- Wir wissen noch nichts über die Ladung der Defektelektronen (ahnen aber, daß sie positiv sein muß). Wie bekommt man die Ladung aus unserem Formalismus heraus?

Betrachte: Ladungsdichte

$$\rho(x) = -|e|\ \hat{\psi}^{+}(x)\,\hat{\psi}(x) \qquad \text{(V72)}$$

$$\overset{\text{(V46)}}{\Longrightarrow} \quad \rho(x) = -|e| \underbrace{\sum_{\vec{k}\vec{k}'}}_{\substack{\text{über alle}\\ \text{Valenzband-}\\ \text{Zustände}}} \hat{a}^{+}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}\,\varphi^{*}_{\vec{k}}(x)\,\varphi_{\vec{k}'}(x)$$

$$= -|e| \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \underbrace{\hat{d}_{\vec{k}}\hat{d}^{+}_{\vec{k}'}}_{\delta_{\vec{k}\vec{k}'} - \hat{d}^{+}_{\vec{k}'}\hat{d}_{\vec{k}}} \varphi^{*}_{\vec{k}}(x)\,\varphi_{\vec{k}'}(x)$$

$$= -|e| \left\{ \sum_{\vec{k}} |\varphi_{\vec{k}}(x)|^2 - \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{d}^{+}_{\vec{k}'}\hat{d}_{\vec{k}}\,\varphi^{*}_{\vec{k}}(x)\,\varphi_{\vec{k}'}(x) \right\}$$

$$= \underbrace{-|e| \sum_{\vec{k}} |\varphi_{\vec{k}}(x)|^2}_{\substack{\text{Ladungsdichte}\\ \text{des voll besetzten}\\ \text{Valenzbands}\\ \text{(wird von positiven}\\ \text{Kernen kompensiert)}}} \;\underset{\substack{\text{pos.}\\ \text{Vorzeichen}}}{+}\; \underbrace{|e| \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{d}^{+}_{\vec{k}}\hat{d}_{\vec{k}'}\,\varphi^{*}_{\vec{k}'}(x)\,\varphi_{\vec{k}}(x)}_{\text{Ladungsdichte des Defektel. } \rho^{(d)}} . \qquad \text{(V73)}$$

- Berechnet man z.B. den Erwartungswert für einen Zustand mit einem Defektel. im Zustand $\vec{k}_0$,

$$|\vec{k}_0\rangle = \hat{d}^+_{\vec{k}_0} |\Phi_v\rangle ,$$

so findet man $\langle \varrho^{(d)} \rangle = |e| \, |\varphi_{\vec{k}_0}|^2$.

Anomaler Hall-Effekt

- WW mit äußerem el Feld wird beschrieben durch

$$V_{Feld} = \int dx \; \hat{\psi}^+(x) \left(|e| \, \vec{E} \cdot \vec{r} \right) \hat{\psi}(x) . \quad \text{(V74)}$$

$$\overset{(V46)}{\Longrightarrow} V_{Feld} = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \int dx \; \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'} \, \varphi^*_{\vec{k}}(x) \, |e| \, \vec{E} \cdot \vec{r} \, \varphi_{\vec{k}'}(x)$$

$$= \sum_{\vec{k}\vec{k}'} M_{\vec{k}\vec{k}'} \, \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'}$$

