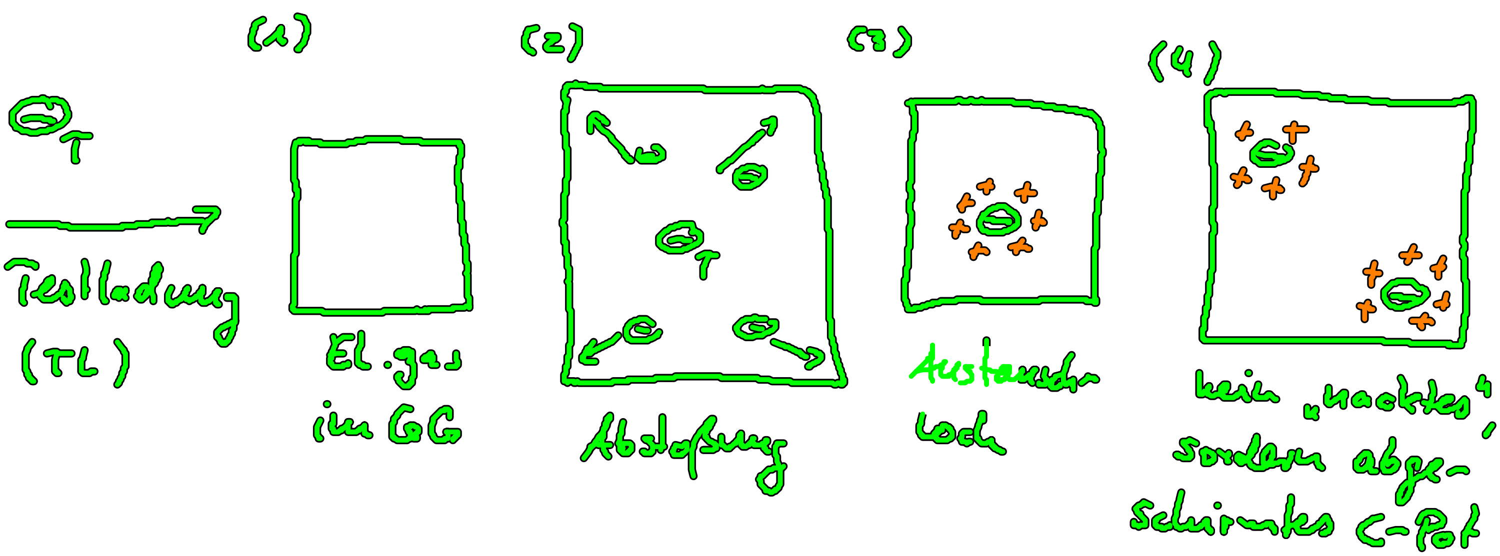
5. Plasmonabschirmung

- Frage: Gibt es eff. Einteilchenbild (1T) für ein El. im El.gas bzw. eff. 1T-Hamiltonian?
- Idee: Präsenz vieler El schirmt C-Potential ab.



- Berechnung der Plasmonabschirmung:

$\hat{H}$ um TL ergänzen $\longrightarrow$ eff. Pot. für TL berechnen

$$H_T = e\,\phi^T(\underline{r}_T) \xrightarrow{\text{2. Q'sierung}} \hat{H}_T = e \sum_{\underline{k}_1 \underline{k}_2} a^\dagger_{\underline{k}_1} a_{\underline{k}_2} \phi^T_{\underline{k}_1 \underline{k}_2}$$

