

# IX.2 Exzitonen als sekundäre Elektron-Lochpaar

Wiederholung

Coulomb Kopplung:

$$H_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{kk' \neq 0} V_{\xi} \left( \underbrace{a_{c, k+\xi}^{\dagger} a_{c, k'-\xi}^{\dagger} a_{c, k'} a_{c, k}}_{(a)} + \underbrace{a_{v, k+\xi}^{\dagger} a_{v, k'-\xi}^{\dagger} a_{v, k'} a_{v, k}}_{(b)} + 2 \underbrace{a_{c, k+\xi}^{\dagger} a_{v, k'-\xi}^{\dagger} a_{v, k'} a_{c, k}}_{(c)} \right)$$

Restriktion des Grundzustands

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

komplett gefülltes Band

Fortssetzung:

Wir sehen uns die Wirkung der verschiedenen Anteile der Coulomb Kopplung an!

Ziel: Grundzustandsenergie und Modifika-

(a)  $H_{\text{Coul}} |a\rangle |\phi_0\rangle = 0$ , da  $a_{c, k} a_{c, k} |\phi_0\rangle = 0$   
da kein Leitungsband besetzt ist.

(c)  $H_{\text{Carl}} |c\rangle |0\rangle = 0$ , da  $a_{k+1} |0\rangle = 0$   
 kein Elkt in Leiterband

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

(B)  $H_{\text{Carl}} |B\rangle |0\rangle \neq 0$  Wegen  $a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} |0\rangle$   
 Valenzband ist voll besetzt.

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

TODO: Transformation in Elektron-Leiter Bild für Coulomb-WW.

$$H_{\text{Carl}} |B\rangle = \frac{1}{2} \sum_{k, k'} V_{\nu} h_{k+\nu} h_{k-\nu} h_k^{\dagger} h_k \quad (\text{Nicht Normal order})$$

$[h_k, h_k^{\dagger}]_{\pm} = \delta_{k,0}$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k, k'} V_{\nu} \left( \delta_{k-k', \nu} h_{k+\nu} h_k^{\dagger} - \delta_{k', k+\nu} h_{k-\nu} h_k^{\dagger} + \delta_{k, k'+\nu} h_k^{\dagger} h_{k+\nu} \right. \\ \left. - h_k^{\dagger} h_{k-\nu} \delta_{k+\nu, k'} + h_k^{\dagger} h_k^{\dagger} h_{k+\nu} h_{k-\nu} \right)$$

$\delta_{k-k', \nu}$   
 $\delta_{k', k+\nu}$   
 $\delta_{k, k'+\nu}$   
 $\delta_{k+\nu, k'}$   
 $\delta_{k,0}$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k, k'} V_{\nu} \underbrace{h_k^{\dagger} h_k^{\dagger} h_{k+\nu} h_{k-\nu}}_{\text{(i) Intra band Streuung der Löcher}} + \frac{1}{2} \sum_{k, k'} V_{\nu} \underbrace{(2 h_k^{\dagger} h_k - 1)}_{\text{Bandrennung (ii) Grundzustandsenergie-anteil! (iii)}}$$

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

$$H_{\text{Carl}} |B\rangle_{\text{(iii)}} |0\rangle = \sum_{k, k'} V_{\nu} |0\rangle$$

Umformung der restlichen Teile des Carl. Ham.-Op.

$$H_{\text{Carl}} |a\rangle = \frac{1}{2} \sum_{k, k'} V_{\nu} e_{k+\nu}^{\dagger} e_{k-\nu}^{\dagger} e_k e_k \quad (\text{bleibt so wie so ist!})$$

$$H_{\text{Coul}} |c\rangle = \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i k \cdot r} \underbrace{h_{k'+q}^+ h_{k'}^+}_{q \neq 0 \text{ oder } k'=0} e_{k'} |c\rangle \quad (\text{Normalordnung beachten})$$

$$= - \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i k \cdot r} h_{k'}^+ h_{k'+q}^+ e_{k'} =$$

$$= - \sum_{k, k', q \neq 0} V_q e^{+i k \cdot r} h_{k'-q}^+ h_{k'}^+ e_{k'}$$

Nächster Schritt: Konstruktion der Exziton Wellenfunktion

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

Ziel  $\Rightarrow$  Brechv. setzen  $\Rightarrow$  Schrödinger-Gl. (Eigenwert)

$$H ? = E ? \cdot$$

Frei 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

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

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

Insight:

$$(H - E_{\text{quad}}) |k_1, k_2\rangle = \left( E_0 + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \sum_q V_q \right) |k_1, k_2\rangle \\ + \sum_{q \neq 0} V_q |k_1 + q, k_2 - q\rangle$$

Austausch auszu, Selbstauszu  
des Exzitons.

