

# IX. Optische Eigenschaften und Exzitation

Nächste Woche Di: 16.6.15  
VL fällt aus!

## IX.1 Optische Absorption durch Interbandübergänge

Ziel des Abschnitts ist es opt. Übergänge zwischen Bändern in Halbleitern zu studieren.

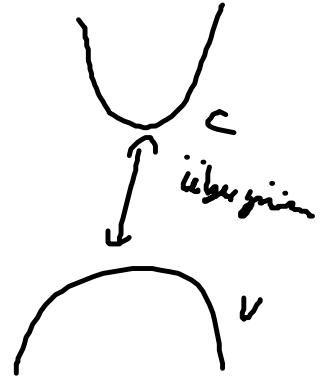
1. Schritt: Aufstellen des Hamiltonoperators

$$H_{\text{gel}} = \sum_k \sum_{\lambda=\nu, c} \epsilon_k^{\lambda} a_{\lambda k}^{\dagger} a_{\lambda k} \quad (\text{homogener Anteil})$$

Es fehlt die Elektron-Licht Wechselwirkung

Annahme Einphoton: Elektron-Licht Wechselwirkung im Dipolnäherung

$$H_{\text{el-Licht}} = \int dV_{\underline{r}} \underbrace{\psi^{\dagger}(\underline{r}) \underline{e} \cdot \underline{E}(\underline{r}) \psi(\underline{r})}_{\text{Dipolwechselwirkung}}$$



Dies ist 2. Quantisierung (nur der Anteil Band-Band Übergänge):

$$H_{\text{el-Licht}} = - \sum_k (a_{c, k}^{\dagger} a_{v, k} d_{cv, k} \underline{E}(k) + \text{h.c.})$$

Bemerkung: Die korrekte (!) Herleitung der Elektron-Licht Wechselwirkung ist sehr subtil wegen der Periodizität

Folgende Probleme treten auf:

- (i) Herleitung als Fundament. A-p Wechselwirkung  $H = \frac{(p - e\hbar A)^2}{2m}$   
(Addition in A-p gibt es oft Problem mit Term  $\propto A^2$ )

(ii) Die Dipol-Wechselwirkung wird über die Poincaré-Zienau-Wooley Transporter als der  $A \cdot p$  Wechselwirkung.

Problem dabei: a) periodische Randbedingungen  
 b) die Wahl der Einheitszellen  
 kann zu unterschiedlichen Ergebnissen führen,  
 falls Oberflächenintegrale berücksichtigt werden.

Das Lichtfeld wird in folgender klassischer behandelt.

Eine Theorie, die die Materie quantenmechanisch behandelt und das Lichtfeld klassisch nennt man „semiklassisch“.

Häufig wird für eine erste Charakterisierung, die Suszeptibilität des Materials verwendet  $\chi(\omega) = \frac{P(\omega)}{E(\omega)}$  für Absorptions-Exponent in linearer Optik!

Da  $\alpha(\omega) \propto \text{Im}(\chi(\omega))$

Wir müssen daher die Polarisation  $P(r, t)$  berechnen:  
Position des Nanostabes

$$\langle \hat{P}(r, t) \rangle = \int dV \chi^T(r, t) \cdot e \cdot \chi(r, t)$$

$\Downarrow$

$$\underline{P}(t) \propto \sum_k \underline{d}_{c, v, k} \underbrace{\langle a_{c, k}^\dagger a_{v, k} \rangle}_{\text{mikroskopische Polarisation}} + \text{c.c.}$$

Heisenberg Bewegungsgleichung für  $\langle a_{c, k}^\dagger a_{v, k} \rangle$

$$\partial_t \langle a_{c, k}^\dagger a_{v, k} \rangle = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c, k} - \epsilon_{v, k}) \langle a_{c, k}^\dagger a_{v, k} \rangle + \frac{i}{\hbar} \underline{d}_{v, k} \cdot \underline{E}(t) (\langle a_{v, k}^\dagger a_{v, k} \rangle - \langle a_{c, k}^\dagger a_{c, k} \rangle)$$

Beschreibt das (i) untere Band (ii) obere Band

$$\partial_t \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = -\partial_t \langle a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \rangle = \frac{i}{\hbar} \int dV_c \underline{E}(r,t) \cdot dV_c \langle a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \rangle - c.c.$$

Initial ist das System im Grundzustand  $\langle a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \rangle = 1$   
(voller Vakuum) und  $\langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = 0$ .