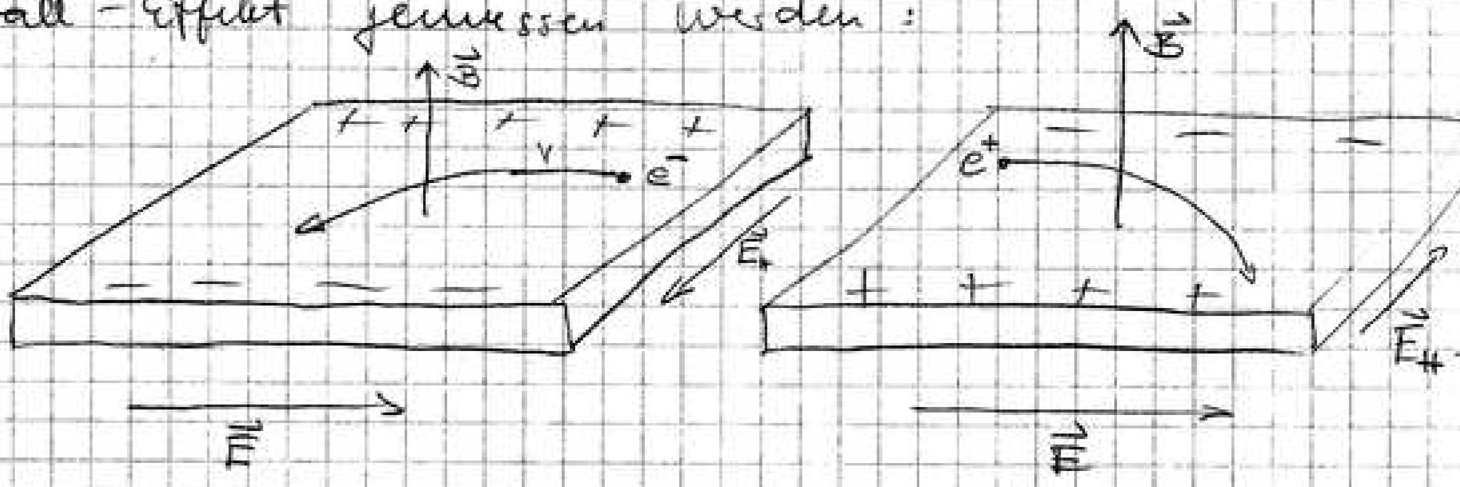
mit $M_{\vec{k}\vec{k}'} = \int dx \; \varphi^*_{\vec{k}}(x) \, |e| \, \vec{E} \cdot \vec{r} \, \varphi_{\vec{k}'}(x)$

$$= \sum_{\vec{k}\vec{k}'} M_{\vec{k}\vec{k}'} \underbrace{\hat{d}_{\vec{k}} \hat{d}^+_{\vec{k}'}}_{\delta_{\vec{k}\vec{k}'} - \hat{d}^+_{\vec{k}'} \hat{d}_{\vec{k}}}$$

$$= \underbrace{\sum_{\vec{k}\vec{k}'} M_{\vec{k}\vec{k}'}}_{\text{pot Energie des vollen Bandes im el. Feld}} \underbrace{- \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{d}^+_{\vec{k}'} \hat{d}_{\vec{k}} \left(M_{\vec{k}'\vec{k}} \right)^*}_{\text{Defektel. im el. Feld}} \quad \text{(V75)}$$

sieht aus, als hätte sich das Vorzeichen der Ladung geändert

- Je nachdem, ob Elektronen (im Leitungsband) oder Defektelektronen (im Valenzband) „beweglicher" sind, tragen diese oder jene nicht bei. Dies kann mittels Hall-Effekt gemessen werden:



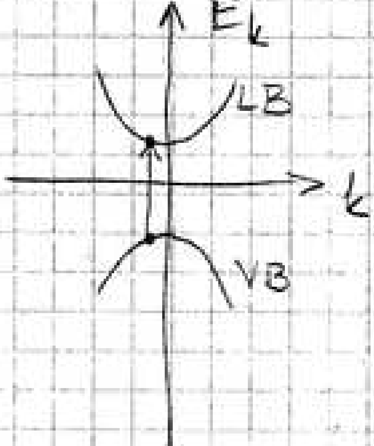
$\vec{F}_H = -|e|\,\vec{v} \times \vec{B}$

Hall-Effekt mit Elektronen als Ladungsträger

$\vec{F}_H = |e|\,\vec{v} \times \vec{B}$

anomaler Hall-Effekt mit Defektelektronen als Ladungsträgern

WW zwischen Elektronen u. Defektelektronen



- Kristall mit Halbleitercharakter
- z.B. durch Laser El. aus Valenzband (VB) ins Leitungsband (LB)
- durch Anlegen von Strömen können auch zusätzlich Ladungsträger ins System kommen oder daraus entfernt werden ⇒ Anzahl El. + Anzahl Defektel.