Poissongl.: $\Delta \phi^T = -\frac{\rho_T}{\varepsilon_0} = -\frac{e}{\varepsilon_0}\,\delta(\underline{r} - \cancelto{0}{\underline{r}_T}) \quad |\ \mathrm{FT}$

$$-q^2\phi^T = -\frac{1}{\varepsilon_0}\varrho_D^T(q) \qquad \varrho_D^T(q) = \frac{e}{V}\int d^3r\,\delta(\underline{r}-\underline{r}_T)\,e^{iq\underline{r}} = \frac{e}{V}$$

$$\phi^T = \frac{\varrho_D^T(q)}{\varepsilon_0 q^2}$$

$$\phi^T_{\underline{k}_1\underline{k}_2} = \frac{1}{V}\int dV\, e^{-i\underbrace{(\underline{k}_1-\underline{k}_2)}_{q}\cdot\underline{r}}\,\phi^T(r) = \phi^T(q) = \frac{e}{\varepsilon_0 V q^2} = V_q$$

$$\Longrightarrow \hat{H}_T = \sum_{\underline{k}_1\underline{k}_2} a^+_{\underline{k}_1} a_{\underline{k}_2}\frac{e^2}{\varepsilon_0 V|\underline{k}_1-\underline{k}_2|^2} = \sum_{kq} V_q\, a^+_{k-q} a_k \qquad \begin{matrix} k_1-k_2 = q \\ k_2 = k \end{matrix}$$

- Berechnung der Dichte:

$$i\hbar\partial_t\langle a^+_{k+q}a_k\rangle = \langle[a^+_{k+q}a_k, \underbrace{H_e + H_{e-e}} + \underbrace{H_T}]\rangle$$

$\varrho_k = \langle a^+_k a_k\rangle$

$$= \underbrace{(\tilde{\varepsilon}_k - \tilde{\varepsilon}_{k+q})\langle a^+_{k+q}a_k\rangle + V_q(\varrho_{k+q}-\varrho_k)\sum_{k'}\langle a^+_{k'+q}a_{k'}\rangle}$$

$$\underbrace{+\,V_q(\varrho_{k+q}-\varrho_k)}$$ beeinflusst Anordnung der El.

$\longrightarrow$ Fourier $e^{-i\omega t}$ und $\sum_k$

$$-\hbar\omega\,\varrho_D(q) = (\tilde{\varepsilon}_k - \tilde{\varepsilon}_{k+q})\varrho_D(q) + \sum_k(\varrho_{k+q}-\varrho_k)\left[V_q\varrho_D(q) + V_q\right]$$

$$\Longrightarrow \varrho_D(q) = \underbrace{\sum_k\frac{(\varrho_{k+q}-\varrho_k)}{\tilde{\varepsilon}_k - \tilde{\varepsilon}_{k+q} - \hbar\omega}}_{P_q \text{ Polarisationsfkt.}} V_q\left[1+\varrho_D(q)\right] \qquad \varrho_D(q) = \sum_{k'}\langle a^+_{k'+q}a_{k'}\rangle$$

$$\rho_D(q) = V_q P_q + V_q P_q \rho_D(q)$$

$$\rightarrow \boxed{\rho_D(q) = \frac{V_q P_q}{1 - V_q P_q}}$$

Bestimmungsgl. für Fourier-komponenten der LD des El.gases

- Aufstellen des eff. 1T-H-Operators:

$$H = H_e + H_{e-e} \longrightarrow H = H_e + H_{eff}$$

welches ϕ_{eff} gehört dazu?

mit $H_{eff} = \sum_{kq} \phi_{eff}(q)\, a^+_{k+q} a_k$

$$\Delta \phi_{eff}(\underline{r}) = -\frac{e}{\varepsilon_0}\delta(\underline{r}-\underline{r}_T) - \frac{e}{\varepsilon_0}\rho_D(r)$$

TL $\qquad$ El.gas

FT: $\phi_{eff}(q) = \frac{e}{V\varepsilon_0 q^2} + \frac{e}{V\varepsilon_0 q^2}\rho_D(q) = (1 + \underline{\underline{\rho_D(q)}})V_q$

einsetzen

$$H_{eff} = \sum_{kq}\left(1 + \frac{V_q P_q}{1 - V_q P_q}\right)V_q\, a^+_{k+q} a_k$$

jetzt Hauptnenner

$$= \sum_{kq} \frac{V_q}{\varepsilon_q}\, a^+_{k+q} a_k \quad \text{mit } \varepsilon_q = (1 - V_q P_q)$$

• Bemerkungen:

(a) ε_q ist die Dielektrische Fkt. und V_q (nackte) wird ersetzt durch ein „abgeschirmtes" C-Pot $\frac{V_q}{\varepsilon_q} = W_q$

(b) Lindhard-Formel:

Fermi-fkt. $\longrightarrow$

$$\varepsilon_q = 1 - V_q \sum_{k\sigma} \frac{\rho_{k+q\sigma} - \rho_{k\sigma}}{\hbar\omega + (\tilde{\varepsilon}_{k+q\sigma} - \varepsilon_{k\sigma})}$$

(c) Abschirmung ist frequenzabhängig $P_q = P_q(\omega)$
$\longrightarrow$ –"– hat zeitl. Dynamik

(d) klass. Grenzfall $q \to 0$ (stat. Grenzfall $\omega \to 0$)

$$\varepsilon_q = 1 - V_q \sum_k \frac{f_{k+q} - f_k}{\tilde{\varepsilon}_{k+q} - \hat{\varepsilon}_k}$$ Taylor 1. Ordnung in q

$$\approx 1 - V_q \sum_k \sum_\alpha \frac{q^\alpha \partial_k^\alpha f_k}{\frac{\hbar^2}{m} k \cdot q} \qquad f_k = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$$

$$= 1 - V_q \sum_k \sum_\alpha \frac{\cancel{q^\alpha} \partial_k^\alpha \varepsilon_k \partial_{\varepsilon_k} f_k}{\hbar^2/m \, k^\alpha \cancel{q^\alpha}} \qquad \partial_k^\alpha \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k_\alpha}{m}$$

$$= 1 - V_q \sum_k \partial_{\varepsilon_k} f_k$$

$$= 1 + V_q \partial_\mu \underbrace{\sum_k f_k}_{} = 1 + \frac{e^2}{V\varepsilon_0 q^2} \partial_\mu N$$

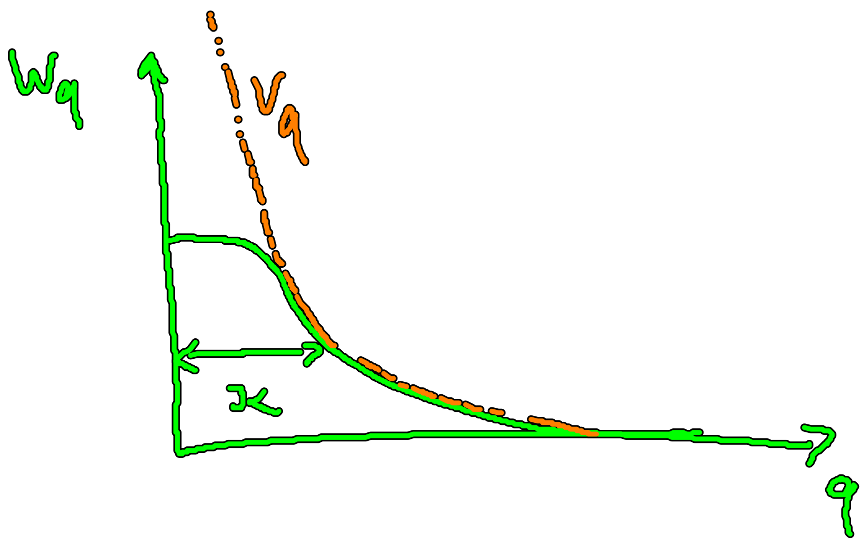
N Teilchenzahl $\qquad n = \frac{N}{V}$

$$\varepsilon_q = 1 + \left(\frac{\varkappa}{q}\right)^2$$ mit Abschirmlänge $\varkappa = \sqrt{\frac{e^2}{\varepsilon_0} \partial_\mu n}$

Damit folgt für das eff. 1T-Pot:

$$W_q = \frac{V_q}{\varepsilon_q} = \frac{V_q}{1+\left(\frac{\varkappa}{q}\right)^2} \quad \Big| \; \frac{q^2}{q^2}$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_0 V} \frac{1}{q^2 + \varkappa^2} \implies$$ TL hat anderes Potential als im Vakuum $\sim \frac{1}{q^2}$



