

### 3.6. Wechselwirkung zwischen Elektronen + Löchern

Wdh.: Hamiltonoperator der Defektelektronen

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \left( \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{\text{eff}}} - E_{0,V} \right)$$

↑  
pos. effektive Masse  
pos. Ladung bei W/D mit auferen Feldern

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^{\dagger}(x) h(x) \hat{\psi}(x) d^3x + \frac{1}{2} \iint \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx'$$

Zerlegung der Feldoperatoren in Valenz + Leitungsband Anteil

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},V}^{\dagger} \varphi_{\mathbf{k},V}^{\dagger}(x) + \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},L}^{\dagger} \varphi_{\mathbf{k},L}^{\dagger}(x)$$

$\varphi_{\mathbf{k},L}$ : WF seien gegeben durch  $H_{eff} \varphi = E \varphi$   
und bestmöglich selbstkonsistent  
bestimmt werden

es gilt  $\langle k_i | k_j \rangle = \delta_{kk'} \delta_{ij}$   
 $i, j = L, V$

Vertauschungsrelationen

$$\{ a_{\mathbf{k},i}, a_{\mathbf{k}',j}^{\dagger} \} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij}$$

↙ für Bewegung der Teilchen

$$\Rightarrow \hat{H} = H_0 + H_{WW}$$

$$H_0 = \sum_{k, l, i, j} a_{k, i}^\dagger a_{l, j} \langle k | l | h | k' | j' \rangle$$

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \\ j_1, j_2, j_3, j_4}} a_{k_1, j_1}^\dagger a_{k_2, j_2}^\dagger a_{k_3, j_3} a_{k_4, j_4} \langle k_{j_1}, k_{j_2} | V | k_{j_3}, k_{j_4} \rangle$$

Nüt:  $a_{k, V}^\dagger a_{k, V} = 1 - d_k^\dagger d_k$

$$a_{k, L}^\dagger a_{k, L} = d_k^\dagger d_k$$

### 3.6.1. WW mit Erhaltung der Teilchenzahl (Exzitonen)

Annahme: Erhaltung der Elektronenzahl im Valenzband und Leitungsband  
(keine Intra-band Übergänge → später)

Zerlegung der Summe in  $H_{WW}$

$$\sum_{\substack{k_i \\ j_i}} = \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_i \in L}}}_{H_{LL}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_i \in V}}}_{H_{VV}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1, j_4 \in V \\ j_2, j_3 \in L}}}_{H_{2V}^{(1)}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1, j_4 \in L \\ j_2, j_3 \in V}}}_{H_{2V}^{(2)}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1, j_3 \in L \\ j_2, j_4 \in V}}}_{H_{LV}} + \underbrace{\sum_{\substack{k_i \\ j_1, j_3 \in V \\ j_2, j_4 \in L}}}_{H_{LV}^{(2)}}$$

$H_{LL}$ : WW der LB-El untereinander  
 $H_{VV}$ : WW der VB-El untereinander  
 $H_{2V}^{(1)}$  und  $H_{2V}^{(2)}$ : identische Beiträge  
 $H_{LV}$  und  $H_{LV}^{(2)}$ : WW zwischen El. und Löchern

$$H_{LL} = \frac{1}{2} \sum_{k_i} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_3} a_{k_4} \langle k_1, k_2 | V | k_3, k_4 \rangle$$

$$H_{VV} = \frac{1}{2} \sum_{k_i} d_{k_1} d_{k_2} d_{k_3}^{\dagger} d_{k_4}^{\dagger} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k_i} \left\{ \delta_{k_1 k_3} \delta_{k_2 k_4} - \delta_{k_1 k_3} d_{k_4}^{\dagger} d_{k_1} + \delta_{k_1 k_3} d_{k_4}^{\dagger} d_{k_2} \right. \\ \left. - \delta_{k_1 k_4} d_{k_3}^{\dagger} d_{k_2} + \delta_{k_1 k_4} d_{k_3}^{\dagger} d_{k_1} \right. \\ \left. + d_{k_3}^{\dagger} d_{k_4}^{\dagger} d_{k_1} d_{k_2} \right\} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle$$

WW der Defektelektronen

(im Prinzip wie im Kapitel  
'Defektelektronen')

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

$H_{LV}^{(2)}$  Austauschterm  
(Vertauschung  $k_1 \leftrightarrow k_2$ )

=>

$$\hat{H} = H_{el} + H_D + \boxed{H_{D-D}} + \underbrace{H_{D-D} + H_{d-el}}_{\text{WW im VB bzw. LB}} + W_{Voll}$$

↓ Energie der El. im VB ohne WW  
 ↓ Energie der Löcher ohne WW  
 ↓ Energie des vollen VB



WW zwischen EL & Löchern

$$H_{el-D} = \sum_{k_i} \left( -a_{k_1}^+ a_{k_4} d_{k_3}^+ d_{k_2} \langle k_1, L, k_2, V | V | k_3, V, k_4, L \rangle \right. \\ \left. + a_{k_2}^+ a_{k_4} d_{k_3}^+ d_{k_1} \langle k_1, V, k_2, L | V | k_3, V, k_4, L \rangle \right)$$

Fall: nur ein Elektron + 1 Loch

Ansatz für Eigenfunktionen von  $H_{el-D}$ : Zweiteilchensystem

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

→ wasserstoffähnliches <sup>EW</sup> System

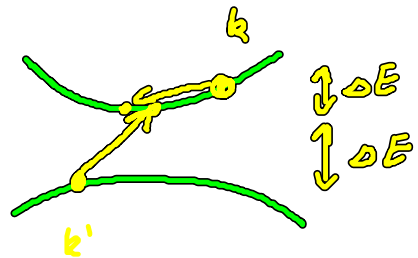
Exziton!