- Ausgangspunkt wieder (V45)

$$\hat{H} = \int dx\, \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \right) \hat{\psi}(x) \qquad \text{(V76)}$$

$$+ \frac{1}{2} \int dx \int dx'\, \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x).$$

- Zerlegung der Feldoperatoren in VB- und LB-Anteile (k eigentlich $\vec{k}$)

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_k \hat{a}^+_{k,V} \varphi^*_{k,V}(x) + \sum_k \hat{a}^+_{k,L} \varphi^*_{k,L}(x) \qquad \text{(V77)}$$

$$\hat{\psi}(x) = \cdots \text{ (adjungiert)}$$

- Einteilchenwellenfunktionen seien durch

$$\hat{H}_{eff}\, \varphi(x) = E\, \varphi(x) \qquad \text{(V78)}$$
$$\hat{H}_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V_{eff}$$

mit einer „self-consistent field"-Methode bestimmt.

- Annahme: $\int \varphi^*_{k,i}(x)\, \varphi_{k',j}(x)\, dx = \delta_{kk'} \delta_{ij}$ (V79)

$$i,j = L, V$$

- Vertauschungsrelationen

$$[\hat{a}^{(+)}_{k,i}, \hat{a}^{(+)}_{k',j}]_+ = 0$$
$$[\hat{a}_{k,i}, \hat{a}^+_{k',j}]_+ = \delta_{kk'} \delta_{ij} \qquad \text{(V80)}$$

- Hamiltonian von der Gestalt

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ww} \qquad \text{(V81)}$$

- $$\hat{H}_0 = \sum_{\substack{kk' \\ i,j}} \hat{a}^+_{k,i}\,\hat{a}_{k',j} \int dx\, \varphi^*_{k,i}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right) \varphi_{k',j}(x)$$ (V82)

$$\hat{H}_{ww} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4 \\ j_1 j_2 \\ j_3 j_4}} \hat{a}^+_{k_1,j_1}\,\hat{a}^+_{k_2,j_2}\,\hat{a}_{k_3,j_3}\,\hat{a}_{k_4,j_4}\, W\!\begin{pmatrix} k_1 k_2 \\ j_1 j_2 \end{pmatrix}\!\begin{vmatrix} k_3 k_4 \\ j_3 j_4 \end{pmatrix}$$

mit $$W\begin{pmatrix} k_1 k_2 \\ j_1 j_2 \end{pmatrix}\begin{vmatrix} k_3 k_4 \\ j_3 j_4 \end{pmatrix} = \int dx \int dx'\, \varphi^*_{k_1,j_1}(x)\, \varphi^*_{k_2,j_2}(x') \times \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, \varphi_{k_3,j_3}(x')\, \varphi_{k_4,j_4}(x)$$ (V83)

- Wir betrachten nun Defektel in VB und Elektronen im LB (und lassen den Index L weg).

$$\hat{a}_{k,V} = \hat{d}^+_k \quad , \quad \hat{a}^+_{k,V} = \hat{d}_k$$
$$\hat{a}_{k,L} = \hat{a}_k \quad , \quad \hat{a}^+_{k,L} = \hat{a}^+_k$$ (V84)

- Wir beschränken unsere Betrachtung nun auf Prozesse, bei denen die Anzahl Defektel und Elektronen erhalten bleibt.
Man beachte: Dies ist auch eine Näherung für Prozesse wo keine realen Übergänge stattfinden, da auch virtuelle Übergänge unterbunden werden.