Kohärenzen sind in der Regel zerfallen  $\langle a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = 0$

In linearer Optik wird die Gleichung für die mikroskopische Polarisation  
(erste Ordnung in  $\underline{E}$ , ersetzt in Term mit  $\underline{E}$  alle Größen  
durch den Anfangswert)

$$\partial_t \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,k} - \epsilon_{v,k}) \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle + \frac{i}{\hbar} dV_c \underline{E}(t) (\underline{f}_{v,k}^0 - \underline{f}_{c,k}^0) - \gamma \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle$$

Bemerkung: In dem Fall ohne Vielteilchenwechselwirkungen  
wie (ob/owd), sind Größen mit verschiedenen  $k$   
komplett entkoppelt!  
↳ Phänomenologische  
Dämpfung.

Die Gleichung in nicht/linearem Fall mit man optische  
Blochgleichung!

Nächster Schritt Lösung in Fourier Raum!

$$i\omega \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle(\omega) = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,k} - \epsilon_{v,k} + i\gamma\hbar) \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle(\omega) + \frac{i}{\hbar} dV_c \underline{E}(\omega) (\underline{f}_{v,k}^0 - \underline{f}_{c,k}^0)$$

$$i\left(\omega - \frac{\epsilon_{c,k}}{\hbar} + \frac{\epsilon_{v,k}}{\hbar} - i\gamma\right) \langle a_{c,k}^\dagger a_{c,k} \rangle(\omega) = \frac{i}{\hbar} dV_c \underline{E}(\omega) (\underline{f}_{v,k}^0 - \underline{f}_{c,k}^0)$$

$$\langle a_{ck}^\dagger a_{ck} \rangle(\omega) = \frac{\frac{1}{\hbar} d_{vc,k} \cdot \underline{E}(\omega)}{i \left( \omega - \frac{\epsilon_{c,k}}{\hbar} + \frac{\epsilon_{v,k}}{\hbar} - i\gamma \right)} \quad (d_{vc,k}^0 - f_{c,k}^0)$$

Die Polarisation in Frequenz

$$\underline{P}(\omega) = \sum_k \frac{d_{vc,k}^x d_{vc,k} \cdot \underline{E}(\omega)}{\hbar \omega - \epsilon_{c,k} + \epsilon_{v,k} - i\gamma} \quad (d_{vc,k}^0 - f_{c,k}^0)$$

Die Absorption ist  $\alpha(\omega) \propto \text{Im} \underline{Z}(\omega)$  in ersten Näher.

Wir nehmen jetzt  $\gamma \rightarrow 0$  (Es gilt  $\frac{1}{\omega + i\gamma} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \mathcal{P} \frac{1}{\omega} + i\delta(\omega)$ )

$$\alpha(\omega) \propto \sum_k |d_{vc,k}|^2 (d_{vc,k}^0 - f_{c,k}^0) \delta(\hbar\omega - \epsilon_{c,k} + \epsilon_{v,k})$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{c,k} - \epsilon_{v,k} &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_c} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} k^2 \\ &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_c} k^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h} k^2 \\ &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_r} k^2 \end{aligned}$$

$\uparrow$  negativ  
 $\uparrow$  Lochmasse

mit der reduzierten Masse  $\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_v} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_h}$

Die Besetzung im Valenz  $f_{v,k}^0$  wird als Lochbesetzung, also Änderung bzgl. des Gleichgewichtswerts  $(1 - f_{v,k}^0)$

$$\alpha(\omega) \propto \sum_k |d_{vc,k}|^2 (1 - f_{v,k}^0 - f_{c,k}^0) \delta(\hbar\omega - E_g - \frac{\hbar^2}{2m_r} k^2)$$

