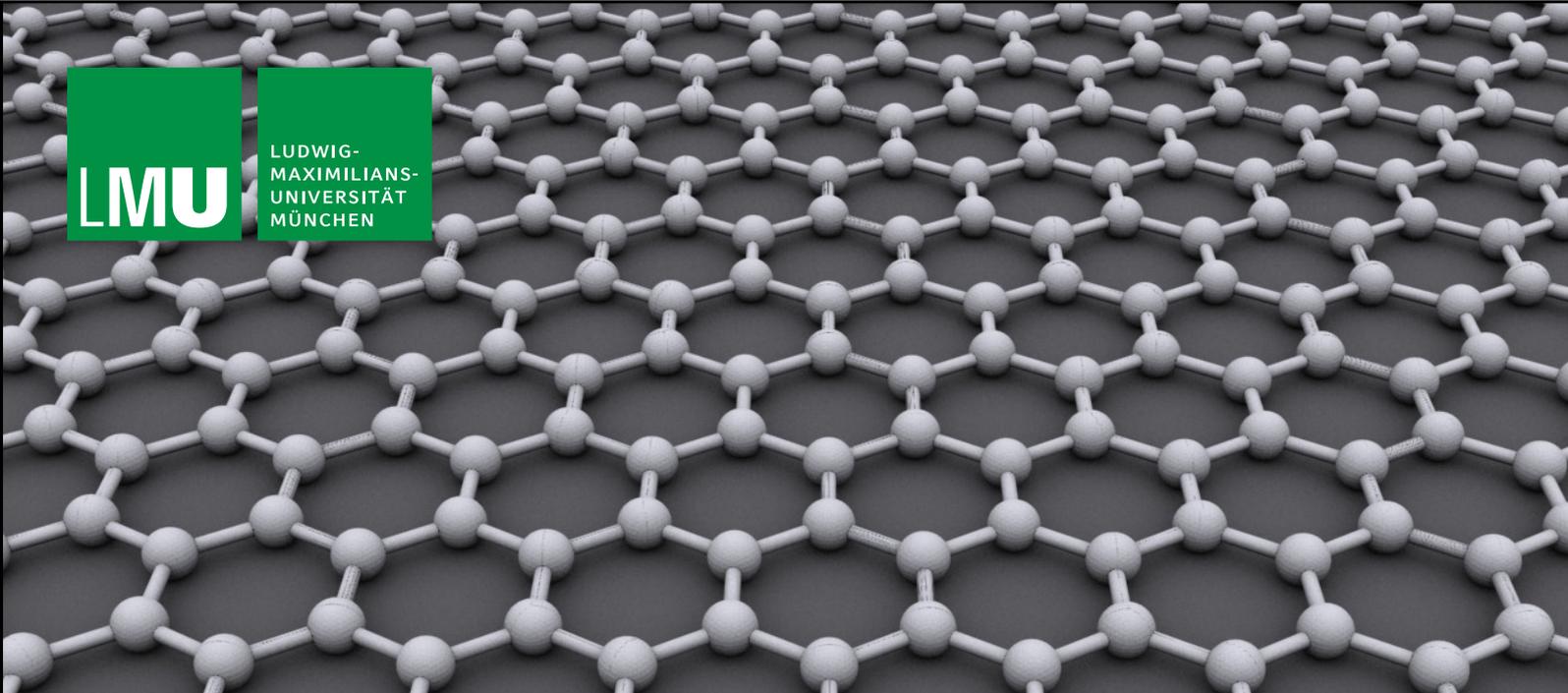




LMU

LUDWIG-
MAXIMILIANS-
UNIVERSITÄT
MÜNCHEN



Moderne Festkörperphysik

für die Schule

Aus der Reihe **FIDS!**- Forschung in die Schule!
Fakultät für Physik der LMU München



Materialien

Wissenschaftliche Hintergründe

Aktivitäten und Aufgaben

Anwendungen in der aktuellen Forschung

Florian Linder
Autor

Dr. Cecilia Scorza
Kordinatorin

Inhalt

1	Emergenz und Quasi-Teilchen	3
2	Elektronen und Löcher im Festkörper	4
3	Exzitonen: halb Teilchen – halb Quasiteilchen	5
3.1	Theoretische Beschreibung von Mott-Wannier-Exzitonen in zweidimensionalen Strukturen.....	6
3.2	Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Exzitonen	10
3.3	Experimentelle spektroskopische Beobachtung von Exzitonen	11
4	Zusammenfassung	15
5	Ausblick	16
	Literaturverzeichnis	17

Das Programm „Forschung in die Schule“ (FIDS!)

Mit unserem Programm „Forschung in die Schule!“ (FIDS!) haben wir uns an der Fakultät für Physik der LMU als Ziel gesetzt, einen anschaulichen und schulgerechten Einblick in die aktuelle Forschung an der LMU-Physik zu ermöglichen, und dadurch die Neugier und den Forschungsdrang unter Schülerinnen und Schülern, sowie ihr Interesse für die Physik zu wecken. Darüber hinaus möchten wir vermitteln, wie verlässliche Erkenntnisse mittels nachprüfbarer Experimente, kritischen Hinterfragens und rationalen Denkens gewonnen werden. Wir laden Lehrkräfte ganz herzlich ein, unsere Materialien im Rahmen von W-Seminaren und Projekttagen umzusetzen!

Autor

Florian Linder (Montessorischule Biberkor)

Koordinatorin

Dr. Cecilia Scorza (LMU München)

Layout und Cover

Christoph Hohmann (LMU München)

Herausgeber & Kontakt

ViSdP: Dr. Cecilia Scorza
 Tel: 089 / 2180 - 6147
 E-Mail: c.scorza@lmu.de

LMU München - Fakultät für Physik
 Schellingstraße 4
 80799 München



Abb.1: Graphen ist ein zweidimensionales Gitter aus Kohlenstoffatomen. Diese ungewöhnliche Struktur generiert interessante makroskopische Eigenschaften. (Quelle: Wikipedia, AlexanderAIUS)

Die Festkörperphysik

Einleitung

Die Festkörperphysik ist ein wunderbares Experimentierlabor, um neue physikalische Welten zu schaffen, zu entdecken und zu verstehen. Seit Jahrzehnten werden neuartige Materialien mit ungeahnten und bemerkenswerten Eigenschaften gefunden und erforscht. Wechselseitig untersuchen Experimentalphysiker neu geschaffene Stoffe – und Theoretiker sagen mit modernen einfallsreichen Modellen ihre Eigenschaften vorher. Man denke hierbei an die Erforschung von Graphen, wofür Andre Geim und Konstantin Novoselov 2010 den Nobelpreis für Physik für erhalten haben. Dieser zweidimensionale Stoff ist einzigartig: er ist ein hervorragender Wärme- und elektrischer Leiter, er ist transparent aber auch so dicht, dass er nicht mal Helium hindurch lässt. Solche zweidimensionalen Strukturen sind ein aktuelles Forschungsfeld der Festkörperphysik, in dem interessante physikalische Phänomene entdeckt und studiert werden.

