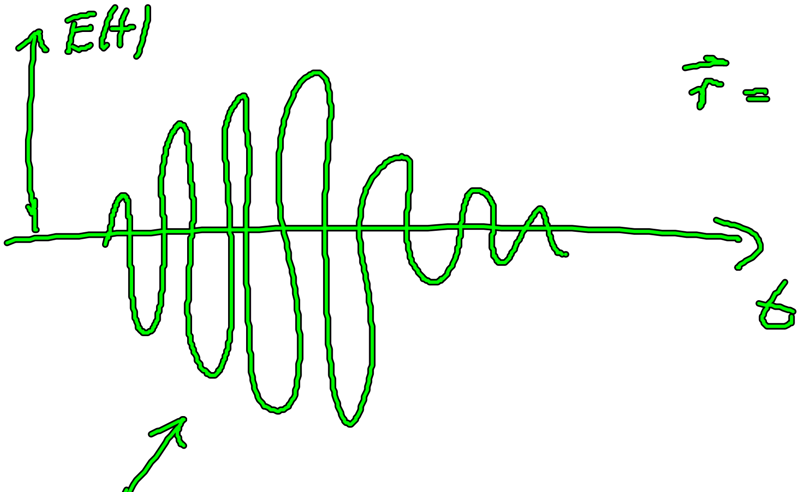
$$H = H_0 + H_{Coul} + H_{Feld} \quad \text{aus}$$

Blochelektronen — El-El-WW — El-optisches Feld-WW

$$H_{Feld} = -q\,\vec{r}\cdot\vec{E}(r,t) \longrightarrow \underline{H}_{Feld} = -q\int dV\, \underline{\psi}^\dagger(r,t)\,\vec{r}\cdot\vec{E}\,\underline{\psi}(r,t)$$

Dipolkopplung an ein elektrisches Feld

im Vergleich zur Transporttheorie soll das $\vec{E}(r,t)$ jetzt optische Frequenzen enthalten, i.a.:



$\vec{r}$ = konstant

f. Laserpuls

optische Frequenzen: Puls hüllt Trägerfrequenz ein

$\vec{E}(r,t)$: extern aufgeprägt und
entwickelt sich über Wellengleichung
unter Beeinflußung des abgestrahlten Felds

halbklassisch: $\vec{E} \mathrel{\hat{=}}$ klassisch Feld

$q\,\underline{\psi}^{+}\,\vec{r}\,\underline{\psi}_{-} \mathrel{\hat{=}}$ Quantenfeld $\mathrel{\hat{=}}$ Dipoldichte die
quantenmechanisch beschrieben wird

Quellen der Maxwellgleichungen werden mit:

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{E}} = \vec{P} = q\,\underline{\psi}^{+}(\vec{r},t)\,\vec{r}\,\underline{\psi}(\vec{r},t)$$

beachte, $\vec{P}$ wird als Dipoldichte interpretiert:

$$\frac{\text{Ladung mal Ort}}{\text{Volumen}}$$

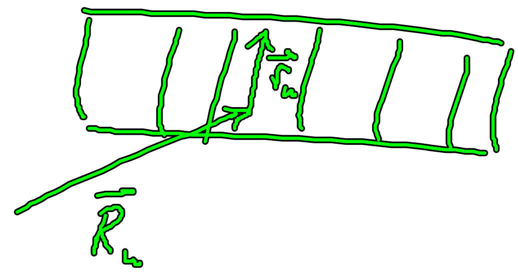
setze nun $\underline{H}$ an, Entwicklung nach Blochmoden

$$\underline{H}_{\text{Feld}} = \frac{1}{V}\sum_{1,2}\int d^3r\; e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\cdot\vec{r}}\; -q\vec{r}\; u^{*}_{\lambda_1 k_1}(r)\, u_{\lambda_2 k_2}(r)\; a^{+}_{\lambda_1 k_1}\, a_{\lambda_2 k_2}$$

analog Transport (1. VL)

