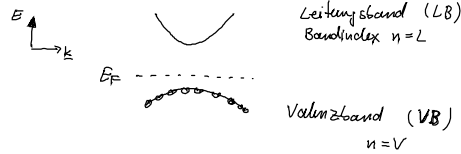


## 5.6. Defektelektronen (Löcher)

Annahme: 2-Bändermodell eines Halbleiters



- Zustand mit einem überschüssigen Elektron (VB voll, 1 Elektron im LB)

$$|\phi_k^c\rangle = a_{Lk}^\dagger \left( a_{Vk_1}^\dagger a_{Vk_2}^\dagger a_{Vk_3}^\dagger \dots a_{Vk_N}^\dagger \right) |\phi_0\rangle$$

Bandindex  $n=L$        $|\phi_0\rangle$  Zustand des vollen VB

$$= a_{Lk}^\dagger |\phi_0\rangle$$

- Zustand mit einer Fehlstelle  $|\phi_k^h\rangle$  mit Wellenzahl  $k$

$$|\phi_k^h\rangle = a_{Vk} |\phi_0\rangle$$

Neue Erzeugter, Vernichter :  $d_k^\dagger = a_{Vk}$   
 $d_k = a_{Vk}^\dagger$       Vertauschungsrelationen sind bekannt

wobei  $d_k |\phi_0\rangle = a_{Vk}^\dagger |\phi_0\rangle = 0$ , d.h.  $|\phi_0\rangle$  für Vernichtungsoperator entspricht dem Vakuumzustand

→ Umschreiben des Hamilton Op. (Vorteil kein Bandindex mehr nötig)

$$(1) a_e^\dagger a_m = d_e d_m^\dagger = \delta_{em} - d_m^\dagger d_e \quad \text{wegen } \{a_{k_1}, a_{k_2}^\dagger\} = \delta_{k_1 k_2}$$

$$(2) a_e^\dagger a_m^\dagger a_{m'} a_e = d_e d_m d_m^\dagger d_{e'}^\dagger$$

$$= \delta_{mm'} \delta_{ee'} - \delta_{mm'} d_{e'}^\dagger d_e - \delta_{m'e} \delta_{me'} + \delta_{m'e} d_m^\dagger d_e + \delta_{m'e} d_{e'}^\dagger d_m - d_m^\dagger d_m \delta_{ee'} + \delta_{m'e}^\dagger d_m^\dagger d_e$$

Einsetzen in  $\hat{H}_{\text{Full}} = \sum_{em} \langle e|\hat{V}|m\rangle a_e^\dagger a_m + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ee' \\ mm'}} \langle em|\hat{V}|e'm'\rangle a_e^\dagger a_m^\dagger a_{m'} a_{e'}$

$$\hat{H}_{\text{Full}} = E_{0,V} + \hat{H}_D + \hat{H}_{DD}$$

↑                      ↑                      ↙ WW Beiträge  
 Beiträge ohne Op      Beiträge mit  $d^\dagger d \cong 1T$   
 $\cong$  Offset Energie

$$E_{0,V} = \sum_e \epsilon_e + \frac{1}{2} \sum_{em} \langle em|\hat{V}|em\rangle - \frac{1}{2} \sum_{em} \langle em|\hat{V}|me\rangle$$

↑ alle VB-Zustände      Energie des vollen VB in Hartree-Fock-Näherung

$$\hat{H}_D = - \sum_{em} \langle e|\hat{V}|m\rangle d_m^\dagger d_e + \sum_{m'} \left( \langle em|\hat{V}|mm'\rangle - \langle em'|\hat{V}|mm\rangle \right) d_m^\dagger d_{e'}$$

Hartree                      Fock      Beiträge ① = ④, ② = ③

$$= -\sum_{em} d_m^\dagger d_e \langle e | \hat{H}_{eff} | m \rangle$$

eff. Hamilton Op. der die WW der Valenzelektronen durch mean-field Pot. beschreibt  
 $|m\rangle$  ist Eigenfunktion von  $\hat{H}_{eff}$  mit Eigenwerte  $\epsilon_m = \epsilon_{k,v}$

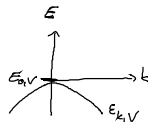
$$= -\sum_k \epsilon_{k,v} d_k^\dagger d_k$$

ergibt Quasi-Impuls im Kristall  
 (Energie durch WW)

$$\hat{H}_{DD} = \frac{1}{2} \sum_{em, e'm'} d_m^\dagger d_{e'}^\dagger d_e d_{m'} \langle e m | \hat{V} | e' m' \rangle$$

Coulomb WW der Löcher untereinander

• Energie der Löcher:



Defektelchtron sind Quasi-Teilchen mit positiver effektiver Masse (trotz Krümmung mit anderem Vorzeichen)

$$\hat{H}_D = \sum_k d_k^\dagger d_k \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \right)$$

↑  
effektive Masse

• Ladung der Löcher:

Op. der Ladungsdichte

$$\hat{g}(x) = e \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \quad (e < 0)$$

$$= e \sum_{kk'} \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) a_{k'}^\dagger a_k \quad (\text{Basis aus Bloch Fkt})$$

$$= e \sum_k |\psi_k(x)|^2 - e \sum_{kk'} \psi_{k'}^*(x) \psi_k(x) d_{k'}^\dagger d_k$$

Ladungsdichte des vollen VB

(wird gerade kompensiert durch pos. Gitterionen, sonst Kristall nicht neutral)

↳ Ladungsdichte der Defektelchtronen

=> positive Ladung der Defektelchtronen

Bsp.: Hall-Effekt

(Elektronen und Löcher verschiedene Richtungen)

### 5.7. Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Löchern

• Wechselwirkungs Hamilton op  $\hat{H}_{int}$  wird benötigt.

