

# IX.2 Exzitonen gebundene Elektron-Lochpaare

Wiederholung

Coulomb Kopplung:

$$H_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{kk' q \neq 0} V_q \left( a_{ck+kq}^\dagger a_{ck'-q}^\dagger a_{c'k'} a_{ck} \right)$$

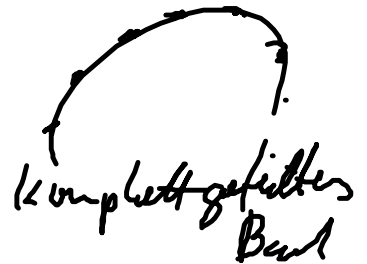
(a)

$$+ a_{v,k+kq}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v'k'} a_{v,k} + 2 a_{c,k+kq}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v'k'} a_{c,k}$$

(b) (c)

Restriktion des Grundzustands

$$|\phi_0\rangle = \prod_k a_{vk}^\dagger |0\rangle \quad (=)$$



Fortssetzung:

Wir sehen uns die Wirkung der verschied. Anteile der Coulomb Kopplung an!

Ziel: Grundzustandsenergie und Modifikation

(a)

$$H_{\text{Coul}} |a\rangle |\phi_0\rangle = 0, \quad \text{da } a_{ck} a_{ck} |\phi_0\rangle = 0$$

da kein Leitungsbandzustat besetzt ist.

(c)  $H_{\text{Coul}} |c\rangle | \phi_0 \rangle = 0$ , da  $a_{c,k} | \phi_0 \rangle = 0$   
 kein Elektron im Leiterbild

(a) und (c) haben keine Bedeutung zur Grundzustatsenergie

(B)  $H_{\text{Coul}} |B\rangle | \phi_0 \rangle \neq 0$  Wegen  $a_{v,k}^{\dagger} a_{v,k}^{\dagger} a_{v,k} a_{v,k} | \phi_0 \rangle$   
 Valenzband ist voll besetzt.

Es ist nicht klar wie später bei Präzision des Elektron-Leit-  
 Paares, die Ladungsenergie behandelt.

TODO: Neuformulierung in Elektron-Leit Bild für  
 Coulomb-Wechselwirkung.

$$H_{\text{Coul}} |B\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0}} V_q h_{k+q} h_{k'-q} h_{k,k'}^{\dagger} h_k^{\dagger} \quad (\text{Nicht Normalordnung})$$

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

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0}} V_q \left( \delta_{k'-q, k} h_{k+q} h_k^{\dagger} - \delta_{k', k+q} h_{k'-q} h_k^{\dagger} + \delta_{k, k'-q} h_{k,k'}^{\dagger} h_{k+q} \right. \\ \left. - h_{k,k'}^{\dagger} h_{k'-q} \delta_{k+q, k} + h_{k,k'}^{\dagger} h_k^{\dagger} h_{k+q} h_{k'-q} \right)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{q=0}$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0}} V_q \underbrace{h_{k,k'}^{\dagger} h_k^{\dagger} h_{k+q} h_{k'-q}}_{\text{(i) Intra-band Streuung der Löcher}} + \frac{1}{2} \sum_{k,q} V_q \underbrace{(2 h_k^{\dagger} h_k - 1)}_{\substack{\text{Bandrennung} \\ \text{(ii)}}} \underbrace{\hspace{2em}}_{\substack{\text{Grundzustats-} \\ \text{energie-} \\ \text{anteil!} \\ \text{(iii)}}}$$

$$H_{\text{Coul}} |B\rangle_{\text{(i)+(ii)}} | \phi_0 \rangle = 0$$

$$H_{\text{Coul}} |B\rangle_{\text{(iii)}} | \phi_0 \rangle = \sum_{k,q} V_q | \phi_0 \rangle$$

Umformung der restlichen Teile des Coul. Ham-Op.

---


$$H_{\text{Coul}} |a\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0}} V_q e_{k+q}^{\dagger} e_{k'-q}^{\dagger} e_k e_{k'} \quad (\text{Wohl so wie es ist!})$$

$$\begin{aligned}
 H_{\text{coul}} |c\rangle &= \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i(k+k') \cdot r} \underbrace{h_{k+k'}^+ h_{k'}^+}_{q \neq 0 \text{ da } -q, k'} e^{-i(k+k') \cdot r} \\
 &= - \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i(k+k') \cdot r} h_{k'}^+ h_{k+k'} e^{-i(k+k') \cdot r} \\
 &= - \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i(k+k') \cdot r} h_{k'-q}^+ h_{k'} e^{-i(k+k') \cdot r}
 \end{aligned}$$