1 Emergenz und Quasi-Teilchen

Festkörper bestehen im Inneren aus unglaublich vielen kleinen Atomen oder Molekülen. Diese Teilchen sind so klein, dass sie einzeln überhaupt nur schwer zu beobachten sind. Zusammen ergeben sie aber einen Festkörper, der meist so groß ist, dass man ihn mit bloßem Auge sehen oder mit der Hand erfühlen kann. Die Eigenschaften dieses makroskopischen Festkörpers lassen sich durch das Zusammenspiel dieser mikroskopischen Teilchen erklären. Durch die Struktur und Wechselwirkung dieser mikroskopischen Teilchen entstehen makroskopische Eigenschaften des Festkörpers, wie z.B. Wärme- oder elektrische Leitfähigkeit.

Die Herausbildung dieser neuen makroskopischen Eigenschaften aufgrund der mikroskopischen Eigenschaften wird als „Emergenz“ bezeichnet.

Man kann sich diese „Massen-Dynamik“ mikroskopischer Teilchen vielleicht wie bei Tierherden, Vogelschwärmen oder Menschenmassen vorstellen. Auch wenn diese nur aus vielen einzelnen Individuen bestehen, entstehen Gruppendynamiken, die die große Masse in einer bestimmten Art und Weise beeinflussen: Tierherden ziehen gemeinsam in Richtung des besten Futters oder fliehen gemeinsam vor dem Feind, Zugvögel bilden komplexe Formationen, um sich zusammen möglichst energiesparend fortzubewegen oder Fußballfans gröhlen gemeinsam im Stadion das gleiche Lied – man selbst vielleicht eingeschlossen. Solche Gruppendynamiken ergeben sich aus dem Zusammenspiel vieler einzelner Individuen und sie sind nicht das Ergebnis des Willens bzw. der Eigenschaften eines Einzelnen.

So wie bei Tieren oder Menschen neue Phänomene aus der Masse emergieren, Massenpaniken, La-Ola-Wellen oder Schwarmintelligenz entsteht, so entsteht auch im Festkörper

neue makroskopische Eigenschaften: Aus den gekoppelten Schwingungen der einzelnen Teilchen ergeben sich Wärmeleitfähigkeiten, aus der „Bewegung“ der Elektronen elektrische Leitfähigkeiten und aus der Wechselwirkung mit Photonen optische Eigenschaften.

Mit diesen Vielteilchen-Modellen der Festkörperphysiker können aber nicht nur altbekannte makroskopische Eigenschaften beschrieben werden, es können damit auch neue Phänomene vorhergesagt bzw. erklärt werden. Solche Phänomene sind z.B. das Entstehen von Quasiteilchen, also Teilchen, die eigentlich gar keine Teilchen sind. Durch Emergenz entsteht aber etwas im Festkörper, das sich nach den Gesetzen eines Teilchens verhält: es hat eine Masse, eine Ladung, einen Aufenthaltsort oder so etwas wie einen Impuls – es verhält sich also quasi wie ein Teilchen. Dieses Etwas wird als Quasiteilchen bezeichnet. Beispiele für Quasiteilchen sind Phononen: Schwingungsteilchen oder Defektelektronen (meist als „Löcher“ bezeichnet): das sind fehlende Elektronen, die sich wie positive Ladungen verhalten.



Abb. 2: Ein Schwarm von Zugvögeln, der sich für den Flug nach Afrika vorbereitet. Hierfür bilden die Vögel eine makroskopische, energiesparende Formation. (Quelle: F. Linder)

2 Elektronen und Löcher im Festkörper

Um das Entstehen von Löchern genauer zu verstehen, erinnern wir uns kurz an die Bandstruktur im Festkörper:

Die Valenzelektronen sind im Festkörper nicht mehr fest an ihre Atome gebunden, sie können sich in sogenannten Energiebändern befinden. Im Gegensatz zu den Energieniveaus von Atomen halten sich Elektronen in einem kontinuierlichen Energiespektrum auf – wohingegen Elektronen in Atomen nur diskrete Energien annehmen können. Doch zwischen den einzelnen Bändern kann es Energielücken geben, in denen sich keine Elektronen aufhalten dürfen. Bei einem Halbleiter (oder Isolatoren) gibt es eine Energielücke zwischen den Bändern, so dass – ähnlich wie bei Atomen – Elektronen vom Valenzband zum Leitungsband thermisch oder optisch angeregt werden können (s. Abb. 3). Die Energielücke zwischen Valenzband und Leitungsband ist von der Art des Festkörpers abhängig. Sie wird mit E_g (das g steht für das englische „gap“) bezeichnet und hat meist eine Größenordnung von einigen Elektronenvolt (eV).

Betrachten wir nun die Anregung eines Elek-

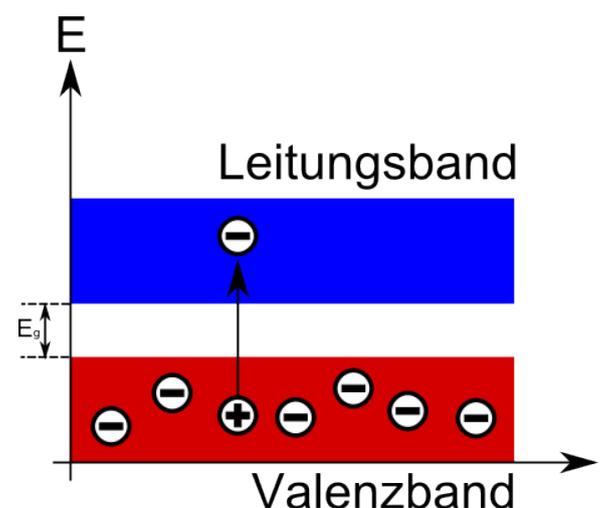


Abb. 3 Bandstruktur im Halbleiter. Durch das energetische Anheben eines Elektrons vom Valenzband ins Leitungsband entsteht ein Defektelektron (Loch) im Valenzband. (Quelle: F. Linder)

trons vom Valenzband ins Leitungsband genauer: Hierbei wird ein Elektron vom vollgefüllten Valenzband in das Leitungsband energetisch angehoben. Einerseits befindet sich nach der Anregung ein Elektron im Leitungsband. Andererseits fehlt dieses Elektron im Valenzband. Diese fehlende negative Ladung verhält sich im Valenzband wie ein positiv geladenes Teilchen: Es hat eine positive Ladung, ihm kann eine Masse zugeordnet werden und es kann sich sogar im Raum bewegen, wenn sich die Nachbarelektronen im Valenzband in die entgegengesetzte Richtung bewegen. Auch kann das Loch mit der Quantentheorie wie ein quantenmechanisches Teilchen beschrieben werden. Somit unterscheidet sich das Loch kaum von einem echten Teilchen: Es ist ein Quasiteilchen entstanden!