Überlagerung im Ortsraum

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

$$(H - E_{\text{quad}}) |r_1, r_2\rangle = N \sum_{k_1, k_2} \left( E_0 + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + E_{\text{exc}} \right) e^{i(k_1 r_1 + k_2 r_2)} |k_1, k_2\rangle \\ + N \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ q \neq 0}} V_q e^{i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)} |k_1 + q, k_2 - q\rangle$$

$$= N \sum_{k_1, k_2} \left( E_0 - \frac{\hbar^2 \Delta_{k_1}}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \Delta_{k_2}}{2m_2} + E_{\text{exc}} \right) e^{i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)} |k_1, k_2\rangle$$

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

Fazit: Austausch des Coulombpot.

$$(H - E_{\text{ges}}) |\psi_1, \psi_2\rangle = \left( E_3 - \frac{\hbar^2 \Delta_{x_1}}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \Delta_{x_2}}{2m_2} + E_{\text{osc}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x_1 - x_2|} \right) |\psi_1, \psi_2\rangle$$

Definiere Exziton Wellenfunktion:  
 $|\psi\rangle \quad \langle \psi | \psi_1, \psi_2 \rangle =: \psi(x_1, x_2)$

$$(H - E_{\text{ges}}) \psi(x_1, x_2) = \left( E_3 - \frac{\hbar^2 \Delta_{x_1}}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \Delta_{x_2}}{2m_2} + E_{\text{osc}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x_1 - x_2|} \right) \psi(x_1, x_2) =: E \psi(x_1, x_2)$$

Separation der Relativ- und Schwingungsabhangigkeit:

$$\psi(x_1, x_2) = \underbrace{\psi_{\text{rel}}(\underbrace{x_1 - x_2}_R)}_R \underbrace{\mathcal{Z}\left(\frac{m_2 x_1 + m_1 x_2}{m_1 + m_2}\right)}_R$$

Ergebnis der Variablen Transformation:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R + \underbrace{V_{\text{osc}}(R)}_{\text{osc}} \right) \mathcal{Z}(R) = E_{\text{schw}} \mathcal{Z}(R)$$

mit  $M = m_1 + m_2$  osc mit Dispersionspotential (hier nicht wichtig)

Schwingungsabhangigkeit ohne Dispersionspotential ist die eines freien Teilchens mit der Masse  $M = m_1 + m_2$

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

$$1) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{x_1} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x_1|} + E_3 + E_{\text{osc}} \right) \psi_{\text{rel}}(x) = E \psi_{\text{rel}}(x)$$

Wannier Gleichung

Die Form kann wir von H-Atom (A1.1)

Nur die Masse wirkt durch die reduzierte Masse  $\frac{A}{m_p}$  ersetzt  
und  $E_0 \rightarrow E_c, E_v$

Folgende Konsequenzen

In 3D: Die gebundenen 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  $n = 1, 2, \dots$

