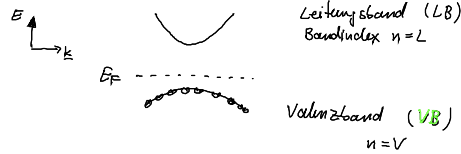


5.6. Defektelektronen (Löcher)

Annahme: 2-Bändermodell eines Halbleiters



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

$$|\phi_k^c\rangle = a_{Lk}^\dagger \left(a_{Vk_1}^\dagger a_{Vk_2}^\dagger a_{Vk_3}^\dagger \dots a_{Vk_V}^\dagger \right) |0\rangle$$

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)

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

$$(2) a_e^\dagger a_m^\dagger a_n a_e = d_e d_m d_n^\dagger d_e^\dagger$$

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

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

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

↑ Beiträge ohne Op $\hat{=}$ Offset Energie
↑ Beiträge mit $d^\dagger d \hat{=}$ IT
↑ low Beiträge

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

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

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

Hartree Fock Beiträge ① = ④, ③ = ②

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

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

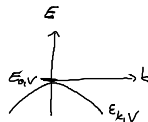
$$= -\sum_k \epsilon_{k,V} d_k^\dagger d_k$$

ergibt Quasi-Impuls im Kristall
 (Energie durch WW)

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

Coulomb WW der Löcher untereinander

• Energie der Löcher:



Defektelektron 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 Defektelektronen

=> positive Ladung der Defektelektronen

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

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

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

Wellenfunktionen geg. durch $\hat{H}_{\text{eff}} \psi = e \psi$
 und beim möglich selbstkonsistent bestimmt

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

$$n, n' \in \{L, V\}$$

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

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

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

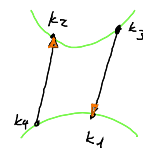
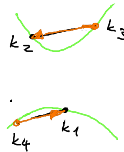
► Bei Erhaltung der Teilchenzahl:
 Zerlegung der Summen

$$\sum_{\substack{k_i \\ u_i}} = \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n \in L}}}_{H_{LL}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n \in V}}}_{H_{VV}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n_1, n_3 \in V \\ n_2, n_4 \in L}}}_{H_{LV}^{(1)}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ n_1, n_3 \in L \\ n_2, n_4 \in V}}}_{H_{LV}^{(2)}} + \dots$$

identische Beiträge

WOW der Leitungsbandel untereinander H_{LL} WOW der Lucke untereinander H_{VV}

WOW eines EL mit einem Loch $H_{LV}^{(1)}$ $H_{LV}^{(2)}$



Austauschprozess

k_1, k_2 werden erzeugt
 k_3, k_4 " vernichtet

- H_{LL} und H_{VV} im Prinzip bekannt
 (umschreiben auf Lucke)

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

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

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

↑ ↑
 Energien von EL & Lucke ohne WOW

↓
 WOW zwischen EL & Lucke

WOW im LB und im VB (intra-Band WOW)

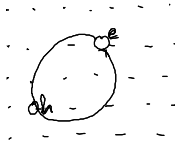
↑ Energie des vollen VB

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

Beispiel: 1 Elektron und 1 Loch

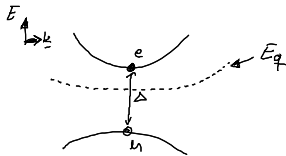
Ansatz für die Eigenfunktionen von \hat{H}_{e-0} : Zweiteilchenwellenfunktion

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



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 nicht Wannier Exzitonium (großer Abstand) oder Frenkel Exzitonium unterschied