### 3.6.2. WW ohne Teilchenzahlerhaltung

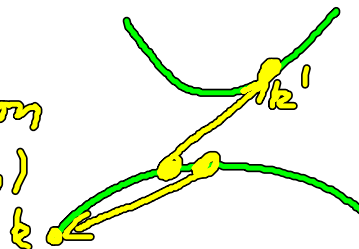
→  $H_{VL}$  enthält noch weitere als die in 3.6.1 diskutierten Glieder

Band Band  
Übergang

c Stoßionisation  
( $e^- + h$  stoßen →  $2e^-$ )



h-Auger Rekombination  
( $h + h$  stoßen →  $e + h$ )



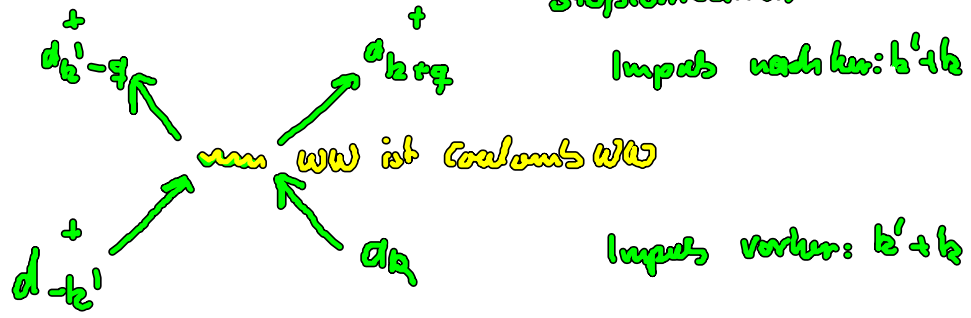
$$\sum_{\substack{k_i \\ j_i}} \rightarrow \underbrace{\sum_{LLL} + \sum_{LLV} + \sum_{LVLL}}_{e\text{-Auger Rekomb.}} + \underbrace{\sum_{VLLL}}_{e\text{-Stoßionisation}} \left. \vphantom{\sum_{\substack{k_i \\ j_i}}} \right\} \hat{H}_{ii}^e$$

$$+ \underbrace{\sum_{LVVV} + \sum_{VLVV}}_{h\text{-Auger Rekomb.}} + \underbrace{\sum_{VVLV} + \sum_{VVVL}}_{h\text{-Stoßionisation}} \left. \vphantom{\sum_{\substack{k_i \\ j_i}}} \right\} \hat{H}_{ii}^h$$

Matrix element

$$\hat{H}_{ii}^e = \sum_{\substack{k, b, q}} M_{\substack{q \\ k, b}}^e a_{k+b+q}^\dagger a_{b'-q}^\dagger d_{-b'}^\dagger a_k + \sum_{\substack{k, b, q}} M_{\substack{q \\ k, b}}^{e^*} a_{k+b+q}^\dagger d_{-(b'-q)}^\dagger a_{b'} a_k$$

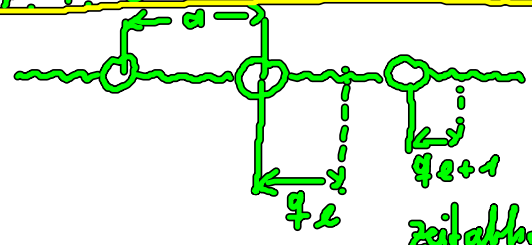
stellt Impulserhaltung sicher      Stoßionisation      Auger



Löcher analog  $d \leftrightarrow a$

### 3.7. Phononen

#### 3.7.1 Die Lineare Kette



Gitterion L mit Masse M  
N Anzahl der Atome

zeitabhängige Auslenkung des l-ten Gitterions

$$(1) \quad M \ddot{q}_L = K (q_{L+1} - q_L) - K (q_L - q_{L-1}) = K (q_{L+1} + q_{L-1} - 2q_L)$$

zyklisch geschlossen  $q_N = q_{N+1}$

Ansatz: ebene Wellen

$$q_L(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikLa} B_k(t)$$

Amplitude

Wellenvektor  $\downarrow$   $k = \frac{2n\pi}{Na}$   
ganze Zahl  $\downarrow$

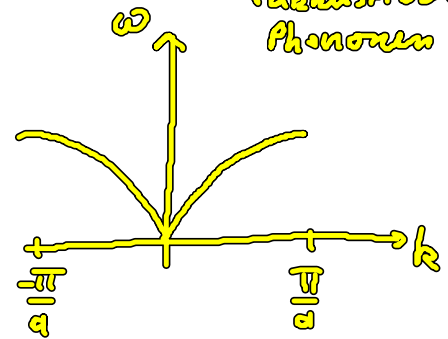
in (1)  $\rightarrow \ddot{B}_k = \frac{K}{M} (e^{ikLa} - e^{-ikLa} - 2) B_k$

einfache Schwingungsgleichung

Ansatz:  $B_k = e^{-i\omega_k t} A_k \rightarrow \omega_k = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$