$k_1 = k_2 \approx 0$ an Bandkante

$$\int d^3 r \rightarrow \sum_{R_n} \int d^3 r_n \;\hat{=}$$



Matrixelement:

$$= \frac{1}{V} \sum_{R_n} \int d^3 r_n \, u^*_{\lambda_1} u_{\lambda_2} (\mathbf{\cancel{R_n}} + r_n) \, e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\cdot(\vec{R}_n + \cancel{\vec{r}_n})} \, (-q) \underbrace{(\vec{R}_n + \vec{r}_n)}_{!} \, \vec{E}(\vec{R}_n + \cancel{\vec{r}_n})$$

vergleichbar von Variation über der El.-Zelle ✗

Gitterperiodizität der $u_\lambda (R_n + r_n) \rightarrow u(r_n)$

$$H_{Feld} = \frac{1}{V} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{R_n} \left(\delta_{\lambda_1 \lambda_2} \Omega_0 (-q \vec{R}_n) - q \int d^3 r_n \, u^*_{\lambda_1}(\vec{r}_n) \vec{r}_n \, u_{\lambda_2}(\vec{r}_n) \right) \cdot \vec{E}(R_n, t)$$

Elementarzellenvolumen

(Orthogonalität von $u_1^* u_2$)

$$a^\dagger_{\lambda_1 k_1} a_{\lambda_2 k_2}$$

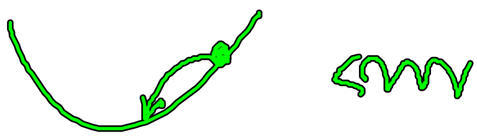
$$\sum_{R_n} \Omega_0 \rightarrow \int d^3 R$$

$$H_{-\text{Feld}} = \sum_{\lambda_1,\lambda_2} \frac{1}{V}\int d^3R\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{R}}\Big(\underbrace{-q\,\vec{R}\,\delta_{\lambda_1\lambda_2}}_{①} - \underbrace{\vec{d}_{\lambda_1\lambda_2}}_{②}\Big)\cdot\vec{E}(R,t)\, a^{+}_{\lambda_1 k_1}\, a_{\lambda_2 k_2}$$

Bemerkg.:

a) es zeigen sich 2 Anteile f. die WW mit optischem Feld

① Intrabandoptik (Vorgänge in einem Band)

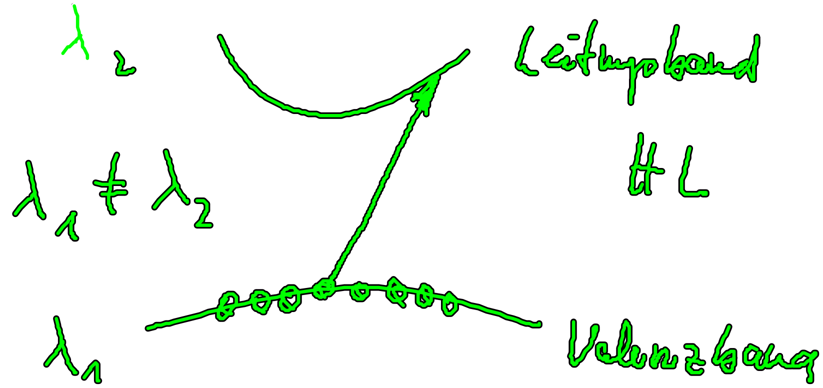


THz, bzw. f. statische Felder gelten die behandelten Transportgleichungen

② Interbandoptik (Vorgänge zw. verschiedenen Bändern)

wenn: $\vec{d}_{\lambda_1\lambda_2} \neq 0$ ist

$\vec{d}$ kann interpretiert werden als Erwartungswert des Dipolmoments:



b) Quelle der Maxwellgleichung:

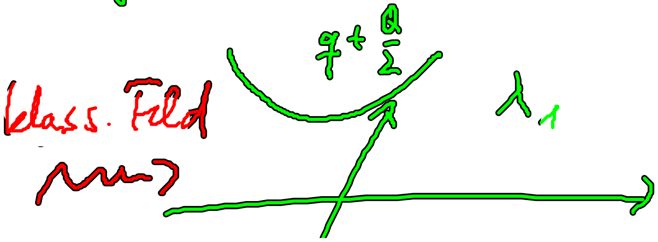
$$\vec{P}(R,t) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{E}} = \frac{1}{V}\sum_{Q} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \sum_{\lambda_1,\lambda_2} \vec{d}_{\lambda_1\lambda_2} \sum_{q} G^{\lambda_1\lambda_2}_{q+\frac{Q}{2}\, q-\frac{Q}{2}}$$