• Zerlegung der Feldoperatoren in Valenz- u. Leitungsbandanteile

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_k a_{k,v}^\dagger \psi_{k,v}^*(x) + \sum_k a_{k,z}^\dagger \psi_{k,z}^*(x)$$

$$\psi_{k,v}(x) = \langle x | k,v \rangle$$

Wellenfunktionen geg. durch  $\hat{H}_{eff} \psi = \epsilon \psi$  und bestmöglich selbstkonsistent bestimmt

$$\text{es gilt } \langle k_n | k'_{n'} \rangle = \delta_{kk'} \delta_{nn'}$$

$$n, n' \in \{z, v\}$$

$$\text{und } \{ a_{k,n}, a_{k',n'}^\dagger \} = \delta_{kk'} \delta_{nn'}$$

$$\hat{H}_{Full} = \sum_{k, k'} a_{k, u}^\dagger a_{k', u} \langle k, u | \hat{H} | k', u \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \\ n_1, n_2, n_3, n_4}} a_{k_1, n_1}^\dagger a_{k_2, n_2}^\dagger a_{k_3, n_3} a_{k_4, n_4} \langle k_1, n_1, k_2, n_2 | \hat{V} | k_3, n_3, k_4, n_4 \rangle$$

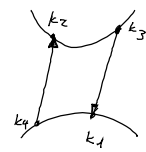
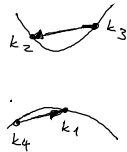
mit  $a_{k, u}^\dagger a_{k, u} = 1 - d_k^\dagger d_k$   
 $a_{k, L}^\dagger a_{k, L} = a_k^\dagger a_k$

► Bei Erhaltung der Teilchenzahl:  
 Zerlegung der Summen

$$\sum_{\substack{k_i \\ u_i}} = \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n \in L}}}_{\text{WW der Leitungszustände untereinander}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n \in V}}}_{\text{WW der Löcher untereinander}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n_1, n_4 \in V \\ n_2, n_3 \in L}}}_{\text{H}_{LV}^{(1)}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ u_1, u_4 \in L \\ u_2, u_3 \in V}}}_{\text{H}_{LV}^{(2)}} + \dots$$

identische Beiträge

WW eines El. mit einem Loch



Austauschprozess

$k_1, k_2$  werden erzeugt  
 $k_3, k_4$  " vernichtet

-  $H_{LL}$  und  $H_{VV}$  im Prinzip bekannt  
 (umschreiben auf Löcher)

$$- H_{LV}^{(1)} = \sum_{k_i} \left( \underbrace{a_{k_1}^\dagger a_{k_4} \delta_{k_2, k_3}}_{\text{WW eines Elektrons mit vollem VB}} - \underbrace{a_{k_1}^\dagger d_{k_4} d_{k_3}^\dagger d_{k_2}}_{\text{Streuung eines Elektrons am Loch}} \right) \langle k_1, L, k_2, V | V | k_3, V, k_4, L \rangle$$

$H_{LV}^{(2)}$ : Austauschterm (Vertauschung  $k_1 \leftrightarrow k_2, k_3 \leftrightarrow k_4$ )

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_D + \hat{H}_{e-D} + \hat{H}_{D-D} + \hat{H}_{e-e} + \hat{H}_{voll}$$

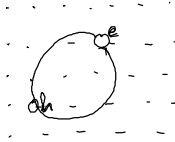
$\uparrow$  Energien von El. & Löchern ohne WW  
 $\uparrow$   
 $\Downarrow$  WW zwischen EL & Löchern  
 $\underbrace{\hat{H}_{D-D} + \hat{H}_{e-e}}_{\text{WW im LB und im VB (intra-Band WW)}} \quad \leftarrow \text{Energie des vollen VB}$

$$\hat{H}_{e-D} = \sum_{k_i} \left( -a_{k_1}^\dagger a_{k_4} d_{k_3}^\dagger d_{k_2} \langle k_1, L, k_2, V | V | k_3, V, k_4, L \rangle + a_{k_2}^\dagger a_{k_4} d_{k_3}^\dagger d_{k_1} \langle k_1, k_2, L | V | k_4, L, k_3, V \rangle \right)$$

Beispiel: 1 Elektron und 1 Loch

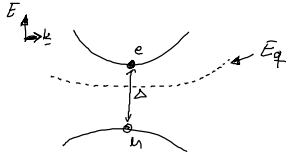
Ansatz für die Eigenfunktionen von  $\hat{H}_{e-0}$ : Zweiteilchenwellenfunktion

$$|\phi\rangle = \sum_{k_1, k_2} c_{k_1 k_2} a_{k_1}^\dagger d_{k_2}^\dagger |\phi_0\rangle$$



gebundenes EL.-Loch Paar  $\hat{=}$  Exziton

Eigenenergien:  $E_q = \Delta - E_B + \frac{\hbar^2 q^2}{2(m_e + m_h)}$



Dispersionsrelation der Exzitonen  
Vorsicht: keine Einteilchen-Zustände!

- Bindungsenergie verursacht durch WW, also  $\hat{H}_{e-0}$
- wasserstoffähnliches Eigenwert-spektrum

Bem: • es wird je nach Bindungsradius nach Wannier Exzitonum (großer Abstand) oder Frenkel Exzitonum unterschied