

# VII Festkörperoptik

## 1) Dipolnäherung f. halbklassische Optik

gehe von System von Festkörperelektronen  $\psi_k$  mit

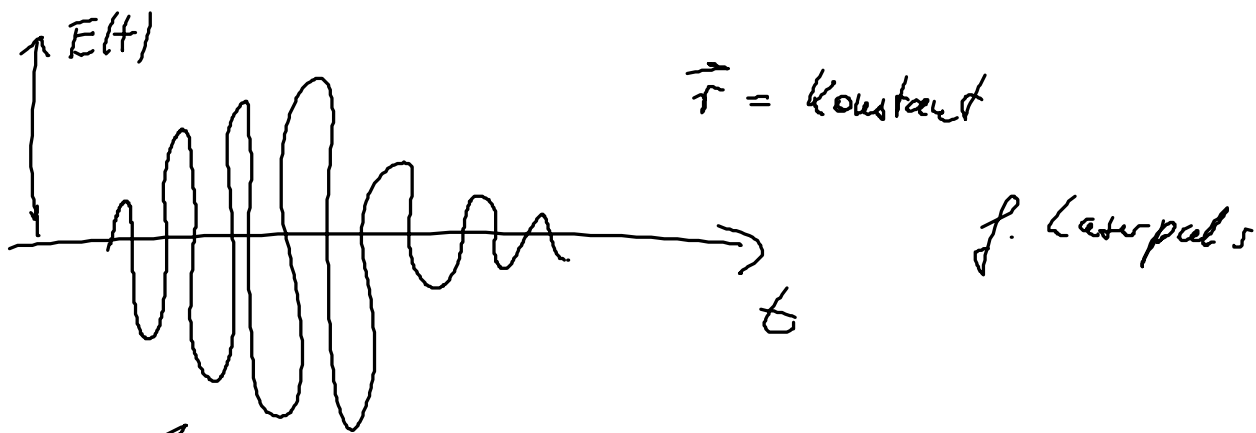
$$H = H_0 + H_{\text{core}} + H_{\text{Feld}} \quad \text{aus}$$

Blockelektronen      EL-EL-WW      EL-optisches Feld-WW

$$H_{\text{Feld}} = -q \vec{r} \cdot \vec{E}(r, t) \rightarrow H_{\text{Feld}} = -q \int dV \psi^\dagger(r, t) \vec{r} \cdot \vec{E}(r, t) \psi(r, t)$$

Dipolkopplung an ein elektrisches Feld

im Vergleich zur Transporttheorie soll das  $\vec{E}(r, t)$  jetzt optische Frequenzen enthalten, i. a.:



optische Frequenzen: Puls enthält Trägerfrequenz etc

$\vec{E}(r, t)$ : extern aufgeprägt und  
 entscheidet sich über Wellengleichung  
 unter Beeinflussung des abgestrahlten Feldes

halbklassisch:  $\vec{E} \hat{=} \text{klassisch Feld}$

$q \psi^+ \vec{r} \psi \hat{=} \text{Quantenfeld} \hat{=} \text{Dipoldichte die}$   
 quantenmechanisch beschrieben wird

Quellen der Maxwellgleichungen werden mit:

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{E}} = \vec{P} = q \psi^+(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t)$$

bedeutet,  $\vec{P}$  wird als Dipol dichte interpretiert:

$$\frac{\text{Ladung mal Ort}}{\text{Volumen}}$$

Siehe aus  $\mathcal{H}$  an, Entwicklung nach Blochmode

$$\mathcal{H}_{\text{-Feld}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \int d^3r e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} -q \vec{r} u_{\vec{k}_1}^*(r) u_{\vec{k}_2}(r) a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2}$$

analog Transport (1. VL)

$$k_1 = k_2 \approx 0 \text{ an Bandkante}$$

$$\int d^3 r \rightarrow \sum_{R_n} \int d^3 r_n \hat{=} \text{Diagram}$$

Matrix element:

$$= \frac{1}{V} \sum_{R_n} \int d^3 r_n u_{\lambda_1}^* u_{\lambda_2}(\vec{R}_n + \vec{r}_n) e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot (\vec{R}_n + \vec{r}_n)} - q \underbrace{(\vec{R}_n + \vec{r}_n)}_! \vec{E}(\vec{R}_n + \vec{r}_n)$$

weglassen via Variation über der EL-Zelle X

Gitterperiodizität der  $u_{\lambda}(\vec{R}_n + \vec{r}_n) \rightarrow u_{\lambda}(\vec{r}_n)$

$$H_{\text{-Feld}} = \frac{1}{V} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \sum_{R_n} \left( \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \Omega_0 (-q \vec{R}_n) - q \int d^3 r_n u_{\lambda_1}^*(\vec{r}_n) \vec{r}_n u_{\lambda_2}(\vec{r}_n) \right) \cdot \vec{E}(\vec{R}_n, t)$$

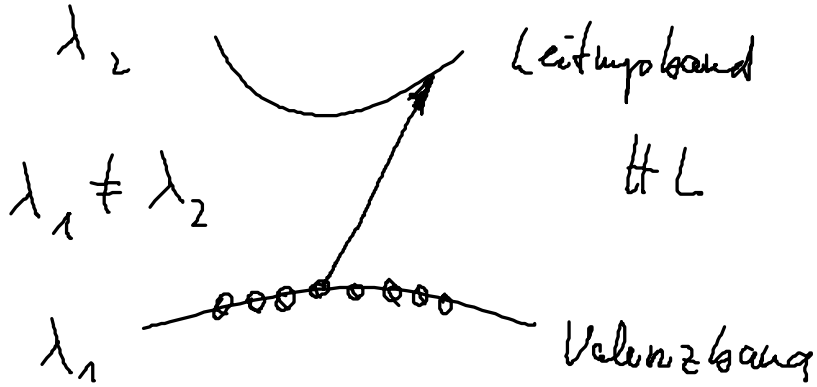
Elementarzelle -  
Volumen

+  
 $a_{\lambda_1 k_1} a_{\lambda_2 k_2}$

(Orthogonalität von  $u_{\lambda_1}^* u_{\lambda_2}$ )

$$\sum_{R_n} \Omega_0 \rightarrow \int d^3 R$$





b) Quelle der Maxwellgleichung:

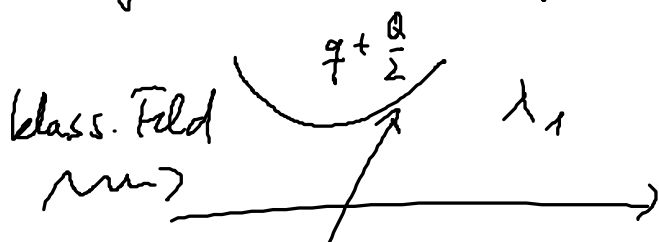
$$\vec{P}(\vec{R}, t) = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{E}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{Q}} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \vec{d}_{\lambda_1, \lambda_2} \sum_{\vec{q}} G_{\vec{q} + \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2}}^{\lambda_1, \lambda_2}$$

$$k_1 - k_2 = Q$$

$$\frac{k_1 + k_2}{2} = q$$

$$\vec{v} = \left\langle a_{\lambda_1, \vec{q} + \frac{\vec{Q}}{2}}^{\dagger} \quad a_{\lambda_2, \vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2}} \right\rangle$$

Die Dipoldichte  $\vec{P}(\vec{R}, t)$  ist gegeben als Summe über alle mögl. optisch. Übergänge  $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$ , gewichtet mit Dipolmomenten.