6. Exzitonen

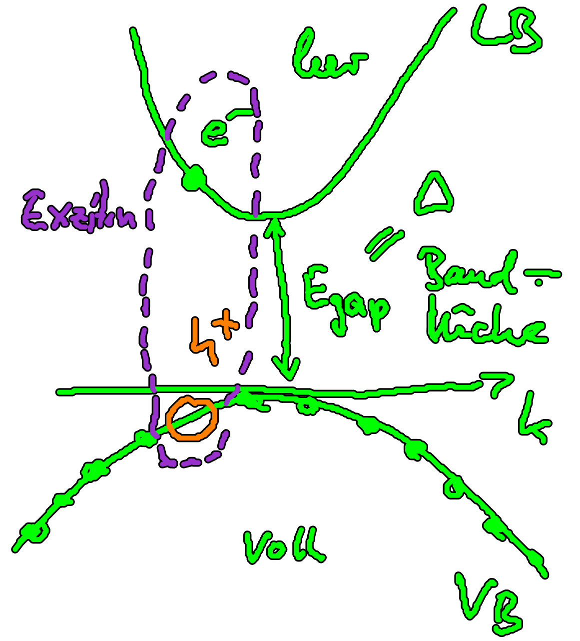
C-WW sorgt im HL für die Ausbildung von gebundenen Zuständen zw Leitungsband El und Valenzband Löchern

$\longrightarrow$ Quasiteilchen: Exziton (eine Masse u. Energie)

• Annahmen: – 2 Bandmodell $\lambda = c, v$

– WW zw El in einem Band vernachlässigen

– C-WW zw. El und Löchern



• Hamiltonian: $H = H_e + H_{e-e}$

$$H = \sum_{\underline{k}} \varepsilon_{v\underline{k}} a^+_{v\underline{k}} a_{v\underline{k}} + \varepsilon_{c\underline{k}} a^+_{c\underline{k}} a_{c\underline{k}}$$

Anteil in λ-Summe so daß nur WW zw. EL in c und v

$$+ \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V^{vk_1 ck_2}_{vk_3 ck_4} a^+_{vk_1} a^+_{ck_2} a_{vk_3} a_{ck_4}$$

• eff. Massennäherung: $\varepsilon_{v\underline{k}} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$ $\quad \varepsilon_{c\underline{k}} = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$

eff. Massen

• El.-Loch-Bild: Loch im VB erzeugen, wenn dort ein El vernichtet wurde

$$\Rightarrow \quad a_{v\underline{k}} = h^+_{\underline{k}} \qquad a_{c\underline{k}} = e_{\underline{k}}$$
$$a^+_{v\underline{k}} = h_{\underline{k}} \qquad a^+_{c\underline{k}} = e^+_{\underline{k}}$$

erfüllen Fermioni. Vertauschungsrel.

H mit El. und Löchern:

$$H = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} h_k^+ h_k + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + \Delta\right) e_k^+ e_k$$

pos. eff. Masse

$$+ \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V_{34}^{12}\, h_{k_1} \underbrace{e_{k_2}^+ h_{k_3}^+}_{-}\, e_{k_4}$$

$$\delta_{k_1 k_3} - h_{k_3}^+ h_{k_1}$$

$$= \ldots \underbrace{- \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V_{34}^{12}\, e_{k_2}^+ e_{k_4} \delta_{k_1 k_3}}_{\text{Renormalisierung der 1T-Energie}} + \overbrace{\sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V_{34}^{12}\, h_{k_3}^+ h_{k_1} e_{k_2}^+ e_{k_4}}^{\text{C-WW im El-Loch Bild}}$$