Dispersionsrelation

(akustische Phänomene)



$$\rightarrow q_L = \sum_k \left( \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikLa} e^{-i\omega_k t} A_k + \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikLa} e^{i\omega_k t} A_k^* \right)$$

$$q_L = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MNu\omega_k}} (b_k + b_{-k}^*) e^{ikLa} \quad (*)$$

Impulse:  $p = M \dot{q}_l$

$$p_l = -i \sum_k \sqrt{\frac{\hbar M \omega_k}{2L}} (b_k - b_{-k}^\dagger) e^{ikl a}$$

dimensionlose  
Amplituden

$$a_k = A_k \sqrt{\frac{2M a_k}{\hbar}} \\ b_k = e^{-i\omega_k t} a_k$$

$$\Rightarrow T = \sum_{l=1}^N \frac{M}{2} \dot{q}_l^2$$

$$V = \frac{1}{2} K \sum_{l=1}^N (q_l - q_{l+1})^2$$

$\Rightarrow$  Lagrange Funktion  $L$   
bekannt

Legendre Transform zur Hamiltonfunktion  $H$

$\longrightarrow$

$$H = \sum_l p_l \dot{q}_l - L(q, \dot{q}, t)$$

einsetzen von ☺

$$\Rightarrow H = \sum_k \hbar \omega_k \frac{1}{2} (b_k^\dagger b_k + b_k b_k^\dagger)$$

Quantentheoretische Behandlung: Vertauschungsrelation fordern zwischen Ort  $q_l$  und Impuls  $p_l$

$$[q_l, q_j] = 0$$

$$[q_l, \hat{p}_j] = \delta_{lj} \frac{\hbar}{i} \quad (2)$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}}$$



Erzeuger eines Schwingungszustand mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$  Phonon

Es gilt wegen (2)

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}] = 0$$

$\Rightarrow$  Phononen sind Bosonen

### 3.7.2. Wechselwirkung zwischen Phonon + Elektronen

Bisher: Entkopplung der Elektronen- und Gitterdynamik (Born-Oppenheimer)

Korrektur in der Größenordnung  $\sqrt{\frac{m_e}{m_i}} \approx 10^{-2}$

$\rightarrow$  Störungstheoretische Behandlung der WW möglich

Ionen  $R_n$

$$R_n^{(0)} + q_{\mathbf{k}}(t)$$



Phononen

$\hat{=}$  quantisierte Gitterschwingungen

Elektronen  $r_i$

$$\sum_n V_{e-i} (r_i - R_n^{(0)})$$



Quasielektronen Entf. im periodischen Pot.



Ziel:

dynamisches  
Ionen-Gitter

Vorgehen:  $H_{e-i} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{n=1}^{N_i} V_{e-i}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n)$

Taylor Entw.  
des Potentials  
um Ruhelage

$$\sum_i \sum_n V_{e-i}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n^{(0)}) + \underbrace{\sum_n \sum_{\mathbf{q}} q_n \nabla_{\mathbf{R}_n} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n)}_{1. \text{ Ordnung}}$$

0. Ordnung

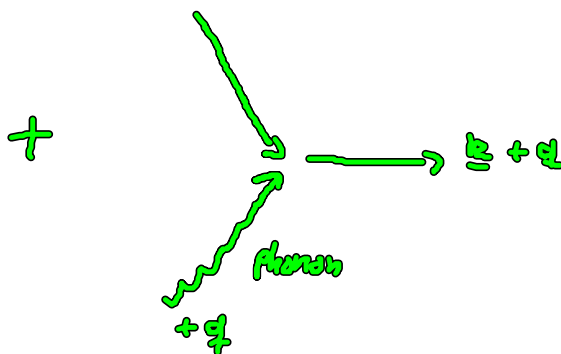
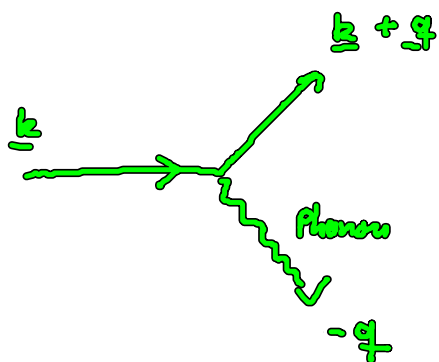
Bewegung im starren  
Gitter

→ bereits behandelt  
durch Blochfunktion

1. Ordnung

WW mit zeitabh.  
Ionenpotenzial

$$\Rightarrow H_{e-ph} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \underbrace{(b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}})}_{\text{resultiert von } q_e} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$$



Emission

+

Absorption eines Photons