(Normal order vorzeichen)

Nächster Schritt: Konstruieren der Exziton Wellenfunktion

$$|k_1, k_2\rangle = e_{k_1}^+ h_{k_2}^+ |\phi_0\rangle \quad (\text{Basis-Element})$$

Ziel  $\Rightarrow$  Brechov sehen Zustand  $\Rightarrow$  Schrödingergl. (Eigenwert)

$$H \psi = E \psi$$

Freie Teilchen

$$H_0 |k_1, k_2\rangle = \left( E_g + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_h} \right) |k_1, k_2\rangle$$

Coulomb Wechselwirkung

$$\begin{aligned}
 H_c |k_1, k_2\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i(k+k') \cdot r} e^{+i(k+k') \cdot r} e_{k'} e_{k'} |k_1, k_2\rangle \quad = 0 \text{ wenn } e^- \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{k, k', q \neq 0} V_q h_{k+k'}^+ h_{k'}^+ h_{k+k'} h_{k'} |k_1, k_2\rangle \quad = 0 \text{ wenn } e^+ \\
 &+ \underbrace{\sum_{k, q} V_q h_k^+ h_k}_{\sum_q V_q} |k_1, k_2\rangle \quad \text{enthält ein Loch mit } k_2 \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{k, q} V_q |k_1, k_2\rangle
 \end{aligned}$$

$$- \sum_{\substack{q \neq 0 \\ k, k'}} V_q e^{i(k+k')x} e^{i(k'-q)y} e^{i(k_1, k_2)} \underbrace{\delta_{k+k', k_1} \delta_{k', k_2}}_{\delta_{k+k', k_1} \delta_{k', k_2}} \underbrace{\delta_{k+k', k_1} \delta_{k', k_2}}_{\delta_{k+k', k_1} \delta_{k', k_2}} |k_1+q, k_2-q\rangle$$

Insight:

$$(H - E_{\text{ground}}) |k_1, k_2\rangle = \left( E_g + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_h} + \sum_q V_q \right) |k_1, k_2\rangle + \sum_{q \neq 0} V_q |k_1+q, k_2-q\rangle$$

Austauschenergie, Selbstenergie des Exzitons.

Überlagerung in Ortsraum

$$|r_1, r_2\rangle = N \sum_{k_1, k_2} e^{i(k_1 \cdot r_1)} e^{i(k_2 \cdot r_2)} |k_1, k_2\rangle \quad N = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

$$(H - E_{\text{ground}}) |r_1, r_2\rangle = N \sum_{k_1, k_2} \left( E_g + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_h} + E_{\text{exc}} \right) e^{i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)} |k_1, k_2\rangle + N \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ q \neq 0}} V_q e^{i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)} |k_1+q, k_2-q\rangle$$

$$= N \sum_{k_1, k_2} \left( E_g - \frac{\hbar^2 \Delta_{r_1}}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \Delta_{r_2}}{2m_h} + E_{\text{exc}} \right) e^{i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)} |k_1, k_2\rangle$$

$$+ N \sum_{q \neq 0} V_q e^{iq \cdot (r_2 - r_1)} \sum_{k_1, k_2} e^{i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)} |k_1, k_2\rangle$$

Farringtonsfunktion des Coulombpot.

$$(H - E_{\text{gem}})(r_1, r_2) = \left( E_g - \frac{\hbar^2 \Delta_{r1}}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \Delta_{r2}}{2m_n} + E_{\text{exc}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right) |r_1, r_2\rangle$$

Definiere Exziton Wellenfunktion:  
 $\langle 2 | \quad \langle \psi(r_1, r_2) =: \psi(k_1, k_2)$

$$(H - E_{\text{gem}}) \psi(r_1, r_2) = \left( E_g - \frac{\hbar^2 \Delta_{r1}}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \Delta_{r2}}{2m_n} + E_{\text{exc}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right) \psi(r_1, r_2) = E \psi(r_1, r_2)$$

Separation der Relativ- und Schwerpunktsbewegung:

$$\psi(r_1, r_2) = \underbrace{\psi_{\text{rel}}(\underbrace{r_1 - r_2}_r)}_{\psi} \underbrace{\mathcal{R}\left(\frac{m_e r_1 + m_n r_2}{m_e + m_n}\right)}_{\mathcal{R}}$$