- Grundzustand: VB voll mit El (keine Löcher)
  LB leer

$$|\phi_0\rangle = \prod_k a_{vk}^+ |0\rangle = \prod_k h_k |0\rangle$$

Vakuum-Zustand

- Grundzustandsenergie: $E_0 = \sum_k \varepsilon_{vk}$

Anregungen nur durch Übergänge von El vom VB ins LB

- Angeregte Zustand: El-Loch-Paare

$$|\phi\rangle = \sum_{kk'} \alpha_{kk'} e^+_k h^+_{k'} |\phi_0\rangle$$

Linearkombi über alle Mgl. El-Loch-Paare zu erzeugen

$\longrightarrow$ Koeffizienten $\alpha_{kk'}$ bestimmen

$$H|\phi\rangle = \sum_{kk'} \alpha_{kk'} (\varepsilon_{ck} - \varepsilon_{vk'}) e^+_k h^+_{k'} |\phi_0\rangle + E_0 |\phi_0\rangle$$

$$- \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} V^{vk_1\, ck_2}_{vk_3\, ck_4} \alpha_{k_4 k_1} e^+_{k_2} h^+_{k_3} |\phi_0\rangle$$

Nutzen der Vertauschungsrelation und $e|\phi_0\rangle = 0$

$$H_{e,v}|\phi\rangle = -\varepsilon_{vk'}|\phi\rangle + \underbrace{\sum_{k_1} \varepsilon_{vk_1}}_{E_0} |\phi\rangle$$

Analog für $H_{e,c}$

$$H_{e,c}|\phi\rangle = \varepsilon_{ck}|\phi\rangle$$

- Eigenwertgl.: $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

$$\sum_{kk'} \Big\{ \underbrace{\alpha_{kk'} (E_0 - E + \varepsilon_{ck} - \varepsilon_{vk'}) - \sum_{k_1 k_4} \alpha_{k_4 k_1} V^{vk_1\, ck}_{vk'\, ck_4}}_{\longrightarrow \overset{!}{=} 0} \Big\} \underbrace{e^+_k h^+_{k'} |\phi_0\rangle}_{\text{ONS bilden}} \overset{!}{=} 0$$

- Grenzfall $V = 0$:

$$\delta E = E - E_0 = \varepsilon_{ck} - \varepsilon_{vk'} = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_v}$$

Der niedrigste angeregte Zustand liegt um Bandlücke Δ über der Grundzustandsenergie E_0 $(k = k' = 0)$

- $V \neq 0$: Anregungsenergie gegenüber WW-freien Ladungsträgern abgesenkt um $\sum_{k_2 k_4} \alpha_{k_4 k_1} V^{v k_1\, ck}_{ck'\, v k_4}$

$\longrightarrow$ C-Elemente einsetzen $V^{12}_{34} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V} \frac{1}{\underbrace{|k_1 - k_3|}_{q}} \delta_{k_1+k_2,\, k_3+k_4}$ $\boxed{\begin{matrix} k_2 = k \\ k_3 = k' \end{matrix}}$

$$\alpha_{kk'}(\delta E - \Delta) = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_v}\right)\alpha_{kk'} - \sum_{q} \frac{e^2}{\varepsilon_0 V q^2} \alpha_{k+q\; k'+q}$$

Im Ortsraum ist die EW-Gl für $\alpha_{kk'}$ äquivalent zur 2T-Schrödingergl.:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_c}\nabla^2_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_v}\nabla^2_{r_2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}\right)\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = E\,\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$$

- Ansatz: $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{k_1 k_2} \alpha_{k_1 k_2}\, e^{i(\underline{k}_1 \underline{r}_1 - \underline{k}_2 \underline{r}_2)}$

2T-Wellenfkt. $\hat{=}$ Linearkombi ebenen Wellen

$$\sum_{\vec{k_1 k_2}} \Big[\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_v} - E - \underbrace{\sum_{\vec{q}} \frac{e^2}{\varepsilon_0 V q^2} e^{iq(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)}}_{\text{FT v. } \frac{1}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}} \Big] \alpha_{k_1 k_2} e^{i(k_1 r_1 - k_2 r_2)} = 0$$

$$\sum_{\vec{k_1 k_2}} \Big[\Big(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_v} - E \Big) \alpha_{k_1 k_2} - \sum_{\vec{q}} \frac{e^2}{\varepsilon_0 V q^2} \alpha_{k_1 - q\, k_2 - q} \Big] e^{i(k_1 r_1 - k_2 r_2)} = 0$$

$$\left.\begin{array}{l} k_1 \to k_1 - q \\ k_2 \to k_2 - q \end{array}\right\} \to e^{iq(r_1 - r_2)} \text{ verschwindet}$$

El und Loch verhalten sich wie 2T mit Masse m_v u m_c mit entgegengesetzten Elementarladungen.

