

Excitó. Una descripció intuïtiva

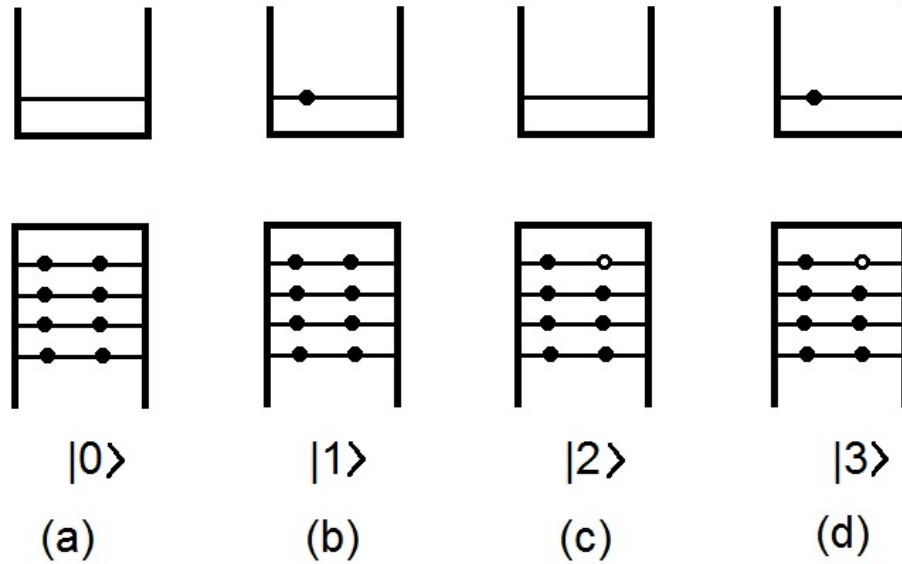
Josep Planelles

5 de juliol de 2016

1 Partícules independents amb interacció Coulòmbica

Un excitó és una parella electró-forat enllaçada per l'atracció de Coulomb entre l'electró amb càrrega negativa i el forat positiu. Trobem però una primera dificultat conceptual: mentre que l'electró és una partícula *real*, el forat és una quasi-partícula (existeix en tant que representa l'absència d'un electró en una banda de valència inicialment ocupada completament).

Per fer una aproximació al concepte d'excitó, considerem un semiconductor confinat, en que les bandes de conducció i valència estan discretitzades i, per tant, electrons i forats estan en estats mono-partícula amb energia superior/inferior al límits superior/inferior de la banda de conducció/valència (veure Fig. 1a). Tanmateix, considerem per simplicitat que l'origen d'energies coincideix amb la d'aquest estat del sistema ($E = 0$), que el representem per $|0\rangle$.



Com s'indica en el títol, amb la finalitat de simplificar, considerarem que un únic determinant de Slater descriu be aquest estat (que equival a considerar una aproximació tipus Hartree-Fock, és a dir, partícules independents amb interacció Coulòmbica). Considerem tot seguit tres nous estats d'aquest sistema. L'estat $|1\rangle$ en que hem afegit un electró e en el fons de la banda de conducció (Fig. 1b), l'estat $|2\rangle$ en que hem arrencat un electró h del cim de la banda de valència (Fig. 1c) i l'estat $|3\rangle$ en que hem fet les dues coses (Fig. 1d). Respecte de l'energia de l'estat de referència $|0\rangle$, les energies d'aquest altres estats són:

$$E_1 = \epsilon_e + \sum_j^{valence} (J_{ej} - K_{ej}) \quad (1)$$

on, $\epsilon_e = \epsilon_e^{(0)} + T_e$, amb T_e l'energia cinètica de l'electró e originada pel confinament.

$$E_2 = - \left(\epsilon_h + \sum_j^{valence} (J_{hj} - K_{hj}) \right) \quad (2)$$

on, $\epsilon_h = \epsilon_h^{(0)} + T_h$, amb T_h l'energia cinètica de l'electró h originada pel confinament. Tanmateix, la suma no inclou la restricció $j \neq h$ perquè $J_{hh} - K_{hh} = 0$.

Fem notar que si el confinament es fa més i més feble, aleshores, $T_e \rightarrow 0$, $T_h \rightarrow 0$ i la suma $E_1 + E_2$ representa l'energia ϵ_{gap} del gap: $E_1 + E_2|_{T \rightarrow 0} = \epsilon_{gap}$.

Finalment tenim E_3 :

$$\begin{aligned} E_3 &= \left(\epsilon_e + \sum_j^{valence} (J_{ej} - K_{ej}) - (J_{eh} - K_{eh}) \right) - \left(\epsilon_h + \sum_j^{valence} (J_{hj} - K_{hj}) \right) \\ &= \epsilon_{gap} + T_e - T_h - (J_{eh} - K_{eh}) \end{aligned} \quad (3)$$

Si considerem ara l'electró h com un forat $\tilde{h}$ ($m < 0$, $q > 0$), aleshores escrivim:

$$E_3 = \epsilon_{gap} + T_e + T_{\tilde{h}} + J_{e\tilde{h}} - K_{e\tilde{h}} \quad (4)$$

Cal tenir addicionalment en compte que, a més del canvi de signe de massa i càrrega, cal canviar també el signe del moment angular, atès que en l'estat de referència $|0\rangle$ tenim que $S = L = J = 0$. Per tant, en arrancar l'electró h queda un sistema de $N - 1$ electrons (que és el sistema real) el qual presenta un moment angular oposat al del forat (per a que la suma siga zero, com correspon a $|0\rangle$ o a la unió de $|2\rangle$ i $|h\rangle$). Per tant, la funció d'ona del forat $\tilde{h}$ ha de tenir un moment angular oposat al de l'electró h , però la mateixa energia.

En absència de camps magnètics sabem que un estat i el seu complex conjugat tenen la mateixa energia (degeneració de Kramers). Tanmateix, sabem[1] que:

$$\psi(j, m)^* = (-1)^{j+m} \psi(j, -m) \quad (5)$$

on j, m representen el números quàntics de moment angular generalitzat.

Per tant, podem considerar que l'excitó és un parell $e - \tilde{h}$ descrit per la funció $\Psi = \psi_e \cdot \psi_{\tilde{h}}$ amb $\psi_{\tilde{h}} = \psi_h^*$. Tanmateix, l'Hamiltonià que permet trobar E_3 el podem escriure:

$$\hat{H} = \epsilon_{gap} + \hat{T}_e + \hat{T}_{\tilde{h}} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{r_{eh}} + \hat{H}_{exch} \quad (6)$$

on $\hat{H}_{exch}$ és l'operador de bescanvi que estabilitza el triplet respecte del singlet.

2 Funció excitònica multideterminantal

Suposem que la funció excitònica no implique únicament una excitació $h_1 \rightarrow e$, si no que per exemple implique també una $h_2 \rightarrow e$, etc., amb una funció $\Psi = c_1 \Psi_{h_1}^e + c_2 \Psi_{h_2}^e + \dots$. Aleshores, l'energia seria $E = |c_1|^2 E_{ex1} + |c_2|^2 E_{ex2} \dots$. Per tant, l'Hamiltonià seria el mateix. Únicament canviaria l'espai de Hilbert on el projectem.

Referències

- [1] A.R. Edmons, Angular Momentum in Quantum Mechanics, p. 29, Princenton University Press, 1985 (first edition 1957).