- In $\hat{H}_0$ haben wir dann

$$i = j = L \rightarrow (\hat{a}^+_k \hat{a}_{k'})$$

oder $$i = j = V \rightarrow (\delta_{kk'} - \hat{d}^+_{k'} \hat{d}_k)$$

- In $\hat{H}_{WW}$ gibt es folgende Möglichkeiten

1. $j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = L$ — Erz. und Vern. von 2 Elektronen.

2. $\ldots = V$ — Erz. und Vern. von 2 Löchern

3. $j_1 = j_4 = V, \quad j_2 = j_3 = L$ — Erz. u. Vern. von je einem Loch und einem Elektron
   $\ldots = L, \quad \ldots = V$

4. $j_1 = j_3 = V, \quad j_2 = j_4 = L$
   $\ldots = L, \quad \ldots = V$

Die jeweils zwei Möglichkeiten in 3 und 4. liefern gleiche Beiträge

$$\rightarrow \quad \hat{H}_{WW} = \hat{H}_{LL} + \hat{H}_{VV} + \hat{H}_{LV} \qquad (185)$$

mit $$\hat{H}_{LL} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \ldots k_4} \hat{a}^+_{k_1} \hat{a}^+_{k_2} \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} W\begin{pmatrix} k_1 k_2 & k_3 k_4 \\ L\,L & L\,L \end{pmatrix}$$

(WW zwischen Leitungsbandel.)

$$\hat{H}_{VV} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \ldots k_4} \hat{d}_{k_1} \hat{d}_{k_2} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}^+_{k_4} W\begin{pmatrix} k_1 k_2 & k_3 k_4 \\ V\,V & V\,V \end{pmatrix}$$

(WW zwischen Defektelektronen)

- In $\hat{H}_{VV}$ müssen wir wieder in die „richtige" Reihenfolge (Vernichter rechts) bringen

$$\Rightarrow \hat{H}_{VV} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \cdots k_4} \Big\{ \underbrace{\delta_{k_2 k_3} \delta_{k_1 k_4}}_{A} - \underbrace{\delta_{k_1 k_3} \delta_{k_2 k_4}}_{B} - \underbrace{\delta_{k_2 k_3} \hat{d}^+_{k_4} \hat{d}_{k_1}}_{C} + \underbrace{\delta_{k_1 k_3} \hat{d}^+_{k_4} \hat{d}_{k_2}}_{D}$$
$$+ \underbrace{\delta_{k_2 k_4} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}_{k_1}}_{E} - \underbrace{\delta_{k_1 k_4} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}_{k_2}}_{F} + \underbrace{\hat{d}^+_{k_3} \hat{d}^+_{k_4} \hat{d}_{k_1} \hat{d}_{k_2}}_{G} \Big\} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ V & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & V \end{smallmatrix}\right)$$

A: Coulomb-WW im vollen Valenzband

B: " -Austausch-WW im vollen VB

C: WW von Defekte. mit <u>VB</u>-Elektronen

D: Austausch-WW " " " "

E = D

F = C

G: Coulomb-WW zwischen zwei Defektelektronen

$$= \quad \hat{H}_{LV} = \frac{1}{2} \sum \hat{a}^+_{k_1 j_1} \hat{a}^+_{k_2 j_2} \hat{a}_{k_3 j_3} \hat{a}_{k_4 j_4} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ j_1 & j_2 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ j_3 & j_4 \end{smallmatrix}\right) \tag{V86}$$

$$= \hat{H}^{(1)}_{LV} + \hat{H}^{(2)}_{LV}$$

$\hat{H}^{(1)}_{LV}$: 3. oben VLLV und LVVL, liefern beide das Gleiche

$\hat{H}^{(2)}_{LV}$: 4. oben VLVL LVLV, liefern beide das Gleiche

$$\hat{H}^{(1)}_{LV} = \sum_{k_1 \cdots k_4} \hat{a}^+_{k_1} \hat{a}_{k_4} \delta_{k_2 k_3} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ L & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) - \sum_{k_1 \cdots k_4} \hat{a}^+_{k_1} \hat{a}_{k_4} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}_{k_2} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ L & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ L & V \end{smallmatrix}\right) \tag{V87}$$