$\Rightarrow$ eff. H-Problem: Loch im VB $\hat{=}$ Proton

(1) Einführung neuer Koordinaten

SP koord.: $\underline{R} = \dfrac{m_c \underline{r}_1 + m_v \underline{r}_2}{m_c + m_v}$

R koord.: $\underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$

red. Masse $\mu = \dfrac{m_c m_v}{m_c + m_v}$

(2) S. gl.

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2(m_c + m_v)} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Big) \Psi = E \Psi$$

(3) Separationsansatz: $\Psi(\underline{R}, \underline{r}) = A(\underline{R})\, \zeta(\underline{r})$

→ SP verhält sich wie freies Teilchen

→ R eff. H-Problem lösen

(4) Lösung

H-Eigenfkt.

(a) Eigenfkt.: $\Psi_{\underline{k},n}(\underline{R},\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}} f_n(r)$

freien SP

Haupt QZ (Niveau)

(b) Eigenenergie: $E_{\underline{k},n} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2(m_c+m_v)} - \underbrace{\dfrac{\mu e^4}{2\underline{\underline{\varepsilon}}^2\hbar^2}}_{\text{Bindungsenergie } E_b} \dfrac{1}{n^2}$

Abschirmung

(Analog zur Ery. bei H)

→ Bildung eines El-Loch Paares aufgrund der C-Anziehung

→ neues Quasiteilchen: Exziton (X)

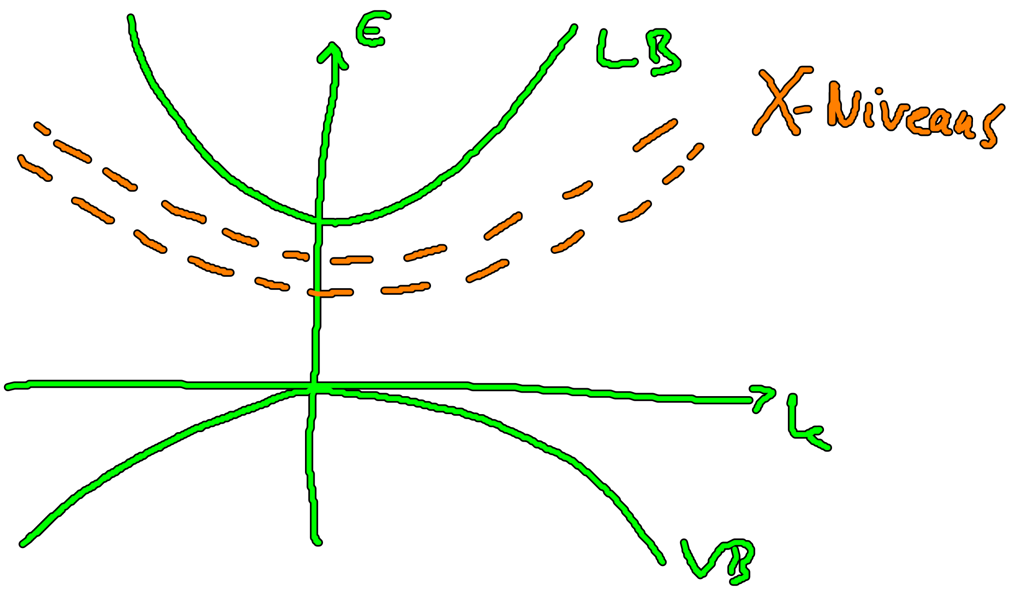
(gebundene Zustände des X sind H-ähnlich)

· Energie: Diff. zw. angeregten X-Zuständen und dem GZ $(E = \delta E - \Delta)$

$$\delta E = E + \Delta = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2(m_c+m_v)} - E_b \frac{1}{n^2}}_{\text{Absenkung d. Energie für gebundenen X-Zustände}} + \Delta^{=E_{gap}}$$