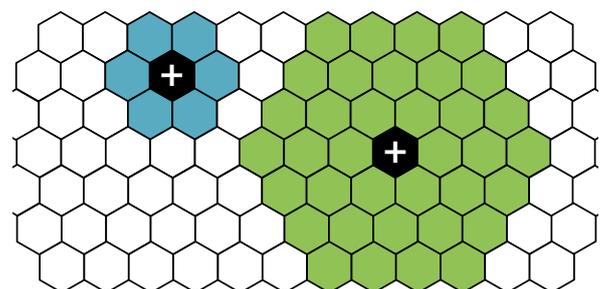
3 Exzitonen: halb Teilchen – halb Quasiteilchen

Nun könnte man meinen, dass dieses Quasiteilchen, dieses Loch, nur eine interessante theoretische Beschreibung ist, die mit der Wirklichkeit nichts zu tun hat. Man könnte doch genauso wieder die Perspektive wechseln und das Quasiteilchen wieder verschwinden lassen, indem man anstatt des Lochs wieder alle anderen Valenzelektronen betrachtet. Aber so einfach lässt sich das Loch nicht wegdiskutieren. Es ist nicht nur eine verrückte Idee der Theoretiker – auch im Experiment können Löcher beobachtet werden. Spinnen wir die theoretische Idee des Lochs als Quasiteilchens noch etwas weiter: Da das Loch eine positive Ladung hat, erzeugt es um sich ein elektrisches Feld und zieht – wie jede andere positive Ladung – negative Ladungen an. Es verhält sich ähnlich wie das Proton, das wohl bekannteste positiv geladene Teilchen. Das Proton kann sich mit dem Elektron zu einem Wasserstoffatom zusammenschließen. Da sich das Loch ähnlich wie ein Proton verhält, muss dieses ebenfalls zusammen mit einem Elektron eine Art Atom bilden können. Auch wenn diese Idee verrückt klingt, können tatsächlich solche atomähnliche Zusammenschlüsse von Löchern und Elektronen experimentell beobachtet werden! Dieser gebundene Zustand von einem Elektron im Leitungsband mit einem Loch im Valenzband wird als Exziton bezeichnet.

Ein Exziton ist also ein Quasiteilchen, das neutral geladen ist: die negative Ladung des Elektrons und die positive Ladung des Lochs gleichen sich aus. Bei Bewegung durch den Festkörper kann folglich keine Ladung, dafür aber seine Anregungsenergie transportiert werden.

Exzitonen treten in unterschiedlichsten Festkörperstrukturen auf. Abhängig von dieser Struktur können Exzitonen stärker an einem Gitterplatz lokalisiert sein (Frenkel-Exziton) oder sich über einen größeren Gitterbereich des Festkörpers delokalisiert ausbreiten (Mott-Wannier-Exziton).

Abb. 4: **Frenkel-Exziton** **Mott-Wannier-Exziton**



3.1 Theoretische Beschreibung von Mott-Wannier-Exzitonen in zweidimensionalen Strukturen

In zweidimensionalen Strukturen spielen Exzitonen eine besonders große Rolle, da im Gegensatz zu dreidimensionalen Festkörpern, hier zwischen Elektron und Loch meist hohe Bindungsenergien – in der Größenordnung eines Elektronenvolts (1 eV) – auftreten. Aufgrund dieser großen Energien existieren Exzitonen bereits bei Raumtemperatur und sind interessant für optoelektronische Anwendungen im Halbleiterbereich.

Die verhältnismäßig große Bindungsenergie von Exzitonen in zweidimensionalen Strukturen kann dadurch erklärt werden, dass Ladungen innerhalb eines dreidimensionalen Festkörpers stärker abgeschirmt werden als in einer zweidimensionalen Schicht. Im dreidimensionalen Festkörper breiten sich alle Feldlinien innerhalb des Festkörpers aus, wohingegen in einer zweidimensionalen Schicht sich ein großer Teil der Feldlinien unabgeschirmt außerhalb des Festkörpers ausbreiten kann (s. Abb. 5).

Bei Mott-Wannier-Exzitonen können die Energieniveaus in einer Näherung ähnlich zu denen des Wasserstoffatoms beschrieben werden:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2}$$

Vergleicht man diese Formel mit den Energieniveaus des Wasserstoffatoms:

$$E_n^{\text{H-Atom}} = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

die aus dem Oberstufenunterricht bekannt ist, ist ein Zusammenhang klar zu erkennen. Doch es gibt Unterschiede:

- Die Elektronmasse m_e ist durch eine reduzierte Masse μ ersetzt,
- das n^2 im Wasserstoffatom wird zu $\left(n - \frac{1}{2}\right)^2$ und
- anstatt der elektrischen Feldkonstante ϵ_0 (auch als Permittivität des Vakuums bekannt), steht die allgemeine Permittivität ϵ eines Dielektrikums.

Diese Unterschiede werden in den nächsten Abschnitten erklärt.

Die reduzierte Masse μ

Die reduzierte Masse μ wird verwendet, da ein Loch viel leichter als der Atomkern eines Wasserstoffatoms ist. Bei einem Wasserstoffatom ist der Atomkern fast 2.000 mal so schwer wie das Elektron. Bei einem Exziton sind die Massen von Loch und Elektron in der gleichen Größenordnung und das Elektron kann an dem Loch mehr „herumzerren“, als an einem schweren Atomkern¹. Die reduzierte Masse ergibt sich aus Elektronmasse m_e und Lochmasse m_h :

$$\mu = \frac{1}{m_e^{-1} + m_h^{-1}}$$

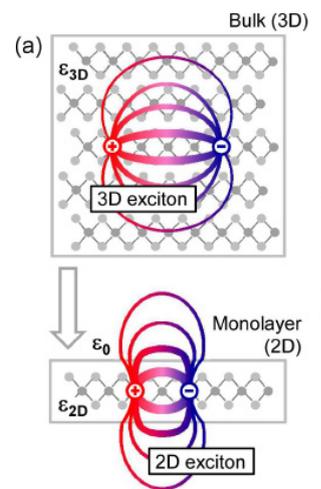


Abb. 5: Exzitonen in 3- und 2-dimensionalen Festkörpern
(Quelle: Chernikov 2014)

¹Eine solche reduzierte Masse tritt z.B. auch bei der Bewegung von zwei ähnlich massereichen Himmelskörpern auf (z.B. bei Mond und Erde oder einem Doppelsternsystem). Die Himmelskörper führen eine Kreisbewegung um einen gemeinsamen Schwerpunkt μ durch, die mithilfe der reduzierten Masse μ beschrieben werden kann.

Aufgabe 1

In einer zweidimensionalen Wolfram-Sulfat WS_2 Schicht beträgt die Lochmasse m_h 19 % der Elektronenmasse m_e .

Bestimmen Sie die reduzierte Masse μ für Exzitonen in zweidimensionalen WS_2 Schichten.

Lösung: $\mu=0,16 m_e$

Die n-Abhängigkeit der Energieniveaus

Die Energieniveaus von Mott-Wannier-Exzitonen sind proportional zu $\frac{1}{(n-\frac{1}{2})^2}$, wohingegen

die Energieniveaus des Wasserstoffatoms proportional zu $\frac{1}{n^2}$ sind. Dieser Unterschied resul-

tiert aus der unterschiedlichen Form der Atomorbitale für das Wasserstoffatom und für Mott-Wannier-Exzitonen.

Beim Wasserstoffatom lässt sich die n-Abhängigkeit der Energieniveaus durch das Bohrsche Atommodell und die Bohrschen Postulate, die in der Schule behandelt werden, relativ anschaulich nachvollziehen. Aber für eine ausführliche und quantenmechanisch korrekte Herleitung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms, muss die Schrödingergleichung gelöst werden. Dies ist eine anspruchsvolle mathematische Aufgabe, die in jeder theoretischen Quantenmechanik-Vorlesung durchgeführt wird.

