Kapitel 1

Einleitung und Motivation

Der direkte Halbleiter Cu_2O (Kuprit, Kupferoxydul) ist eines *der* klassischen Materialsysteme zur Untersuchung von Exzitonen. Kaum ein anderer Halbleiter zeigt eine derart ausgeprägte wasserstoffähnliche Serie wie die np-Exzitonen[1] der so genannten gelben Serie in Cu_2O [1]. Gerade diese Exzitonenserie, die in perfekter Weise die vom Wasserstoffatom bekannte $1/n^2$ Abhängigkeit der Bindungsenergie erfüllt, unterstreicht eindrucksvoll die quantenmechanische Analogie zwischen Exzitonen und Atomen: Exzitonen können als gebundener Zustand von Elektron und Loch zumindest bei niedrigen Dichten als elementare Anregung von Halbleitern aufgefasst werden.
Das Exzitonensystem in Cu_2O weist aber noch weitere Besonderheiten auf: die Bindungsenergie des 1s-Grundzustands ist mit ca. 150meV außergewöhnlich hoch, sodass die 1s-Exzitonen selbst bei Raumtemperatur noch stabil gegen thermische Dissoziation sind. Weiterhin spaltet das 1s-Exziton durch Austauschwechselwirkung in einen 1s-Ortho- ($S = 1$) und einen 1s-Para-Zustand ($S = 0$) auf, dessen Energie etwa 12meV unter derjenigen des 1s-Orthoexzitons liegt. Da Leitungs- und Valenzband die gleiche Parität besitzen und die Parität wegen der inversionssymmetrischen Kristallstruktur von Cu_2O eine gute Quantenzahl ist, handelt es sich ferner um eine dipolverbotene Bandlücke. Aus diesem Grund besitzt insbesondere das 1s-Paraexziton eine besonders lange Lebensdauer. An dieser Stelle würde man nun in der Einleitung einer wissenschaftlichen Arbeit eine Angabe der entsprechenden Lebensdauer erwarten, die zumindest auf eine Größenordnung genau sein sollte. Tatsächlich kann aber eine solche Angabe nicht annähernd in dieser Genauigkeit gemacht werden: obwohl die exzitonischen Eigenschaften von Cu_2O seit nunmehr einem halben Jahrhundert sowohl experimentell als auch theoretisch untersucht werden [2], sind weiterhin einige grundlegende Fragen offen. Eine dieser offenen Fragen ist die Le-