1. Term: WW zwischen LB-Elektron mit vollem VB

2. Term: Vernichtung und Erz. eines Defektel. + Vern. und Erz. von einem LB-Elektron

$\rightarrow$ Coulomb-Streuung von Elektron an Defektelektron

$\hat{H}_{LV}^{(2)}$ liefert die beiden zugehörigen Austausch-Ausdrücke:

$$\hat{H}_{LV}^{(2)} = -\sum_{k_1 \dots k_4} \hat{a}^+_{k_2} \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1 k_3} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ V & L \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) - \sum_{k_1 \dots k_4} \hat{a}^+_{k_2} \hat{a}_{k_4} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}_{k_1} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ V & L \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) \tag{V88}$$

- Unser Gesamt-Hamiltonian lautet nun also

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ww} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_d + \hat{H}_{el-d} + \hat{H}_{el-el} + \hat{H}_{d-d} + E_V \tag{V89}$$

mit

$$\hat{H}_{el} = \sum_k \underbrace{E_{k,L}}_{\text{aus self-consistent field}} \hat{a}^+_k \hat{a}_k$$ Energie der El. im LB

$$\hat{H}_d = -\sum_k E_{k,V} \hat{d}^+_k \hat{d}_k$$ Energie der Defekt-el im VB

$$\hat{H}_{el-d} = \sum_{k_1 \dots k_4} \left(-\hat{a}^+_{k_1} \hat{a}_{k_4} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}_{k_2} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ L & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) + \hat{a}^+_{k_2} \hat{a}_{k_4} \hat{d}^+_{k_3} \hat{d}_{k_1} W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ V & L \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) \right)$$

WW zwischen El. und Defekt-el.

$$\hat H_{el-el} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} \hat a^+_{k_1} \hat a^+_{k_2} \hat a_{k_3} \hat a_{k_4} \, W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ L & L \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ L & L \end{smallmatrix}\right)$$

El-El-WW im LB

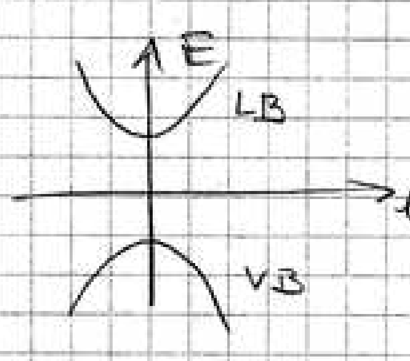
$$\hat H_{d-d} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} \hat d^+_{k_3} \hat d^+_{k_4} \hat d_{k_1} \hat d_{k_2} \, W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ V & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & V \end{smallmatrix}\right)$$

D-D-WW im VB

$$E_V = \sum_k \int dx \, \varphi^*_{k,V} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec\nabla^2 + V\right) \varphi_{k,V} + \frac{1}{2} \sum_{kk'} \left\{ W\left(\begin{smallmatrix} k & k' \\ V & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k' & k \\ V & V \end{smallmatrix}\right) - W\left(\begin{smallmatrix} k & k' \\ V & V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k & k' \\ V & V \end{smallmatrix}\right) \right\}$$

Energie des vollen VB („Nullpunkts-energie")

- Wegen



untersuchen wir

$$E_{k,L} = E_{0,L} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L}$$
$$E_{k,V} = E_{0,V} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_V}$$
(V90)

Exzitonen

- Wir wollen nun mit dem Hamiltonian $\hat H$ (V89) die Schrödinger-Gl. für ein spezielles System lösen,

$$\hat H |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle$$

- Jeweils nur ein LB-Elektron und ein VB-Defektel.

$$|\Phi\rangle = \hat a^+_{k_1} \hat d^+_{k_2} |\Phi_V\rangle$$

$|\Phi_V^-\rangle$ bezeichnet wurde das voll mit Elektronen besetzte VB, das in unserem Problem als Vakuum für Defektel. fungiert.