$$\overbrace{q - \frac{a}{2}}^{\lambda_2}$$

## 2. Optische Übergänge im Zweibandmodell (Halbleiter)

um  $\vec{P}$  zu bestimmen brauchen wir  $\overleftrightarrow{\sigma}_{k_1 k_2}^{\lambda_1 \lambda_2} = \langle a_{\lambda_1 k_1}^\dagger a_{\lambda_2 k_2} \rangle$

$$-i \hbar \partial_t \begin{pmatrix} a_{\lambda_1 k_1}^\dagger & a_{\lambda_2 k_2} \end{pmatrix} = \left[ \begin{matrix} H_{\text{feld}} \\ - \end{matrix}, \begin{matrix} a_{\lambda_1 k_1}^\dagger & a_{\lambda_2 k_2} \end{matrix} \right]$$

Spezialisierung auf 2 Bänder  $\lambda_1, \lambda_2 \rightarrow c, v$

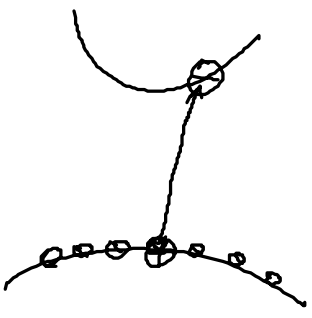
Erwartungswert  $\rightarrow$

$$-i \hbar \partial_t \overleftrightarrow{\sigma}_{k_1 k_2}^{vc} = - \sum_Q \left( \begin{matrix} \vec{d}_{cv} \cdot \vec{E}(Q, t) \overleftrightarrow{\sigma}_{k_1+Q, k_2}^{cc} \\ - \vec{d}_{cv} \cdot \vec{E}(Q, t) \overleftrightarrow{\sigma}_{k_1, k_2-Q}^{vv} \end{matrix} \right)$$

Besetzungswahrscheinlichkeit  
in den Bändern

Übergangswahrscheinlichkeit  
f. Dipollicht

werden angetrieben  
durch E-Feld  
des Dipols Q  
überlagert



Näherg.

a) Q sei klein, weil  $\approx \Rightarrow Q \sim \frac{1}{\lambda} \sim \frac{\omega_c}{c} \ll q \approx \frac{1}{a_0}$

$$\lambda \gg a_0$$

↑      ↑

Wellen - Brillouin zone  
 Lage des  
 Lichts

$$E(Q, t) \sim E(t) \delta_{Q,0}$$

$$b) \quad \sigma^{cc} \approx 0$$

$$\sigma^{vv} \approx 1 \cdot \delta_{k_1, k_2}$$

wird angenommen wird, daß Licht nur eine  
 "Schwach" Umkehrbeg. der Zustände hervorruft  
 (nicht mehr der Fall f. nichtlineare Optik)

$$\dot{\sigma}_q^{vc} = i \frac{\vec{d}_{cv} \cdot \vec{E}(t)}{\hbar} \equiv i \Omega(t)$$

$\nearrow \frac{\hbar}{2} = \frac{k_1 + k_2}{2} = q$        $\nwarrow$  Rabi frequency

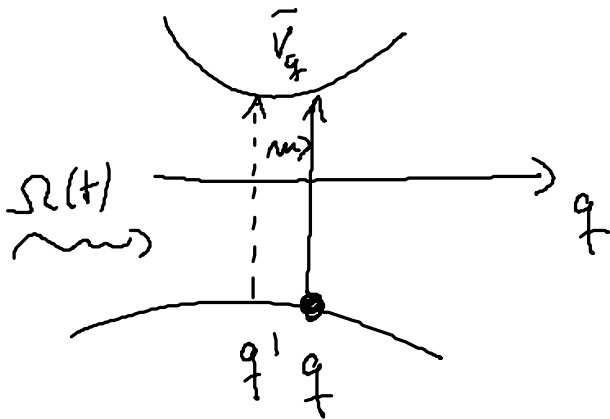
es muß noch der Anteil der Bloch-Länge ergänzt  
 werden (für  $Q=0$ )

$$\dot{\sigma}_q^{vc} = i \left( -\frac{E_q}{\hbar} - \frac{\hbar q^2}{2m_{red}} \right) \sigma_q^{vc} + i \Omega(t)$$

frei Bewegg.  
Lichtfeld

$$+i \sum_{q'} \tilde{V}_{q'} \sigma_{q+q'}^{vc}$$

Coulomb-WW  
(wasserstoffähnlich)