Für niedrigsten angeregten Zustand ($n=1$) gilt:

$$\delta E_1 = \Delta - E_b$$



Wannier-Exziton $\longleftrightarrow$ Frenkel-Exziton
(großer Bohrradius) (stark lokalisiert)

hier: nicht-WW El u Löcher als quasi-frei Teilchen mit ebenen Wellen

$\longrightarrow$ X delokalisiert, Wannier

7. Boltzmann-Gleichung

Ähnlich zur Boltzmanngl. für die El-Phon-WW

$$i\hbar \partial_t \langle a_{1k}^\dagger a_{2k} \rangle = \langle [a_{1k}^\dagger a_{2k}, H_e + H_{e-e}]_- \rangle$$

$= (\varepsilon_{2k} - \varepsilon_{1k}) \langle a^+_{1k} a_{2k} \rangle$ $\quad A, B, C \hat{=}$ Bandindex, Wellenzahl

$$+ \sum_{ABC} \Big[V^{2k\,A}_{B\,C} \{ \langle a^+_{1k} a_B \rangle \langle a^+_A a_C \rangle - \langle a^+_{1k} a_C \rangle \langle a^+_A a_B \rangle \}$$

$$- V^{A\,B}_{1k\,C} \{ \langle a^+_A a_{2k} \rangle \langle a^+_B a_C \rangle - \langle a^+_A a_C \rangle \langle a^+_B a_{2k} \rangle \} \Big]$$

$$+ \sum_{ABC} \Big[V^{2k\,A}_{B\,C} \langle a^+_{1k} a^+_A a_C a_B \rangle^c - V^{A\,B}_{1\,C} \langle a^+_A a^+_B a_C a_{2k} \rangle^c \Big\}$$

Bew.gl. für Korr.fkten

- Ansatz: Korr.entwicklung 2. Ordnung, d.h.

$\langle a^+ a^+ a^+ a a a \rangle \longrightarrow 0$

Beitrag von Ito

- Vereinfach: 1 Band „2" → „1" $\varepsilon_{2k} - \varepsilon_{1k} \big|_{2 \to 1} = 0$

- Frage: Änderung der Besetz.wahrs. $\rho_k = \langle a^+_k a_k \rangle$ unter Einfluß der El-El-WW

$$i\hbar \partial_t \langle a^+_1 a^+_2 a_3 a_4 \rangle^c = -(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4) \langle a^+_1 a^+_2 a_3 a_4 \rangle^c$$

$$+ (V^{21}_{34} - V^{12}_{43}) \big[\rho_4 \rho_3 (1-\rho_2)(1-\rho_1) - (1-\rho_4)(1-\rho_3) \rho_2 \rho_1 \big]$$

$$+ f\big(\langle a^+_1 a^+_2 a_3 a_4 \rangle^c, \cancel{\langle a^+ a^+ a^+ a a a \rangle^c} \big)$$

führen zur Abschirmung
vernachlässigen

Jetzt:
- Markov-Approx.
- $\langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle$ formal lösen
- einsetzen in Bewgl. für ρ_k

- Boltzmanngl.:

$$\dot{\rho}_k(t) = \frac{4\pi}{\hbar^2} \sum_{k'q'} \left[2V_q - V_q V_{k'-k} \right] \underbrace{\delta(\varepsilon_k + \varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k+q})}_{\text{E-erhaltung bei Stoß}}$$

$$\times \Big\{ -\rho_k(t)\rho_{k'+q}(t)\left[1-\rho_{k+q}\right]\left[1-\rho_{k'}\right] \quad \text{Ausstreuung}$$

$$+ \underbrace{\left[1-\rho_k\right]\left[1-\rho_{k'+q}\right]}_{\sim\,\text{Nichtbesetzung}} \underbrace{\rho_{k+q}\,\rho_{k'}}_{\sim\,\text{Besetzung}} \Big\} \quad \text{Einstreuung}$$