Nächster Schritt Umwandlung in ein Integral

(für die Fälle 3D (Bulk), 2D (Well), 1D (Wire))

unter der Annahme eines isotropen Bandes.

$$\alpha(\omega) \propto \frac{1}{(2\pi)^d} \Omega_d \int_0^\infty dk k^{d-1} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_g + \underbrace{E_0^{(d)}}_{(1 - f_e^0 - f_h^0)} - \hbar\omega\right)$$

↑  
Raumwinkel  
in d-Rn
↑  
Nullpunktsenergie  
in eingeschränktem  
Raumrichtung

Nächstes Schritt Variable substituieren

$$x = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} x^{\frac{1}{2}}$$

Subste

$$E_0^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$$

↑  
Länge in eingeschränkter  
Richtung  
(wie Tiefer Kasten)

$$dk = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{x^{\frac{1}{2}}}$$

Wir erhalten dann:

$$\alpha(\omega) \propto \frac{1}{(2\pi)^d} \Omega_d \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} \int_0^\infty dx x^{\frac{(d-2)}{2}} \delta(x + E_g + E_0^{(d)} - \hbar\omega)$$

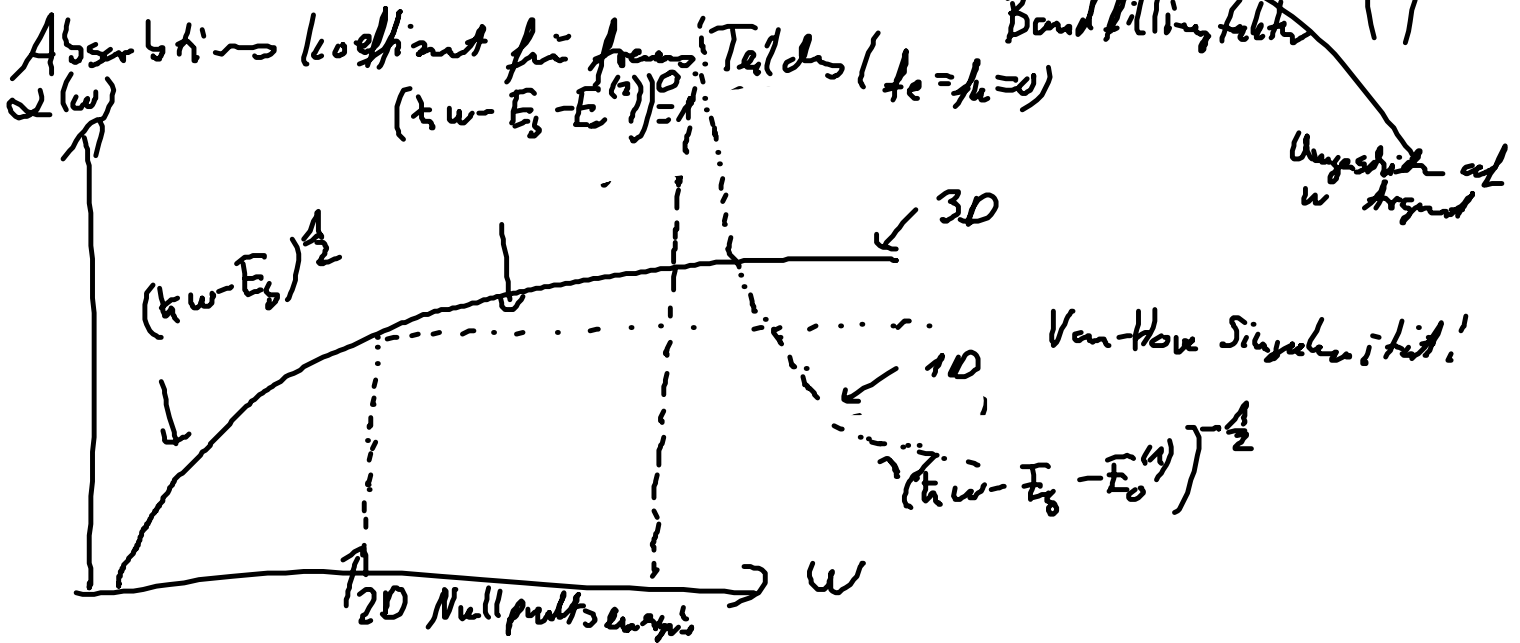
(1 - f\_e^0(x) - f\_h^0(x))

ergibt:

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} (\hbar\omega - E_g - E_0^{(d)})^{\frac{(d-2)}{2}} \Theta(\hbar\omega - E_g - E_0^{(d)})$$

(1 - f\_e(\omega) - f\_h(\omega))

Band filling factor



# IX.2 Exziton gebundenes Elektron-Loch-paar

Schon wie wir die m.kroskopische Polarisation gemacht:

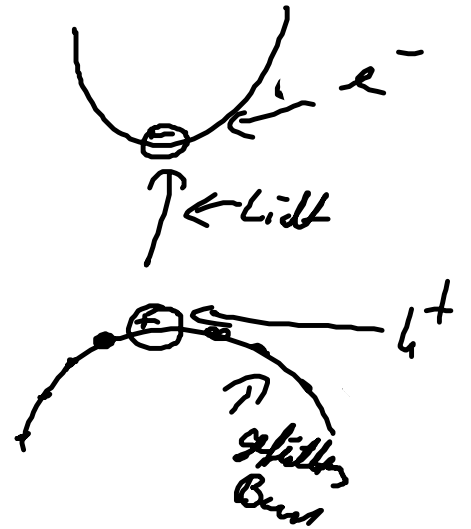
$e_k^+ = a_{k,4}^+$   
Elektron bleibt Elektron

Beide Fermi!

$$[e_{k'}, e_k^+]_{\pm} = \delta_{kk'}$$

$$[h_{k'}, h_k^+]_{\pm} = \delta_{kk'}$$

$(a_{k,4}^+)$   
könnte als  
 $h_k^+ = a_{k,4}^+$   
als Erzeugoperator  
aus Loches aufgefaßt  
werden.



Im Prinzip wird beschrieben dass ein Elektron-Loch Paar durch Licht erzeugt wird!

T-Kommutator: Das ist analog zu Elektron, Positron Paarverzeugung durch Gammastrahlung!

D.h. durch Lichtanregung entsteht ein positiv und ein negativ geladene Teilchen! Diese müssen sich durch Coulomb Wechselwirkung anziehen!

Nächster Schritt Coulomb hinzufügen!

Hamiltonoperator der Coulomb-Wechselwirkung:

$$H_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ \lambda, \lambda' \\ q \neq 0}} V_q a_{\lambda k}^+ a_{\lambda' k' - q}^+ a_{\lambda' k} a_{\lambda k}$$

Wir haben nur die Terme behalten, die die Anzahl der Elektronen innerhalb eines Bandes erhält!

( Vernachlässigung von Impuls-Transfer, (arriviert multipliziert etc. aber unwahrscheinlich wegen Energieerhaltung. )

Konkrete Form für Valenz- und Leitungsband:

$$H_{\text{coh}} = \frac{A}{2} \sum_{k, k', q \neq 0} V_q \left( \underbrace{a_{c, k+q}^\dagger a_{c, k}^\dagger}_{\text{Intrabandtrans. Leitungsband (A)}} a_{c, k'} a_{c, k} + \underbrace{a_{v, k+q}^\dagger a_{v, k'-q}^\dagger}_{\text{Intrabandtrans. Valenzband (B)}} a_{v, k'} a_{v, k} \right) + 2 \underbrace{a_{c, k+q}^\dagger a_{v, k'-q}^\dagger}_{\text{Interbandtrans. (C)}} a_{v, k'} a_{c, k}$$

Zunächst Konstruktion des Grundzustands vor optischer Anregung

$$|\phi_0\rangle = \prod_k a_{v, k}^\dagger |0\rangle \quad (\Leftrightarrow) \quad \text{Valenzzustand}$$



Der Grundzustand muss ein Eigenzustand sein.

komplett gefülltes Valenzband

Darüber ist der nächste Schritt zu überlegen, wie die verschiedenen Coulombanteile auf  $|\phi_0\rangle$  wirken.