Aus der quantenmechanischen Beschreibung des Wasserstoffatoms ergibt sich nicht nur die Formel für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms, sondern auch die räumliche Form der Atomorbitale. Diese Atomorbitale, die aus dem Chemieunterricht bekannt sind, sind dreidimensional: z.B. ist das s-Orbital kugelförmig und das p-Orbital hantelförmig.²

Bei Mott-Wannier-Exzitonen in einem zweidimensionalen Festkörper können aber keine dreidimensionalen Orbitale entstehen, da sich Loch und Elektron nur in einer Ebene aufhalten können. Hieraus resultiert nicht nur eine andere, zweidimensionale Form der Orbitale,

sondern auch die $\frac{1}{(n-\frac{1}{2})^2}$ -Abhängigkeit der Energieniveaus von Mott-Wannier-Exzitonen in zwei Dimensionen.³

²Zur Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom: $(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$ wird – aufgrund der sphärischen Symmetrie – der folgende Separationsansatz gewählt: $\Psi(\vec{r}) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$. Für den Winkelanteil ergeben sich die Kugelflächenfunktionen, der Radialteil wird mit den Laguerre-Polynomen beschrieben. Durch diese Funktionen ist die Form der Atomorbitale gegeben.

³Die Schrödingergleichung für ein zweidimensionales Wasserstoffatom hat die gleiche Form wie die des Wasserstoffatoms in drei Dimensionen: $(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$. Im Gegensatz zum „echten“ Wasserstoff können sich aber die Teilchen nur in einer Ebene aufhalten. Aufgrund dieser Zweidimensionalität und der vorliegenden Rotationssymmetrie wird folgender Separationsansatz gewählt: $\Psi(\vec{r}) = R(r) \cdot \Phi(\varphi)$. Die Lösung hiervon sind ebene Orbitale innerhalb des Festkörpers, deren Energieeigenwerte eine $\frac{1}{(n-\frac{1}{2})^2}$ -Abhängigkeit haben (Yang 1991).

Die Permittivität ϵ

Die Permittivität ϵ beschreibt die Abschirmung des elektrischen Feldes von Elektron und Loch durch den Festkörper. Die Abschirmung des elektrischen Feldes funktioniert hier genauso wie bei einem Plattenkondensator, in dem sich ein Dielektrikum befindet. Das Dielektrikum schirmt dabei das elektrische Feld des Plattenkondensators ab.⁴ Bei Exzitonen ist das Dielektrikum der Festkörper selbst, da dieser auch dielektrische Eigenschaften hat. Genauso wie beim Plattenkondensator durchdringt das elektrische Feld von Elektron und Loch das Dielektrikum (den Festkörper) und wird von diesem abgeschirmt. In beiden Fällen wird die Permittivität des Vakuums ϵ_0 durch die Permittivität des Dielektrikums $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ ersetzt, wobei ϵ_r die relative Permittivität, eine Zahl größer 1 ist.

Die n-Abhängigkeit der Permittivität

Es gibt aber noch einen qualitativen Unterschied zwischen Mott-Wannier-Exzitonen im Festkörper und dem Wasserstoffatom. Bei Exzitonen ist die Permittivität ϵ abhängig vom Energieniveau n . Der Grund dafür ist, dass sich der Abstand zwischen Elektron und Loch mit steigendem Energieniveau n vergrößert. Bei größerem Abstand ist in einem zweidimensionalen Festkörper aber die Abschirmung des elektrischen Feldes geringer.

Dies können wir verstehen, wenn wir Abb. 6 betrachten:

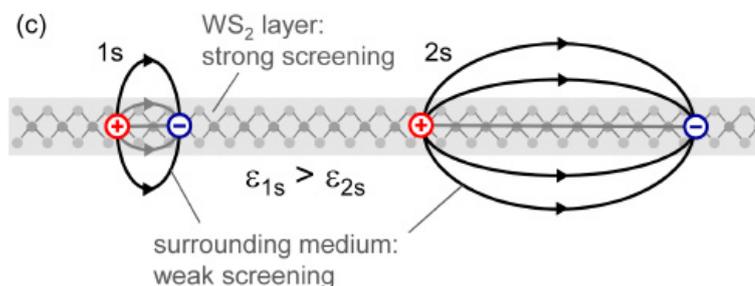


Abb. 6: Schematische Darstellung des Zusammenhangs von Energieniveau und Abschirmung des elektrischen Feldes. Beim 1s Zustand (links) befinden sich Elektron und Loch näher aneinander als beim 2s Zustand (rechts). Beim 1s Zustand verläuft ein größerer Anteil der Feldlinien durch den Festkörper als beim 2s Zustand. Somit findet beim 1s Zustand eine größere Abschirmung des elektrischen Feldes als beim 2s Zustand statt. (Quelle: Chernikov 2014)

Wir sehen, dass sich hier die Feldlinien des elektrischen Feldes teils innerhalb, teils außerhalb des Festkörpers ausbreiten. Abgeschirmt wird aber nur das Feld, das sich innerhalb des Festkörpers ausbreitet. Verändert man nun den Abstand zwischen Loch und Elektron, so verändert sich auch die Abschirmung des elektrischen Feldes. Wenn sich die Ladungen annähern (links), bleiben mehr Feldlinien im Festkörper und die Abschirmung ist groß. Entfernt man beide Ladungen voneinander (rechts), breitet sich ein größerer Teil der Feldlinien außerhalb des Festkörpers aus und es liegt eine geringere Abschirmung vor. Da, wie beim Wasserstoffatom auch, ein höheres Energieniveau mit einem größerem Abstand verbunden ist, ist die Abschirmung des elektrischen Feldes mit steigendem Energieniveau geringer.

⁴Die elektrische Feldstärke E in einem Plattenkondensator mit Plattenfläche A und Ladung Q ist gegeben durch: $E = \frac{Q}{\epsilon_0 A}$. Wird ein Dielektrikum mit relativer Permittivität $\epsilon_r \gg 1$ in diesen Kondensator eingeführt, so reduziert sich die elektrische Feldstärke um den Faktor $\frac{1}{\epsilon_r}$ auf $E = \frac{Q}{\epsilon A} = \frac{Q}{\epsilon_0 \epsilon_r A}$.

Berechnung der Energieniveaus von Mott-Wannier-Exzitonen

Um die Berechnungen für die Energieniveaus von Mott-Wannier-Exzitonen zu vereinfachen, können wir diese – genauso wie beim Wasserstoffatom⁵ – durch die Rydberg-Energie

$$R_y = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$$

ausdrücken:

$$E_n = -R_y \cdot \frac{\frac{\mu}{m_e}}{\epsilon_r^2 \left(n - \frac{1}{2}\right)^2}$$

Aufgabe 2

Zeigen Sie, dass diese Gleichung für die Energieniveaus der Mott-Wannier-Exzitonen (mit der Rydberg-Energie R_y) mit der anfangs gegebenen Gleichung,

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2}, \text{ übereinstimmt.}$$

Aufgabe 3

Die elektrische Abschirmung wird durch die relative Permittivität ϵ_r beschrieben. Für ein Mott-Wannier-Exziton in WS₂ „raten“ wir das ϵ_r so, dass die Abschirmung für kleine n größer ist.