[1] n:Hauptquantenzahl; p: Drehimpulsquantenzahl $\ell = 1$

bensdauer des 1s-Paraexzitons: seine direkte optische Rekombination ist in allen Ordnungen der Störungstheorie verboten. Es existiert lediglich eine extrem schwache, phononenassistierte Emissionslinie, deren Abklingzeit nicht zuverlässig genug bestimmt werden kann. Aus diesem Grund finden sich in der Literatur zur Lebensdauer des 1s-Paraexzitons Angaben zwischen 10ns [3, 4] und 3ms [5], die über einen Bereich von fast sechs Größenordnungen skalieren.
Die Frage ob Exzitonen auch bei hohen Teilchendichten ihren bosonischen Charakter beibehalten und das quantenstatistische Phänomen der Bose-Einstein Kondensation (BEC) auch an exzitonischen Systemen beobachtet werden kann, kam von theoretischer Seite bereits in den sechziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts auf [6]. Als möglicher Kandidat für diesen Effekt wurde neben CuCl [7] auch früh Cu_2O ausgemacht [8]: die 1s-Exzitonen in Cu_2O weisen einen sehr kleinen Bohr-Radius von $a_{1s} \approx 0.53$nm auf [9], weshalb der Übergang zu einem fermionischen Elektron-Loch Plasma erst bei einer so genannten Mott-Dichte von ca. $10^{21}/\mathrm{cm}^3$ auftreten sollte. Vor allem das 1s-Paraexziton in Cu_2O wurde (und wird) als besonders aussichtsreicher Kandidat für die BEC gehandelt: weil dieser Zustand weder direkt optisch erzeugt noch vernichtet werden kann, weist er keinen Polariton-Effekt auf, der eine Kondensation in den Grundzustand bei $k = 0$ verhindern könnte. Im Verlauf der letzten ca. 25 Jahre wurden viele experimentelle Anläufe unternommen die BEC von Exzitonen in Cu_2O nachzuweisen [10, 11], die Ergebnisse waren aber umstritten und sind bis heute nicht allgemein anerkannt. Als Hauptgrund für diesen Umstand muss vor allem die extrem schwierige experimentelle Nachweisbarkeit des 1s-Paraexzitons angeführt werden.
Die vorliegende Arbeit befasst sich zwar nicht mit Hochdichteeffekten, hat aber dennoch einen gewissen Bezug zu der angedeuteten Kontroverse über eine mögliche BEC von Exzitonen in Cu_2O. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt auf der theoretischen und experimentellen Untersuchung von intraexzitonischen 1s$\rightarrow$ np Übergängen in Cu_2O bei moderaten Exzitonendichten der Größenordnung $10^{14}/\mathrm{cm}^3$. Vor dem Hintergrund der eingangs angesprochenen quantenmechanischen Analogie zwischen Exzitonen und Atomen lässt sich diese etwas kompliziert klingende Thematik sehr einfach umschreiben: es handelt sich um das exzitonische Analogon der Übergänge der Lyman-Serie, die aus der Atomphysik wohlbekannt sind. Experimentell ist die Untersuchung dieser Übergänge aber ungleich schwieriger: die Übergangsenergien liegen im mittleren bis fernen infraroten Spektralbereich. Weiterhin müssen die Exzitonen zunächst durch Laseranregung erzeugt werden, damit in einem so genannten Anregungs-Abfrage-Experiment die induzierte Absorption ermittelt werden kann. Die Möglichkeit, dass derartige Übergänge auch bei Exzitonen beobachtbar sein sollten, wurde von Haken [12] bereits 1958 in Betracht gezogen. Dennoch dauerte es ca. 20 Jahre bis die messtechnische Entwicklung so weit vorangeschritten war, dass solche Übergänge auch experimentell nachgewiesen werden konnten. Es ist nicht verwunderlich, dass die ersten intraexzitonischen 1s$\rightarrow$2p Übergänge an den indirekten

Halbleitern Germanium [13] und Silizium [14] beobachtet wurden: wegen der relativ langen Lebensdauern der Exzitonen in indirekten Halbleitern können in diesen Materialsystemen bereits mit moderater Laseranregung hinreichend hohe Exzitonendichten erzeugt werden, die eine messbare induzierte Absorption verursachen.
Im Fall von Cu_2O besteht nun ein besonderes Interesse an intraexzitonischen Übergängen der Art 1s$\rightarrow n$p, weil sie den Auswahlregeln zufolge auch für 1s-Paraexzitonen dipolerlaubt sein sollten. Zusätzlich motiviert wird dieses Interesse durch einen Umstand, der Cu_2O eine weitere Sonderstellung einräumt: da die effektive Masse der 1s-Exzitonen größer als diejenige der np-Exzitonen ist, sollte die Linienform der induzierten 1s$\rightarrow n$p Absorption auch einen Einblick in die energetische Verteilung des Anfangszustands, also des 1s-Para- oder 1s-Orthoexzitons gewähren. An dieser Stelle schließt sich nun der Kreis: in dieser Arbeit wird gezeigt, dass bereits bei moderaten Exzitonendichten intraexzitonische Übergänge des 1s-Paraexzitons in Cu_2O beobachtet werden können. Da zu erwarten ist, dass das induzierte Absorptionssignal für höhere Exzitonendichten noch deutlich zunimmt, bieten derartige Messungen einen neuen experimentellen Zugang, sowohl die Dichte als auch die energetische Verteilung von 1s-Paraexzitonen in Cu_2O zu bestimmen und die Frage nach exzitonischer BEC, zumindest in Cu_2O, endgültig zu beantworten [15].