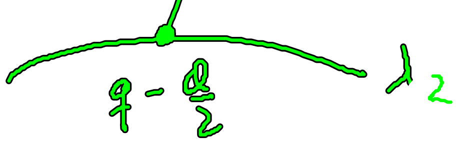
$$k_1 - k_2 = Q$$

$$\frac{k_1 + k_2}{2} = q$$

$$G = \langle a^{+}_{\lambda_1 q+\frac{Q}{2}} \, a_{\lambda_2 q-\frac{Q}{2}} \rangle$$

Die Dipoldichte $\vec{P}(R,t)$ ist gegeben als Summe über alle mögl. optisch Übergänge $\lambda_1 \to \lambda_2$, gewichtet mit Dipolmomenten.





2. Optische Übergänge im Zweibandmodell (Halbleiter)

um $\vec{P}$ zu bestimmen brauchen wir $\sigma^{\lambda_1\lambda_2}_{k_1k_2} = \langle a^\dagger_{\lambda_1 k_2}\, a_{\lambda_2 k_2}\rangle$

$$-i\hbar\,\partial_t \left(a^\dagger_{\lambda_1 k_1}\, a_{\lambda_2 k_2}\right) = \left[\underline{H}_{Feld},\, a^\dagger_{\lambda_1 k_1}\, a_{\lambda_2 k_2}\right]$$

Spezialisierung auf 2 Bänder $\lambda_1 \lambda_2 \rightarrow c, v$

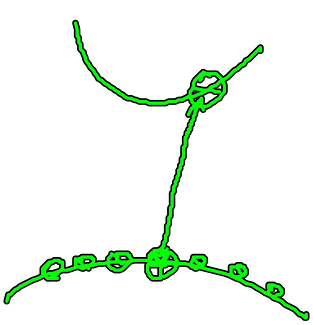
Erwartungswert $\longrightarrow$

$$-i\hbar\,\partial_t\, \sigma^{vc}_{k_1 k_2} = -\sum_Q \Big(\vec{d}_{cv}\cdot\vec{E}(Q,t)\, \sigma^{cc}_{k_1+Q\, k_2} - \vec{d}_{cv}\cdot\vec{E}(Q,t)\, \sigma^{vv}_{k_1, k_2-Q} \Big)$$

Besetzungswahrscheinlichkeit in den Bändern c, v

Übergangsamplitude f. Dipoldichte

werden angetrieben durch E-Feld das Impuls Q überträgt



Näherung:

a) Q sei klein, weil $\Rightarrow$ $Q \sim \frac{1}{\lambda} \sim \frac{\omega_L}{c} \ll q \approx \frac{1}{a_0}$

$\lambda \gg a_0$

Wellen- Brillouinzonengrenze
länge des
Lichts

$$E(Q,t) \approx E(t)\,\delta_{Q,0}$$

b) $\sigma^{cc} \approx 0$

$\sigma^{vv} \approx 1 \cdot \delta_{k_1 k_2}$

weil angenommen wird, daß Licht nur eine „schwache" Umbesetzg. der Zustände hervorruft (nicht mehr der Fall f. nichtlineare Optik)

$$\dot{\sigma}_q^{vc}\Big|_{H_{Feld}} = i\,\frac{\vec{d}_{cv}\cdot\vec{E}(t)}{\hbar} \equiv i\,\Omega(t)$$