- Bestimmen Sie das erste Energieniveau für $\epsilon_r=5$ in eV.
- Bestimmen Sie das zweite Energieniveau für $\epsilon_r=2,5$ in eV.
- Bestimmen Sie das dritte Energieniveau für $\epsilon_r=2$ in eV.

Lösung: a) $E_1=-0,35$ eV, b) $E_2=-0,15$ eV, c) $E_3=-0,087$ eV

⁵Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms können durch die Rydberg-Energie R_y ausgedrückt werden:

$$E_n^{\text{H-Atom}} = -R_y \cdot \frac{1}{n^2}$$

3.2 Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Exzitonen

Bestrahlt man ein Atom mit Licht, können Elektronen optisch angeregt werden und von einem niedrigen Energieniveau in ein höheres Energieniveau übergehen.

Genauso wie Atome optisch angeregt werden können, können auch Exzitonen im Festkörper durch elektromagnetische Strahlung optisch angeregt werden.

Hierzu betrachten wir die Energieniveaus der Exzitonen mit der Bandstruktur des Festkörpers wie in Abb. 7. Durch die Pfeile sind optische Anregungen von Exzitonen dargestellt, die von der Oberkante des Valenzbandes ausgehen.

Damit ein Exziton entsteht, muss zuerst ein Elektron-Loch-Paar erzeugt werden. Dies bedeutet, dass ein Elektron von der Oberkante des Valenzbandes in das Leitungsband energetisch angehoben wird. Hierfür wird der Energieunterschied der Bandlücke E_g benötigt. Die Anregungsenergien E_n^A setzen sich also aus der Energie der Bandlücke E_g und den Energieniveaus der Exzitonen E_n zusammen:

$$E_n^A = E_g + E_n$$

Die Energieniveaus E_n sind genauso wie die Energieniveaus des Wasserstoffatoms negativ, da es sich um gebundene Zustände handelt. Somit befinden sich die Energieniveaus der Exzitonen im Festkörper zwischen Valenzband und Leitungsband. Diese diskreten, innerhalb der Bandlücke liegenden, Energieniveaus können spektroskopisch beobachtet werden. Bestrahlt man den Festkörper genau mit elektromagnetischer Strahlung, die der Energie E_n^A entspricht, wird diese absorbiert und es entstehen Exzitonen.

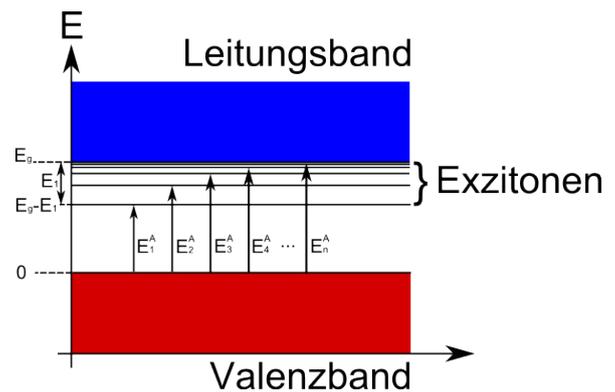


Abb. 7: Optische Anregungen von Exzitonen. Die Anregungsenergien E_n^A setzen sich aus der Energie der Bandlücke E_g , die benötigt wird, um ein Elektron vom Valenzband in das Leitungsband anzuregen, und den Energieniveaus der Exzitonen E_n zusammen. (Quelle: F. Linder)

Aufgabe 4

Bestimmen Sie für die in Aufgabe 3 berechneten Energieniveaus die Anregungsenergie E_n^A sowie die Wellenlänge λ_n der Photonen, die zur jeweiligen Anregung benötigt wird. Die Bandlücke von WS_2 hat eine Energie von: $E_g = 2,41 \text{ eV}$.

Lösung:

a) $E_1^A = 2,06 \text{ eV}$, $\lambda_1 = 602 \text{ nm}$, b) $E_2^A = 2,26 \text{ eV}$, $\lambda_2 = 549 \text{ nm}$, c) $E_3^A = 2,32 \text{ eV}$, $\lambda_3 = 534 \text{ nm}$

3.3 Experimentelle spektroskopische Beobachtung von Exzitonen

Wie bereits erwähnt, ist es möglich Exzitonen experimentell nachzuweisen, indem man die Oberfläche beleuchtet und das reflektierte Licht spektroskopisch untersucht. In Abb. 8 ist ein solcher Versuchsaufbau schematisch dargestellt:

Die Probe befindet sich in einem Kryostat bei einer Temperatur von wenigen Kelvin, um die thermischen Effekte so gering wie möglich zu halten. Das Licht der Lichtquelle wird auf der Probe fokussiert. Das reflektierte Licht wird in das Spektrometer geleitet und dort spektral analysiert. Der Strahlteiler dient dazu, das reflektierte Licht vom einfallenden Licht zu trennen.

Im Folgenden werden experimentelle Daten von zwei verschiedenen zweidimensionalen Schichten (WS_2 und $MoSe_2$) vorgestellt. Beide Stoffe gehören zu den Übergangsmetall-Dichalkogeniden, die meist als TMDCs (engl. „transition metal dichalcogenide“) bezeichnet werden.

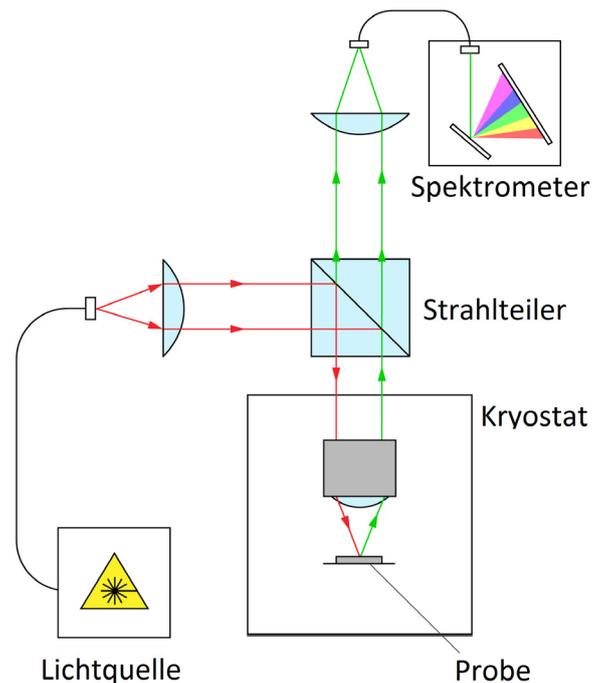


Abb. 8: Vereinfachter experimenteller Aufbau zur Messung von Exzitonen (Quelle: J. Förste, F. Linder)

TMDCs haben sehr ähnliche Eigenschaften und bilden in zweidimensionale Lagen identische hexagonale Gitterstrukturen aus, wie dies in Abb. 9 dargestellt ist.