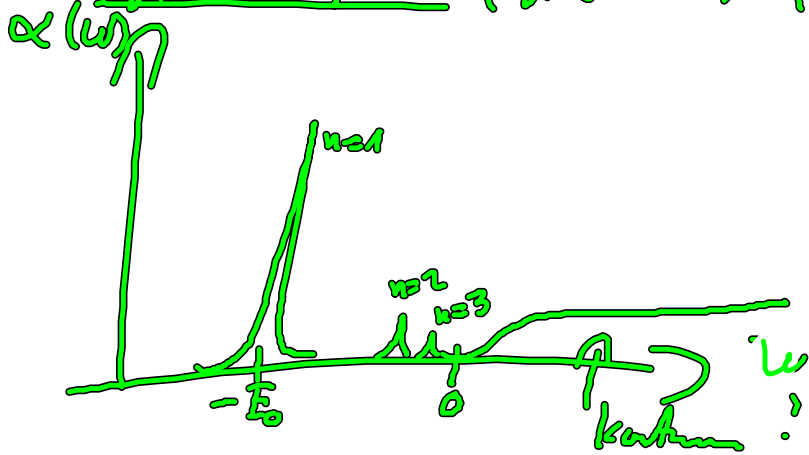
mit der Bohr-Radius  $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi \epsilon_0 \epsilon_r}{e^2 m_p}$

$\leftarrow$  offenes  $E_v$   
 $\leftarrow$  reduzierte Masse

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

Zurück Absorbieren sind  $\propto$  TMDs noch stärker

Typischer Spalte (Absorption) (Kymit)



Kurzes Intervalle: Inhomogenitäten:

In Antennennetzen kann sich in Exzitation in 2D bewegen.

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

Die gebundenen Energien in 2D ist

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

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

Die höhere Bindungsenergie, kann damit erklärt werden, dass  
 bei Verringerung der Ausdehnung in Richtung der niedrigsten  
 Dimension, die spinale Symmetrie nicht beibehalten werden kann

Dies führt zum Bedürfnis von p-Orbitalen, was ein höheres Energie  
 erzeugt. Dies führt gleichzeitig zur Verengung des  
 Exc. Bandes (das  $\frac{a_0}{2}$  in 2D und  $a_0$  in 3D)

In 1D:

$$E_1 = -E_0 \frac{1}{1/2^2}$$

↑  
 1 komplettes Wellenpaket

$E_0$  kann  $5 E_0$  ergeben. Für  $1_n \rightarrow 0_n$  für große  $n$

Berechnung Absorptions spektrum der Exzitonen (Skizze)

Daher Licht aufnehmen:

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

Berechnung mittels des Erhab:

$$\langle \phi_0 | H_{el-licht} | k_n h_n \rangle$$

$$= \langle \phi_0 | - \sum_k h_{1c} c_k \underbrace{d_{ck} \cdot E(t)}_{-\underbrace{c_k^\dagger c_k + \delta_{ck}}_{\delta^c}} c_k^\dagger h_{2c}^\dagger | \phi_0 \rangle$$

$$= - d_{cvc_1} \cdot E(t) \delta_{k_1 k_2}$$

Übrigens in den Ortsraum:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | \text{Hed-Liat} | k_1, k_2 \rangle &= N \cdot \sum_{k_1 k_2} d_{cv} \cdot E(t) \delta_{k_1 k_2} e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} \\ &= N \underbrace{\sum_{k_1} e^{i k_1 (x_1 + x_2)}}_{\delta(x_1 + x_2)} d_{cv} \cdot E(t) \end{aligned}$$

$$\langle \phi_0 | \text{Hed-Liat} | \psi \rangle \propto N \int d^3 R \psi_{\text{red}}(0) \mathcal{Z}(R) d_{cv} \cdot E(t)$$

Bemerkung: Bei dem Wahn für Schwerkraft, Bewegung

$$\mathcal{Z}_k(R) = e^{i k \cdot R} \Rightarrow \int d^3 R e^{i k \cdot R} \propto \delta(k)$$

$\Rightarrow k = 0!$  Nur ruhende Exzitation werden angeregt.

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

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

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

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

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

Zitat  $\langle \phi_0 |$  und  $\langle \psi_{\nu} |$  um links herum:



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

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

Annahme: System bei  $t=0$  im Zustand  $\phi_0$  und d. Ordnungstheorie

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

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

Lösung in Fourier-Reihe

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

Polentwicklung:  $P^{(1)}(t) = \sum_\nu \langle \psi_\nu | \varepsilon | d_0 \rangle c_\nu^{(1)} c_0^{(1)} + \dots + c.c.$

Rechnung analog im Freifeldsystem:

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

für räumlich homogenes System.

Dies ergibt das vorher skizzierte Spektrum!