Ergebnis der Variablen Transformation:  $= \mathcal{R}$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathcal{R}} + \underbrace{V_{\text{Dis}}(\mathcal{R})}_{\text{alt mit Disorderpotential (hier nicht benutzt)}} \right) \mathcal{R}(\mathcal{R}) = E_{\text{schw}} \mathcal{R}(\mathcal{R})$$

mit  $M = m_e + m_n$  alt mit Disorderpotential (hier nicht benutzt)

Schwerpunktsbewegung ohne Disorderpotential ist dies wie frei Teilchen mit der Masse  $M = m_e + m_n$

$$E_{\text{schw}} = \frac{\hbar^2}{2M} k^2$$

$$1) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_r} \Delta_r + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{1}{|r|} + E_g + E_{\text{exc}} \right) \psi_{\text{rel}}(r) = E \psi_{\text{rel}}(r)$$

Wannier Gleichung

Die Form kann wir von H-Atom (all I)

Nur die Masse  $m$  wird durch die reduzierte Masse  $\frac{A}{m_p}$  ersetzt  
 und  $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_c \epsilon_v$

Folgende Konsequenzen

In 3D: Die separierten Energien sind

$$E_n = -E_0 \frac{A}{h^2} + \text{const} \quad \text{mit} \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_p a_0^2}$$

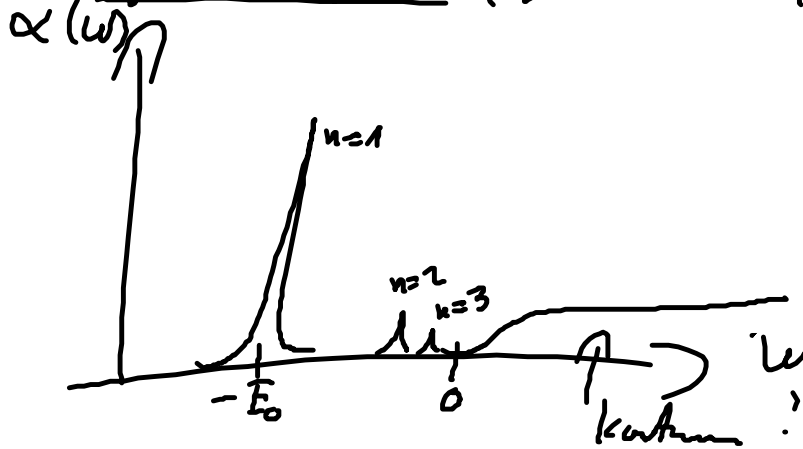
mit  $n = 1, 2, \dots$

mit dem Bohr Radius  $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi \epsilon_v \epsilon_c}{e^2 m_p}$  ← eff.  $\epsilon_v$   
 ← reduzierte Masse

Typische Werte für  $E_0 = 1 \text{ meV}$  (In Sb)  
 $\propto 8 \text{ meV}$  (GeAs)  
 $\propto 30-40 \text{ meV}$  (CdSe, ZnTe)

Zurück Absorbieren  $\propto TMDs$  noch stärker

Typischer Spalt (Absorbieren) (Vergleich)



Kurzweiliger Intermediatnanostруктур:

In Antennellen kann sich die Exzitation in 2D bewegen.

Für idealisiertes 2D gilt es auf analytische Lösung  
 des H-Atom Problems (s. Hany Koch, Quantum Theory of the  
 optical and electronic Properties of  
 Semiconductors)

Die gebundenen Energien in 2D sind

$$E_n = -E_0 \frac{1}{(n + \frac{1}{2})^2} \quad \text{mit } n=0, 1, \dots$$

Damit ist  $E_{n=0} = -4 E_0$  viermal größer als in 3D!

Die höheren Bindungsenergien, kann damit erklärt werden, dass  
 bei Verringerung der Ausdehnung in Richtung der ungesättigten  
 Dimension, die optischen Übergänge nicht beobachtet werden kann

Dies führt zum Beibehalten von p-Übergängen, was ein höheres Energieniveau  
 erzeugt. | Dies führt gleichzeitig zur Verringerung des  
 Exc. Bohrradius ( $\frac{a_0}{2}$  in 2D und  $a_0$  in 3D)

In 1D:

$$E_1 = -E_0 \frac{1}{4}$$

↑ komplizierter Zusammenhang

$E_{10}$  kann  $5 E_0$  ergeben. Für  $\lambda_n \rightarrow \infty$  für große  $n$

Berechnung Absorptions spektrum der Exzitonen (Slits)

Dafür Licht anfordern:

$$H_{el\text{-licht}} = - \left( \sum_k e_k^+ h_k^+ \underline{d_{elk}} \cdot \underline{E}(t) + h.c. \right)$$