- El und Defektel werden im allgemeinen eine Überlagerung von versch. k-Zuständen bilden:

$$|\tilde{\Phi}^-\rangle = \sum_{k_1 k_2} c_{k_1 k_2} \hat{a}^+_{k_1} \hat{d}^+_{k_2} |\Phi_V^-\rangle \tag{V91}$$

- Wenden wir $\hat{H}$ an:

$$\hat{H} |\tilde{\Phi}^-\rangle$$

so sehen wir, daß $\hat{H}_{el-el}$ und $\hat{H}_{d-d}$ keine Beiträge liefern, da jeweils zwei Teilchen vernichtet werden (klar, keine WW zwischen gleichen Teilchen, da nur jeweils ein LB-El. und ein VB-Defektel. anwesend)

$$\Rightarrow \quad \hat{\tilde{H}} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_{el-d} \qquad (E_V \text{ weggelassen}) \tag{V92}$$

$\underset{\Rightarrow}{(V90)}$

$$\hat{H}_{kin} = \sum_k \left\{ \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_L} + E_{0,L} \right) \hat{a}^+_k \hat{a}_k + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_V} - E_{0,V} \right) \hat{d}^+_k \hat{d}_k \right\}$$

sodaß

$$\hat{H}_{kin} |\tilde{\Phi}^-\rangle = \sum_{k_1 k_2} c_{k_1 k_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_V} + \overset{E_{0,L}-E_{0,V}}{\overbrace{\Delta E}} \right) \times \hat{a}^+_{k_1} \hat{d}^+_{k_2} |\Phi_V^-\rangle \tag{V93}$$

$$\hat H_{el-d} |\tilde\Phi^-\rangle = -\sum_{k_1 \ldots k_4} \Big\{ W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_2 \\ L & V \end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) - W\left(\begin{smallmatrix} k_2 & k_1 \\ V & L \end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix} k_3 & k_4 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) \Big\} \times \sum_{kk'} c_{kk'} \hat a^+_{k_1} \hat a_{k_4} \hat d^+_{k_3} \hat d_{k_2} \hat a^+_{k} \hat d^+_{k'} |\Phi_V^-\rangle$$

$= \ldots$ ($\rightarrow$ Übung)

$$= -\sum_{k_1 \ldots k_4} c_{k_3 k_4} \hat a^+_{k_1} \hat d^+_{k_2} |\Phi_V^-\rangle \times \Big\{ W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_4 \\ L & V \end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix} k_2 & k_3 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) - W\left(\begin{smallmatrix} k_4 & k_1 \\ V & L \end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix} k_2 & k_3 \\ V & L \end{smallmatrix}\right) \Big\} \qquad \text{(V94)}$$

Schließlich auf der rechten Seite

$$E |\tilde\Phi^-\rangle = E \sum_{k_1 k_2} c_{k_1 k_2} \hat a^+_{k_1} \hat d^+_{k_2} |\Phi_V^-\rangle \qquad \text{(V95)}$$

- Von links mit $\langle \Phi_V^- | \hat d_{\tilde k_2} \hat a_{\tilde k_1}$ auf

$$\hat H |\tilde\Phi^-\rangle = E |\tilde\Phi^-\rangle$$

und Umbenennen der Indizes liefert Gl für Koeffizienten $c_{k_1 k_2}$

$$c_{k_1 k_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_V} + \Delta E \right) - \sum_{k_3 k_4} c_{k_3 k_4} \{\} = E\, c_{k_1 k_2} \qquad \text{(V96)}$$

- $W\left(\begin{smallmatrix} k_1 & k_4 \\ L & V \end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix} k_2 & k_3 \\ V & L \end{smallmatrix}\right)$ werten wir nun mit Blochschen Wellen (V64) aus,

$$\varphi_{k,j}(x) = e^{i\vec k \cdot \vec r}\, u_{k,j}(x) \qquad \text{(V97)}$$