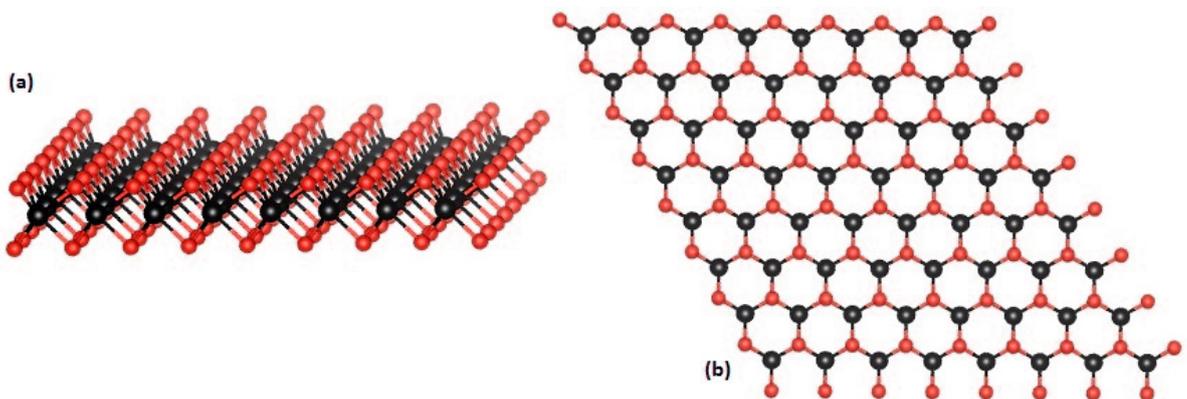


Abb. 9: a) räumliche Struktur einer TMDC Lage b) Aufsicht auf das hexagonale Gitter einer TMDC Lage (Quelle: Wikipedia, Ruben Canton Vitoria)

Diese besondere Struktur von Monolagen-TMDCs hat einerseits zur Folge, dass Exzitonen vergleichsweise hohe Bindungsenergien aufweisen. Eine weitere interessante Eigenschaft dieser Materialien ist eine direkte Bandlücke⁶, die zu einem ausgeprägten optischen Verhalten führt.

⁶Bei einer direkten Bandlücke kann ein Exziton alleine durch Licht angeregt werden. Im Vergleich zu einer indirekten Bandlücke wird bei diesem Übergang kein Quasiimpuls benötigt. Dies bedeutet, dass eine reine Photon-Exziton Wechselwirkung stattfindet und kein Phonon (Schwingungsteilchen) benötigt wird. Dies führt zu einer erhöhten Wechselwirkungswahrscheinlichkeit der Exzitonen mit Photonen.

Wegen dieser beiden Eigenschaften können in diesen Materialien Exzitonen sehr gut beobachtet werden.

Auf der rechten Seite ist ein Foto eines Monolagen-MoSe₂-Kristalls dargestellt.

Der Kristall wurde mit einem Gasphasenabscheidungsverfahren (chemical vapour deposition, CVD) gezüchtet.

Diese atomdünne Schichten wurden mit Klebeband von einem Kristall „abgezogen“ und dann zur spektroskopischen Untersuchung auf ein Substrat aufgebracht.

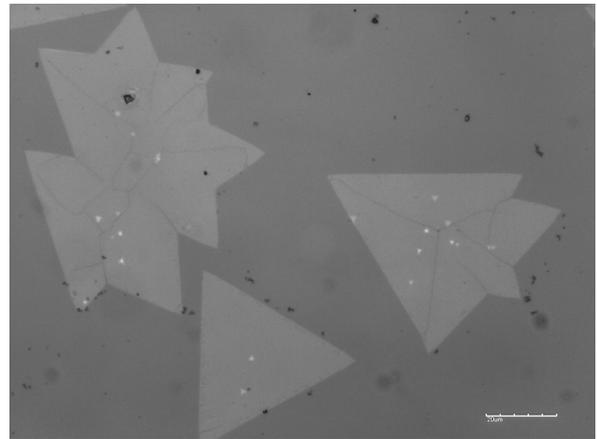


Abb. 10: Foto eines Monolagen-MoSe₂-Kristalls (Quelle: J. Förste)

Spektroskopische Beobachtungen von Exzitonen in zweidimensionalen WS₂-Schichten

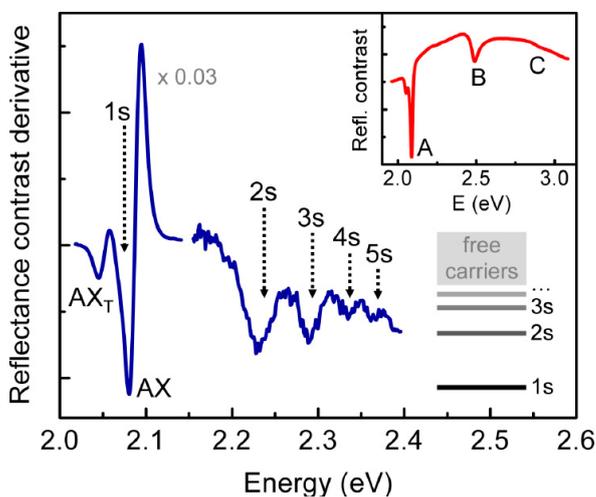


Abb. 11: Reflexionsspektrum eines Monolagen WS₂-Kristalls (rechts oben). Durch Bildung der Ableitung (großes Diagramm), sind Änderungen des Reflexionsspektrums besser zu erkennen. Die Energiezustände der Rhydbergserie der Mott-Wannier-Exzitonen sind mit 1s bis 5s beschriftet (Quelle: Chernikov 2014)

Minima im Reflexionskontrast zeigen die Absorption elektromagnetischer Strahlung der Exzitonen.

In dem großen Diagramm von Abb. 11 wird nur der Typ A im Bereich von 2,0 bis 2,6 eV betrachtet. Damit die Änderung des Reflexionskontrastes $\frac{\Delta R}{R_0}$ besser zu sehen ist, ist hier die Ableitung des Reflexionskontrastes abhängig der Photonenergie angetragen. Mit 1s bis 5s sind die Anregungen von Exzitonen E₁ bis E₅ bezeichnet.

In Abb. 11 sind spektroskopische Messungen der Columbia University (Chernikov 2014) von einer einlagigen WS₂-Schicht dargestellt. Diese Daten wurden bei einer Temperatur von 5 K aufgenommen.

In der rechten oberen Ecke ist in Abhängigkeit der Photonenergie der Reflexionskontrast (engl.: „Reflectance contrast“) dargestellt:

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R - R_0}{R_0}$$

Hierbei ist R₀ die Intensität des „Hintergrunds“ (also die Intensität des reflektierten Lichts des Substrats, auf dem die Probe aufgebracht ist) und R die Intensität des reflektierten Lichts der WS₂-Probe.

Es sind drei Exziton-Typen zu beobachten, diese sind mit A, B und C bezeichnet. Die

Aufgabe 5

- a) Vergleichen Sie die in Aufgabe 4 berechneten Anregungsenergien mit den in Abb. 11 dargestellten Messungen.
 b) Lesen Sie die Anregungsenergien der Exzitonen aus Abb. 11 ab.
 c) Zeigen Sie, dass sich die Permittivität ϵ_r für E_n^A durch die Formel:

$$\epsilon_r = \sqrt{R_y \cdot \frac{\frac{\mu}{m_e}}{(E_g - E_n^A) \left(n - \frac{1}{2}\right)^2}}$$

beschrieben werden kann.