$\Omega(t)$  wirkt die Übergangsamplitude  
 $\sigma_q^{vc}$  an ( $\perp$  Übergang)  
die Übergänge sind über das  
Coulombpotential gekoppelt

Lichtfeld wirkt als keine freie Übergänge

Sonden renormierte Übergänge an

→ Exzitonen

wie außen sind diese Exzitonen

in einem optisch Spektrum

### 3.) Halbleiterexzitonen

$$\sigma_q^{vc} \rightarrow p_q^{vc} \rightarrow p_q \quad (\text{"Polarisation"})$$

Um Analogie zum H-Problem herzustellen,

Fourier räumlich:



$$i\hbar \dot{P}(\vec{r}, t) = \underbrace{\left( E_g - \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{r}}}{2m_{\text{red}}} - V(\vec{r}) \right)}_{H_{\text{HA}}} P(\vec{r}, t) - \vec{E}(t) \cdot \vec{d}_{cv} \delta(\vec{r}) V$$

$$\left( \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} P_{\vec{q}} \rightarrow P(\vec{r}), \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3e^{i\vec{q}\vec{r}} = V \delta(\vec{r}) \right)$$

das erste Teil der gl. erwirbt an Schrödingergl. des H-Atoms  
 man entwickelt  $P(\vec{r}, t)$  nach Eigenfunktionen des H-Atoms

$$H_{\text{HA}} \varphi_{\nu} = \varepsilon_{\nu} \varphi_{\nu} \text{ ist bekannt}$$

$$P(\vec{r}, t) = \sum_{\nu} b_{\nu}(t) \varphi_{\nu}(\vec{r})$$

$\nu$  ~ vollständiges Satz von

Quantenzahl des H-Atoms

Koeffizient  $b_{\nu}(t)$  sind zu ermitteln!

dazu Ansatz einsetzen, mit  $\varphi_{\lambda}^*(\vec{r})$  multiplizieren und

über  $\int d^3r$  integrieren  $\rightarrow$

$$b_{\lambda}(t) = -i\omega_{\lambda} b_{\lambda}(t) + i\Omega(t) V \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}=0) - \gamma b_{\lambda}$$

Dämpf. der  
 Oszillation zB  $E_0 - E_{\lambda}$   
 $\downarrow$   
 $\omega_{\lambda}$

$$b(\omega) = \frac{i \Omega \psi_{\lambda}^*(r=0) V}{-i(\omega - \omega_{\lambda}) + \gamma}$$

zurück zur Dipoldichte: ( $Q=0$ , 2-Bands)

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \vec{d}_{vc} P_{\vec{q}}(t) + \text{h.a.} \quad (P_{\vec{q}} = \sigma_{\vec{q}}^{vc})$$

(dcv)

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \vec{d}_{vc} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} P(\vec{r}, t)}_{\text{Fouriertransform}}$$

$$\vec{P}(\omega) = \frac{\vec{d}_{vc}}{V} \underbrace{\left(\frac{V}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{q}}_{\delta(\vec{r})} \underbrace{\frac{1}{V} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} P(\vec{r}, \omega)}_{\delta(\vec{r})}$$

$$= \frac{\vec{d}_{vc}}{V} P(0, \omega)$$

$$\vec{P}(\omega) = \frac{|\vec{d}_{vc}|^2}{\hbar} \sum_{\lambda} |\psi_{\lambda}(0)|^2 \frac{i \overline{E}(\omega)}{-i(\omega - \omega_{\lambda}) + \gamma}$$