Berechnung während des Exzitons:

$$\langle \phi_0 | H_{el\text{-licht}} | k_1, k_2 \rangle$$

$$= \langle \phi_0 | - \sum_k h_{1c} e_{k_1} d_{k_2} \cdot \underline{E}(t) e_{k_1}^+ h_{k_2}^+ | \phi_0 \rangle$$

$\underbrace{- e_{k_1}^+ e_{k_2} + \delta_{k_1 k_2}}_{\delta'}$

$$= - \underline{d_{c v k_1}} \cdot \underline{E}(t) \delta_{k_1 k_2}$$

Übersetzen in den Ortsraum:

$$\langle \phi_0 | \text{Hed-Lied} | \psi_{k_1, k_2} \rangle = N \sum_{k_1, k_2} d_{c v i} \cdot \underline{E}(t) \delta_{k_1 k_2} e^{i(k_{x1} \cdot x_1 + k_{y1} \cdot y_1)}$$

$$= N \sum_{k_1} \underbrace{e^{i k_1 (x_1 + y_1)}}_{\delta(x_1 + y_1)} d_{c v i} \cdot \underline{E}(t)$$

$$\langle \phi_0 | \text{Hed-Lied} | \psi \rangle \propto N \int d^3 \underline{R} \psi_{\text{rel}}(0) \chi(\underline{R}) \underline{d_{c v k}} \cdot \underline{E}(t)$$

Bemerkung: Bei dem Wechsel für Schwingungsbewegung

$$\chi_{\underline{k}}(\underline{R}) = e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}} \Rightarrow \int d^3 \underline{R} e^{i \underline{k} \cdot \underline{R}} \propto \delta(\underline{k})$$

$\Rightarrow \underline{k} = 0!$  Nur ruhende Exzitonen werden angeregt.

Ausdr.:  $|\psi\rangle = c^0(t) |\phi_0\rangle + \sum_{\nu} c_{\nu}(t) |\psi_{\nu}\rangle$   
in Schrödingl.!

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = (H_0 + \text{Hed-Lied}) |\psi\rangle$$

$$i \dot{c}^0(t) |\phi_0\rangle + \sum_{\nu} \dot{c}_{\nu}(t) |\psi_{\nu}\rangle = \sum_{\nu} E_{\nu} c_{\nu}(t) |\psi_{\nu}\rangle$$

$$+ \sum_{\nu} c_{\nu} \langle \phi_0 | \text{Hed-Lied} | \psi_{\nu} \rangle |\phi_0\rangle$$

$$+ \sum_{\nu} c_0 \langle \psi_{\nu} | \text{Hed-Lied} | \phi_0 \rangle |\psi_{\nu}\rangle$$

Jetzt  $\langle \phi_0 |$  und  $\langle \psi_{\nu} |$  von links anwenden:



$$i\hbar \dot{c}_0(t) = c_\nu \langle d_0 | H_{el} | \psi_\nu \rangle$$

$$i\hbar \dot{c}_\nu(t) = c_0 \langle \psi_\nu | H_{el} | d_0 \rangle + c_\nu (E_\nu)$$

Annahme: System bei  $t=0$  im Zustand  $\phi_0$  mit d. Ordnung störungstheorie

$$i\hbar \dot{c}_0^{(1)}(t) = 0 \Rightarrow \dot{c}_0^{(1)} = \text{const} = 0, c_0^{(0)} = 1$$

$$i\hbar \dot{c}_\nu^{(1)} = \langle \psi_\nu | H_{el} | d_0 \rangle + c_\nu (E_\nu)$$

Lösung in Fourier-Reihe

$$c_\nu^{(1)}(\omega) \propto \frac{\langle \psi_\nu | H_{el} | d_0 \rangle(\omega)}{(\omega - \frac{E_\nu}{\hbar}) + i\gamma}$$

Polarisierung:  $P^{(1)}(t) = \sum_\nu \langle \psi_\nu | z | \phi_0 \rangle c_\nu^{(1)} c_0^{(0)} + \dots + c.c.$

Rechnung analog im Freifeld ergibt:

$$\chi(\omega) = -2 |d_{cv}|^2 \sum_\nu |\psi_\nu(r=0)|^2 \left[ \frac{1}{\hbar(\omega + i\gamma) - E_\nu} - \frac{1}{\hbar(\omega + i\gamma) + E_\nu} \right]$$

für räumlich homogenes System.

Dies ergibt das vorher skizzierte Spektrum!