$\frac{k_1+k_2}{2} = q$

Rabifrequenz

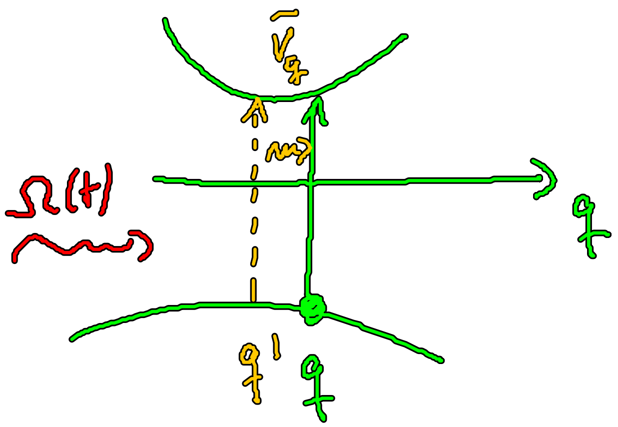
es muß noch der Anteil der Blochenergie ergänzt werden (für $Q=0$)

$$\dot{\sigma}_q^{vc} = i\left(-\frac{E_g}{\hbar} - \frac{\hbar q^2}{2m_{red}}\right)\sigma_q^{vc}$$ freie Bewegg.

$$+\, i\,\Omega(t)$$ Lichtfeld

$$+ i \sum_{q'} \tilde{V}_{q'} \, \sigma^{vc}_{q+q'}$$

Coulomb-WW (wasserstoffähnlich)



$\Omega(t)$ wirft die Übergangsamplitude σ^{vc}_q an ($\perp$ Übergänge)

die Übergänge sind über das Coulombpotential gekoppelt

Lichtfeld wirft also keine freie Übergänge

sondern renormierte Übergänge an

$\rightarrow$ Exzitonen

wie äußern sich diese Exzitonen in einem optischen Spektrum

3.) Halbleiterexzitonen

$$\sigma^{vc}_q \rightarrow P^{vc}_q \rightarrow P_q \quad (\text{„Polarisation"})$$

um Analogie zum H-Problem herzustellen,

Fourierraum :

$$i\hbar \dot{P}(r,t) = \underbrace{\left(E_g - \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2m_{red}} - V(r)\right)}_{H_{HA}} P(r,t) - \vec{E}(t)\,\vec{d}_{cv}\,\delta(\vec{r})\,V$$

$$\left(\sum_q e^{i\vec{q}\vec{r}} P_q \to P(r)\ ,\ \sum_q e^{i\vec{q}\vec{r}} \to \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3q\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = V\delta(\vec{r})\right)$$

der erste Teil der Gl. erinnert an Schrödingergl. des H-Atoms

man entwickelt $P(r,t)$ nach Eigenfunktionen des H-Atoms

$H_{HA}\,\psi_\nu = \varepsilon_\nu\,\psi_\nu$ ist bekannt

$$P(r,t) = \sum_\nu b_\nu(t)\,\psi_\nu(\vec{r})$$

ν ~ vollständiger Satz von Quantenzahl des H-Atoms

Koeffizient $b_\nu(t)$ sind zu ermitteln!

dazu Ansatz einsetzen, mit $\psi_\lambda^*(\vec{r})$ multiplizieren und über $\int d^3r$ integrieren $\to$

Dämpfg. der Oszillator zB El-Ph-WW

$$\dot{b}_\lambda(t) = -i\omega_\lambda b_\lambda(t) + i\Omega(t)\,V\,\psi_\lambda^*(\vec{r}=0) - \gamma b_\lambda$$

$$b(\omega) = \frac{i\Omega\,\psi_\lambda^*(r=0)\,V}{-i(\omega-\omega_\lambda)+\gamma}$$

zurück zur Dipoldichte: $(Q=0,$ 2 Bänder $)$

$$\vec{P} = \frac{1}{V}\sum_q \vec{d}_{vc}\, P_q(t) + \text{h.a.} \qquad (P_q = \sigma_q^{vc})$$

$$(d_{cv})$$

$$= \frac{1}{V}\sum_q \vec{d}_{vc}\, \underbrace{\frac{1}{N}\sum_r e^{-i\vec{q}\vec{r}}\, P(r,t)}_{\text{Fouriertrafo}}$$

$$\vec{P}(\omega) = \frac{\vec{d}_{vc}}{V}\, \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3q\, \frac{1}{V}\int d^3r\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, P(r,\omega)$$

$$\delta(\vec{r})$$

$$= \frac{\vec{d}_{vc}}{V}\, P(0,\omega)$$

$$\boxed{\vec{P}(\omega) = \frac{|d_{vc}|^2}{\hbar}\sum_\lambda |\psi_\lambda(0)|^2\, \frac{i\,E(\omega)}{-i(\omega-\omega_\lambda)+\gamma}}$$