Dipoldichte des 2-Band-Halbleiters,

kann dargestellt werden als Suszeptibilität  $\chi(\omega)$   
und  $E(\omega)$

$$\vec{P}(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) \vec{E}(\omega)$$

$\chi(\omega)$  erlaubt dann die Beschreibung von Brechzahl,  
Absorption, Reflexion ... in ED,

$$\underbrace{\text{Im } \chi(\omega) \stackrel{\wedge}{=} \alpha(\omega)}$$

Absorption ist gegeben durch den Imaginärteil der  
Suszeptibilität  $\chi(\omega)$ .

$$\text{Im } \chi(\omega) = \frac{(\text{drc})^2}{\epsilon_0 \eta} \sum_{\lambda} \frac{y |\varphi_{\lambda}(r=0)|^2}{(\omega - \omega_{\lambda})^2 + y^2}$$

$\approx$  Absorption ein Zweiband-Halbleiter

Bemerkung:

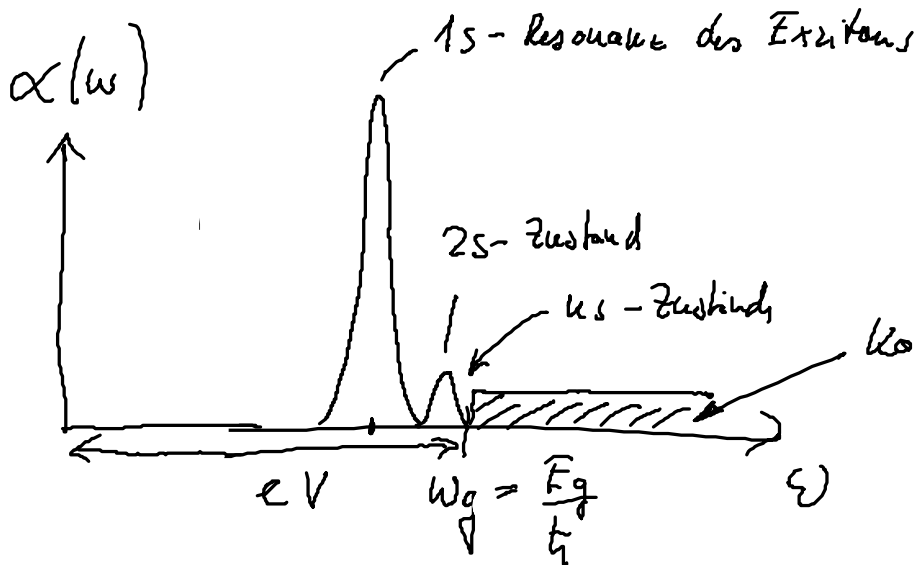
a) die Formel heißt Elliot-Formel und  
 beschreibt die Absorption als eine Summe  
 über Lorentzfunktionen  $\frac{\gamma}{(\omega - \omega_\lambda)^2 + \gamma^2}$

$\omega_\lambda = \frac{\epsilon_\lambda}{\hbar}$ , also die Resonanzfrequenz der  $\lambda$  Atoms

$$\hat{H}_{\text{HA}} \psi_\lambda = \epsilon_\lambda \psi_\lambda$$

(enthält aber auch  $E_{\text{gap}}$ )

b) Absorption findet statt wenn EL/Lo an selbe Ort  $|\psi_\lambda(r=0)| \neq 0$   
 Absorption ist prop. zu Dipolmatrixelement:



ms s-Zustand  
 ermöglicht  $|\psi_\lambda(r=0)| \neq 0$

Kontinuum  $\hat{=}$   
 Ionisierung des EL-Lo  
 Paars, befindet sich  
 nicht mehr im  
 gebundenen Zustand

Linien spektrum

+ Kontinuum