- d) Berechnen Sie für die abgelesenen Anregungsenergien E_1^A bis E_5^A jeweils die Permittivität ϵ_r^n

Lösung:

b) $E_1^A=2,08$ eV, $E_2^A=2,24$ eV, $E_3^A=2,29$ eV, $E_4^A=2,34$ eV, $E_5^A=2,36$ eV

d) $\epsilon_r^1=5,14$, $\epsilon_r^2=2,39$, $\epsilon_r^3=1,70$, $\epsilon_r^4=1,59$, $\epsilon_r^5=1,47$

Spektroskopische Beobachtungen von Exzitonen in zweidimensionalen MoSe₂-Schichten

In Abb. 12 ist das Reflexionsspektrum eines Monolagen-Molybdän-Selenid (MoSe₂)-Kristalls zu sehen. Diese wurde von der Arbeitsgruppe von Prof. Högele der LMU München aufgenommen.

In Abhängigkeit der Photonenenergie ist der Reflexionskontrast der MoSe₂-Schicht dargestellt:

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R - R_0}{R_0}$$

Es ist zu erkennen, dass bei einer Photonenenergie von 1,638 eV ein Großteil der Energie des eingestrahnten Lichts von der MoSe₂-Probe absorbiert wird, bei einer Photonenenergie von 1,789 eV ist ebenfalls eine Absorption zu erkennen. Diese beiden Absorptionslinien zeigen die 1s und 2s Anregung von Exzitonen des Typs A⁷ in der MoSe₂-Schicht.

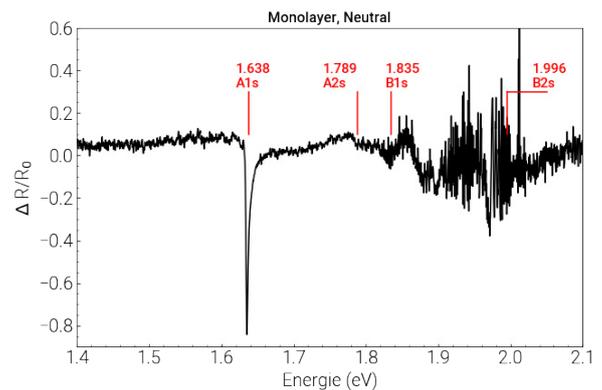


Abb. 12: Reflexionsspektrum eines Monolagen-MoSe₂-Kristalls. Es ist der 1s und der 2s Zustand zu erkennen. (Messdaten der Arbeitsgruppe von Prof. Högele, LMU München)

⁷Zur Vereinfachung werden hier auch nur die Exzitonen vom Typ A betrachtet. Die Exzitonen vom Typ B, die ebenfalls in Abb. 12 zu sehen sind, werden hier, genauso wie bei WS₂-Daten des vorherigen Abschnitts nicht behandelt.

Aufgabe 6

Die Energieniveaus von Exzitonen können verwendet werden, um die Energien der Bandlücken zu ermitteln. In dieser Aufgabe möchten wir aus den experimentellen Daten von Abb. 12 die Bandlücke E_g für MoSe_2 bestimmen.

Aufgrund der ähnlichen räumlichen Struktur der TMDCs und der damit verbundenen ähnlichen Form der Atomorbitale nehmen wir in dieser Aufgabe an, dass sich die relative Permittivität und die reduzierte Masse des Exzitons⁸ bei MoSe_2 und WS_2 gleich verhält.

Bestimmen Sie mit den beiden gemessenen Anregungsenergien von MoSe_2 , der reduzierten Masse μ von WS_2 sowie den in Aufgabe 5 ermittelten relativen Permittivitäten ϵ_r von WS_2 die Energie der Bandlücke.

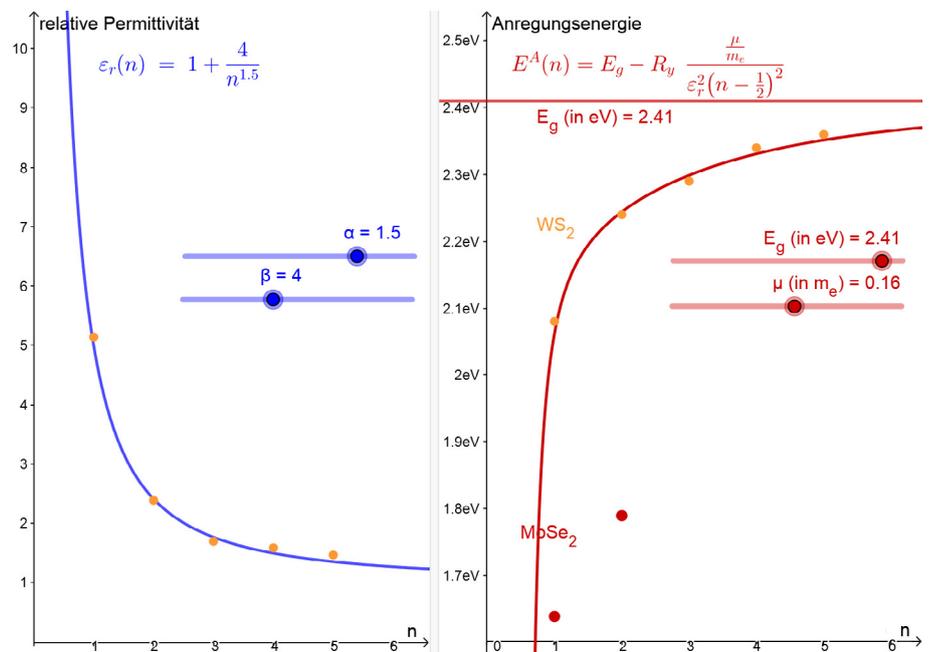
Lösung: $E_g \approx (1,96 \pm 1) \text{ eV}$

Simulation 1

Starten Sie die Simulation: <https://www.geogebra.org/m/x9rte5he>

- 1) Ermitteln Sie die Energie der Bandlücke E_g sowie die reduzierte Masse μ für Exzitonen in Monolagen- MoSe_2 unter der Annahme, dass hier die gleiche n -Abhängigkeit der relativen Permittivität ϵ_r wie bei WS_2 vorliegt.
- 2) Untersuchen Sie, inwieweit der Verlauf der relativen Permittivität ϵ_r das Ergebnis für den in 1) bestimmten Wert der Energie der Bandlücke E_g verändert.

Abb. 13: Simulation zur Bestimmung der Bandlückenenergie von MoSe_2



⁸Für eine genauere Abschätzung könnte die reduzierte Masse des Exzitons beispielsweise durch Berechnungen mit der Dichte-Funktional-Theorie bestimmt werden.

4 Zusammenfassung

Die Festkörperphysik mag manchmal den Anschein haben, ein sehr trockenes Stück der Physik zu sein: Die Methoden der Vielteilchen-Quantenfeldtheorien, mit denen Festkörperphänomene theoretisch beschrieben werden, sind so kompliziert, dass sich nur wenige Physikstudenten in ihrem Studium damit beschäftigen. Auch die Labore, in denen die Festkörperphysik erforscht wird, haben auf manchen Studenten auf den ersten Blick eine ähnlich abschreckende Wirkung: Hier gehen vor lauter brummenden Geräten, Schläuchen und Kabeln die mikroskopischen Proben, um die es eigentlich geht, buchstäblich unter.