Dipoldichte des 2-Band-Halbleiters,

kann dargestellt werden als Suszeptibilität $\chi(\omega)$ und $E(\omega)$

$$\vec{P}(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) \vec{E}(\omega)$$

$\chi(\omega)$ erlaubt dann die Berechnung von Brechzahl, Absorption, Reflexion ... in ED.

$$\underbrace{\mathrm{Im}\,\chi(\omega) \;\hat{=}\; \alpha(\omega)}$$

Absorption ist gegeben durch den Imaginärteil der Suszeptibilität $\chi(\omega)$.

$$\boxed{\mathrm{Im}\,\chi(\omega) = \frac{|d_{vc}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} \sum_\lambda \frac{\gamma\,|\psi_\lambda(r=0)|^2}{(\omega-\omega_\lambda)^2 + \gamma^2}}$$

$\simeq$ Absorption eines Zweiband-Halbleiters

Bemerkung:

a) die Formel heißt Elliot-Formel und beschreibt die Absorption als eine Summe über Lorentzfunktionen $\frac{\gamma}{(\omega-\omega_\lambda)^2+\gamma^2}$

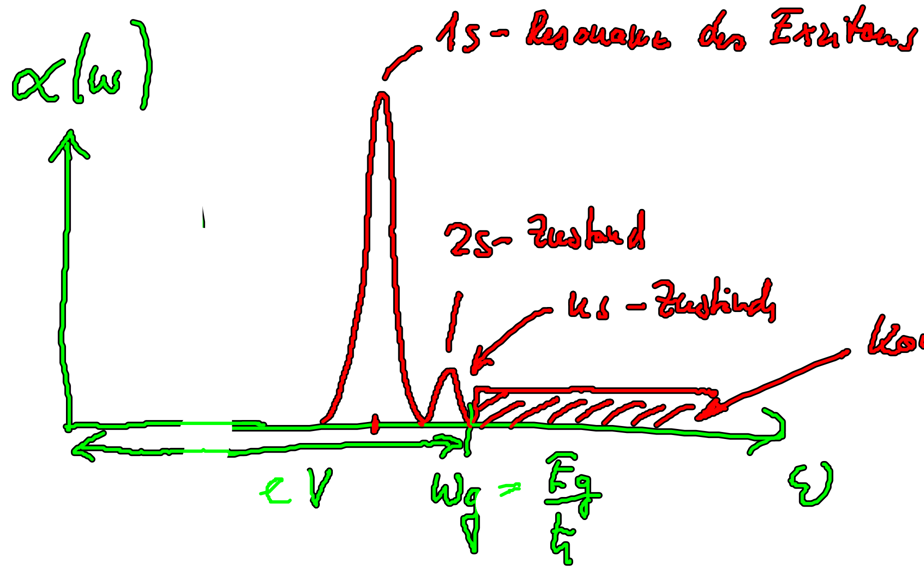
$\omega_\lambda = \frac{\varepsilon_\lambda}{\hbar}$, also die Resonanzfrequenz des Atoms

$$H_{HA}\,\Psi_\lambda = \varepsilon_\lambda\,\Psi_\lambda$$

(enthält aber auch E_{gap})

b) Absorption findet statt wenn El/Lo am selben Ort $|\Psi_\lambda(r=0)|^2 \neq 0$

Absorption ist prop. zu Dipolmatrixelement:



nur s-Zustand ermöglicht $|\Psi_\lambda(r=0)|^2 \neq 0$

Ionisierg. der El-Lo Paar, befinden sich nicht mehr im gebunden Zustand

Linienspektrum

+ Kontinuum