Serie 5: Halbleiter Physik

Abgabe: 23. November, 2004

Aufgabe 5.1 Modell eines Band Isolator in 1D

In diese Übung wollen wir durch Untersuchen eines einfachen Modells einige Eigenschaften des Isolators illustrieren. Wir betrachten die Zustände der Elektronen, die sich in eine Atomkette bewegen. Da die Elektronen in einem isolierenden Material stark an die Atome gebunden sind, werden wir die Kette in der so genannten 'Tight-binding' Näherung betrachten. Jedes Atom entspricht einem lokalisierten Elektronenzustand. Da die atomaren Zustände nicht orthogonal sind, können die Elektronen zwischen den angrenzenden Atomen hüpfen. Elektronen bewegen sich also zwischen den Atomen, also entspricht 'hüpfen' der kinetischen Energie.

Dieses System lässt sich besonders einfach in der zweiten Quantisierung behandeln. Seien, c_i und $c_i^\dagger$ Erzeugungs- bzw. Vernichtungs-Operatoren für das Elektron auf der Position i und $-t$ das Overlap-Integral. Dann schreibt man den Hamilton-Operator als,

$$H_0 = -t \sum_i \left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i \right). \tag{1}$$

Nehme jetzt an, dass die Kette aus zwei alternierenden Atomarten (zum Beispiel As und Ga) besteht, wie in Abb. 1 gezeigt. Im allgemeinen entsprechen die verschiedenen Atomarten verschiedenen Ionisierungsenergien.

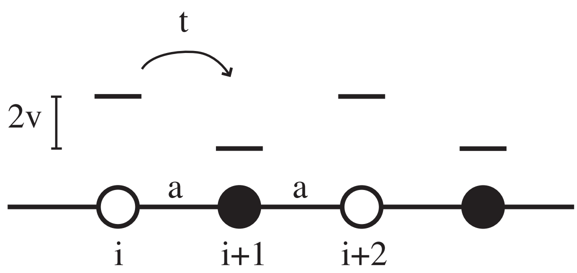

Abbildung 1: Alternierende Kette

Sei $2v$ die Differenz der Ionisierungsenergien. Ein Elektron, das sich in der alternierenden Kette bewegt, spürt dann das Potential, $v_i = v(-v)$ für i gerade (ungerade). In der zweiten Quantisierung,

$$V = v \sum_i \cos(\pi/a R_i)\ c_i^\dagger c_i. \tag{2}$$

[a] Betrachte erst den Fall, $v = 0$. Zeige, dass die Zustände,

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{ikR_i} c_i \tag{3}$$

die Eigenzustände mit Energie $\epsilon_k = -2t \cos ka$ sind, wobei $a = R_{i+1} - R_i$ der Abstand zwischen der Atomen ist.

[b] Zeige, dass die sich die Eigenzustände, für $v \neq 0$, als

$$a_k = u_k c_k + v_k c_{k+K_0/2} \qquad b_k = -v_k c_k + u_k c_{k+K_0/2}, \tag{4}$$

schreiben lassen, wobei $K_0 = 2\pi/a$ ist und $k \in [-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\rangle$. Zeige, dass die Bandstruktur aus zwei Bändern,

$$E_k^{a,b} = \pm E_k = \pm\sqrt{\epsilon_k^2 + v^2} = \pm(2t)\sqrt{\cos^2 ka + \Delta^2}, \tag{5}$$

besteht.

[c] Betrachte nun den Grundzustand der $N/2$ Elektronen in der Kette. Was ist der Unterschied zwischen den Fällen [a] und [b]?

Aufgabe 5.2 Coulomb Wechselwirkung - Exzitonen

Elektronen sind geladene Teilchen und stossen sich deswegen ab. Wir werden eine vereinfachte Version des Coulomb'sches Potential betrachten. Wir nehmen an, dass zwei Elektronen, falls sie sich auf angrenzenden Atomen befinden, die Energie des Systems um u erhöhen. In der zweiten Quantisierung lässt sich diese Wechselwirkung als,

$$U = \frac{u}{2} \sum_i n_i n_{i+1} = \frac{u}{2} \sum_i c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{i+1} c_i, \tag{6}$$

schreiben.