Wenn man aber tiefer in die Theorie und in die Labore eintaucht, entdeckt man eine außergewöhnlich bunte und abwechslungsreiche physikalische Welt, in die wir in diesem Kapitel einen kleinen Einblick gewonnen haben. Wir haben gesehen, dass es im Festkörper sehr interessante „Massenerscheinungen“ gibt, die als Emergenz bezeichnet werden. Hier entstehen durch kollektives Verhalten einzelner Teilchen - wie Atomkerne oder Elektronen - ganz neue Phänomene. Manche dieser Phänomene verhalten sich wie eigene Teilchen und werden deswegen als Quasiteilchen bezeichnet. In diesem Kapitel haben wir uns mit einem solchen Quasiteilchen, dem Exziton, beschäftigt und haben es in den Messdaten von zwei unterschiedlichen Laboren tatsächlich „gesehen“!

Aber die Festkörperphysik ist mehr als ein Baukasten aus bunten Legosteinen, sie ist mehr als nur ein Spielfeld von Theoretikern und Experimentalphysikern. Hier werden die Grundlagen modernster Technik erforscht: Aus den Laboren der Festkörperphysik stammt die aktuellste Halbleitertechnik, die in Hochleistungssolarzellen, mikroskopischen Computerchips, Halbleiterlasern oder Quantencomputern steckt.

Auch die Monolagen-Übergangsmetall-Dichalcogenide (TMDCs), die wir uns in diesem Kapitel genauer unter die Lupe genommen haben, haben großes Potential in der Elektronik von morgen verbaut zu werden. Wie wir in diesem Kapitel gesehen haben, existieren in Monolagen-TMDCs Exzitonen bereits bei Raumtemperatur. Außerdem wechselwirken diese Stoffe viel stärker mit Licht, als die meisten anderen Festkörper, da sie eine direkte Bandlücke aufweisen. Diese Eigenschaften machen aus TMDCs aussichtsreiche Kandidaten für innovative opto-elektronische Anwendungen.

Eine weitere interessante Eigenschaft von TMDCs ist, dass sie in wahrstem Sinne des Wortes „Atom-dünn“ und quasi transparent sind. Mit Monolagen-TMDCs könnte man flexible transparente Elektronik entwickeln, die auf Oberflächen wie Fenstern oder sogar Kleidungsstücken aufgebracht werden könnte.

Bevor wir an dieser Stelle von der Technik der Zukunft träumen, geben wir im nächsten Abschnitt noch einen kleinen Einblick in moderne Experimente mit TMDCs, die auf eine weitere vielseitig einsetzbare Verwendung dieser Materialien hinweisen.

5 Ausblick

Aus zwei Schichten von Monolagen-TMDCs werden heutzutage in modernen Laboren innovative Materialien geschaffen und untersucht (Tartakovskii 2020). Die Idee, die hinter diesen neuen Materialien steckt, ist der Moiré-Effekt: Bringt man zwei identische Gitter, in diesem Fall hexagonale, übereinander und verdreht sie ein wenig, entsteht eine neue Gitterstruktur, ein „Übergitter“. In Abb. 13 ist dieses Phänomen dargestellt.

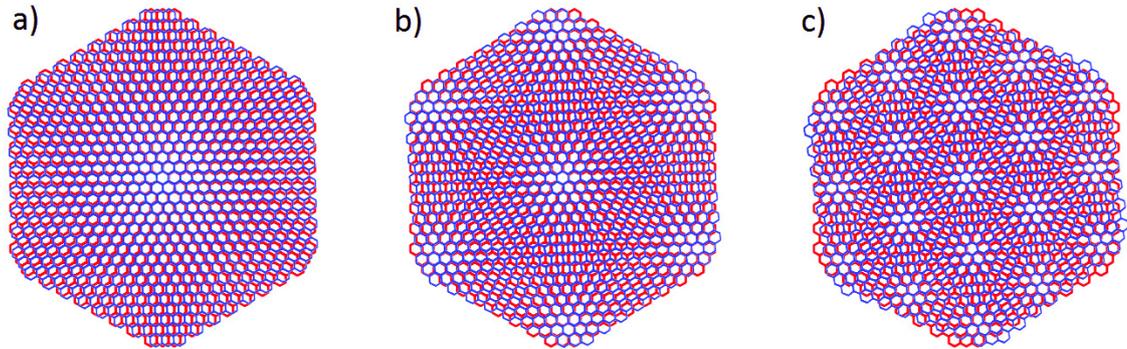


Abb. 13: Moiré-Effekt bei zwei hexagonalen Gittern mit verschiedenen Rotationswinkeln: a) $1,8^\circ$ b) $4,0^\circ$ c) $9,0^\circ$ (Quelle: F. Linder)

Simulation 2

Öffnen Sie die Simulation: <https://www.geogebra.org/m/ssp2vkyc>

Variieren Sie den Rotationswinkel zwischen den beiden hexagonalen Gittern und beobachten Sie die Veränderung der Struktur des „Übergitters“.

Bringt man also zwei Monolagen-TMDC Schichten mit einem bestimmten Winkel in Kontakt, erzeugt man künstlich neue Gitterstrukturen zwischen den beiden Lagen. Wie man in Abb. 13 bzw. Simulation 2 sieht, kann durch Variation des Rotationswinkels die Gitterkonstante des Übergitters eingestellt werden.

Nun beobachtet man, dass sich zwischen den Lagen innerhalb des Übergitters neue Exzitonen bilden – sogenannte Interlayer-Exzitonen – deren Verhalten durch den Winkel zwischen den beiden Schichten verändert werden kann. Durch diese Methode hat man ein Werkzeug geschaffen, gezielt Materialien mit bestimmten Qualitäten zu schaffen. Interlayer-Exzitonen haben aber noch eine ganz andere entscheidende Eigenschaft: Da sich hier Loch und Elektron räumlich getrennt in den beiden Schichten aufhalten, bilden sie ein permanentes Dipolmoment aus. Über das Dipolmoment kann ein Exziton nun mit verschiedenen äußeren Parametern, wie einer Gatterspannung oder von außen angelegten elektrischen und magnetischen Feldern wechselwirken. Dies macht diese Materialien besonders interessant für elektrische Bauteile.

An der aktuellen Front der Forschung werden derzeit die opto-elektronischen Eigenschaften dieser innovativen Materialien untersucht (Förg & Colombier 2019).

Literaturverzeichnis

(Chernikov 2014)	Chernikov, Alexey and Berkelbach, Timothy C. and Hill, Heather M. and Rigosi, Albert and Li, Yilei and Aslan, Ozgur Burak and Reichman, David R. and Hybertsen, Mark S. and Heinz, Tony F. (2014): Exciton Binding Energy and Nonhydrogenic Rydberg Series in Monolayer WS ₂ . In: Phys. Rev. Lett., vol. 113, issue 7
(Yang 1991)	Yang, X. & Guo, S. & Chan, Franky & Wong, Kai Wing & Ching, Wai-Yim. (1991): Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory. In: Physical review. A. 43. 1186-1196.
(Tartakovskii 2020)	Tartakovskii, A. (2020): Excitons in 2D heterostructures. In: Nat Rev Phys 2, 8–9
(Förg & Colombier 2019)	Förg, M., Colombier, L. et al. (2019): Cavity-control of interlayer excitons in van der Waals heterostructures. In: Nat Commun 10, 3697