Wir wollen jetzt den Einfluss der Wechselwirkung auf die Anregungen der Kette mit $N/2$ Elektronen untersuchen. Wir führen eine Elektron-Loch Transformation ein. Nähmlich,

$$\alpha_k = a_k \qquad\qquad \beta_k = b_{-k}^\dagger, \tag{7}$$

so dass der Operator $\alpha_k^\dagger$ ein Elektron im Leitungsband und der Operator $\beta_k^\dagger$ ein Loch im Valenzband erzeugt.

[a] Zeige, dass der Grundzustand der Kette mit $N/2$ Elektronen als ein Anregungsvakuum, $|0\rangle$, verstanden werden kann, wobei,

$$\alpha_k|0\rangle = 0 \qquad\qquad \beta_k|0\rangle = 0. \tag{8}$$

[b] Zeige, dass die abstossende Wechselwirkung zwischen Elektronen zu einer anziehenden Wechselwirkung zwischen den Elektronen im Leitungsband und den Löchern iem Valenzband führt.

[c] Wir wollen nun das Energiespektrum der Elektron-Löch Anregungen (Exzitonen) berechnen. Wie im Skript nehmen wir an, dass der Zustand eines Exzitons mit Impuls $-q$ die Form,

$$|\psi_{-q}\rangle = \sum_k A_k^q \alpha_{-k}^\dagger \beta_{k+q}^\dagger |0\rangle, \tag{9}$$

annimmt, wobei die Koeffizienten A_k^q zu bestimmen sind.

Zeige, dass die Energien der Exziton-Anregungen als Lösungen der Gleichung,

$$\frac{1}{u} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\cos 2qa}{E_{-k} + E_{k+q} - \omega_q} \tag{10}$$

gegeben sind. Diskutiere graphisch die Lösungen dieser Gleichung beim $q = 0$ für eine kleine Kette ($N = 4$ oder $N = 8$). Wie wird das Anregungsspektrum durch die Wechselwirkung modifiziert? Vergleiche mit der Kapitel 2.2 des Skripts.

[d] Im allgemein lässt sich die Gleichung (10) nur numerisch lösen. Für $q = 0$ und $u \to 0$, ist aber $\omega_0 \to 2\Delta$, so dass sich die Summe auf der rechte Seite der Gleichung (10) durch,

$$\frac{1}{N} \sum \frac{1}{2\sqrt{\cos^2 k + \Delta^2} - \omega_0} \simeq 2 \int_0^{\pi/2} \frac{dk}{2\sqrt{\cos^2 k + \Delta^2} - \omega_0} \tag{11}$$

$$\overset{\omega_0 \to 2\Delta}{\simeq} 2 \int_0^{\Lambda} \frac{dk}{2(\Delta - \omega_0) + \frac{k^2}{2\Delta}} \tag{12}$$

annähern lässt, wobei Λ eine Konstante ist (warum?). Berechne $\omega_0(U)$ im Limes $(2\Delta - \omega_0) \to 0$.

[e] Zeige, dass die Energie des Exzitons mit $q \simeq 0$ in der Näherung [d] durch,

$$\omega_q = \omega_0 + \frac{q^2}{2(2m^*)} \tag{13}$$

gegeben ist, wobei m^* die effektive Masse im Bandminimum ist.

Aufgabe 5.3 Exzitonen in Reale Halbleiter

Wir betrachten einen Halbleiter mit parabolischen Valenz- und Leitungsbändern mit den Massen m_v und m_c. Berechne die Bindungsenergie E_0 eines wasserstoffähnlichen gebundenen Zustands, den ein Loch und ein Elektron bilden. Die Dielektrizitätskonstante des Halbleiters sei ϵ. Vergleiche die Bindungsenergie E_0 mit der Bandlücke Δ in GaAs mit $\epsilon \approx 15$. ($\Delta = 1.5$ eV, $m_\mathrm{c} = 0.07 m_\mathrm{e}$ und $m_\mathrm{v} = 0.7 m_\mathrm{e}$.)