Gliederung der Arbeit

In den Kapiteln 2 und 3 werden zunächst die grundlegenden Eigenschaften des Materialsystems Cu_2O zusammengefasst und aus Messungen der linearen Absorption und Photolumineszenz Daten gewonnen, die für den weiteren Verlauf der Arbeit von Bedeutung sind. Kapitel 4 wird sich mit den experimentellen Methoden, insbesondere mit der verwendete Kombination aus Fourier- und Anregungs-Abfrage-Spektroskopie sowie den speziellen Anforderungen an die Tieftemperaturtechnik befassen.
Cu_2O weist in dem Spektralbereich, der für die Untersuchung der intraexzitonischen Übergänge relevant ist, bereits mehrere Absorptionsstrukturen auf. In Kapitel 5 wird die Ursache dieser Absorptionsbanden vor dem Hintergrund von Phononprozessen höherer Ordnung, sowie deren möglicher Einfluss auf das Anregungs-Abfrage-Experiment diskutiert.
Die theoretischen Grundlagen, die zur Auswertung und Interpretation der intraexzitonischen Übergänge notwendig sind, werden in Kapitel 6 erarbeitet. Nach eher grundsätzlichen Betrachtungen bezüglich der Auswahlregeln werden zwei wichtige Punkte detailliert geklärt:

1. Es wird gezeigt, wie man aus dem Absolutwert der induzierten 1s$\rightarrow n$p Absorption eine Abschätzung der 1s-Exzitonendichte erhält.

2. Die theoretische Linienform der Übergänge und deren Abhängigkeit von Parametern wie der Probentemperatur, der effektiven Exzitonenmasse und der homogenen Verbreiterung wird abgeleitet und diskutiert.

In Kapitel 7 werden schließlich die Ergebnisse des Anregungs-Abfrage-Experiments in Form der intraexzitonischen Übergänge präsentiert und mit den theoretischen Vorhersagen verglichen. Um weitere Informationen zu erhalten wird die induzierte Absorption als Funktion von Temperatur, Anregungsintensität sowie Anregungswellenlänge untersucht. Unter Verwendung der zuvor abgeleiteten theoretischen Zusammenhänge wird außerdem die Lebensdauer des 1s-Paraexzitons abgeschätzt. Zum Abschluss werden in Kapitel 8 die wichtigsten Ergebnisse der Arbeit nochmals zusammengefasst. Im Sinne eines Ausblicks werden schließlich noch weiterführende Experimente vorgeschlagen.

Kapitel 2

Cu_2O : Grundlegende Eigenschaften

In diesem Kapitel wird ein Überblick des Materialsystems Cu_2O bezüglich seiner Kristallstruktur, fundamentaler Gitterschwingungen und der exzitonischen Eigenschaften gegeben. Ein besonderes Augenmerk wird auf die damit einhergehenden linearen optischen Eigenschaften gelegt. Im Fall der exzitonischen Eigenschaften werden aus den Spektren der linearen Absorption bereits einige Parameter extrahiert, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit von Bedeutung sein werden.

2.1 Kristallstruktur

Die Kristallstruktur von Cu_2O stellt man sich am besten zerlegt in zwei Teilgitter vor: ein kubisch raumzentriertes (bcc) Gitter, das mit Sauerstoffatomen besetzt ist und ein mit Kupferatomen besetztes, kubisch flächenzentriertes (fcc) Gitter[1], das bezüglich des ersten Teilgitters um 1/4 der Raumdiagonalen verschoben ist (Abb. 2.1). Das Gitter von Cu_2O gehört zur Punktgruppe O_h, deren Elemente unter anderem Inversionssymmetrie besitzen. Damit ist die Parität in Cu_2O eine gute Quantenzahl: die elektronischen, exzitonischen und phononischen Zustände besitzen eine definierte Parität, weshalb bei optischen Übergängen die Paritätsauswahlregeln erfüllt sein müssen. Die gemeinsame Gitterkonstante der kubischen Teilgitter beträgt $a_l \approx 4.27\mathring{A}$ [17]. Wie aus experimentell ermittelten Elektronendichteverteilungen bekannt ist [18], haben die Bindungen in Cu_2O zumindest teilweise ionischen Charakter.

[1] (bcc)=body centered cubic; (fcc)=face centered cubic

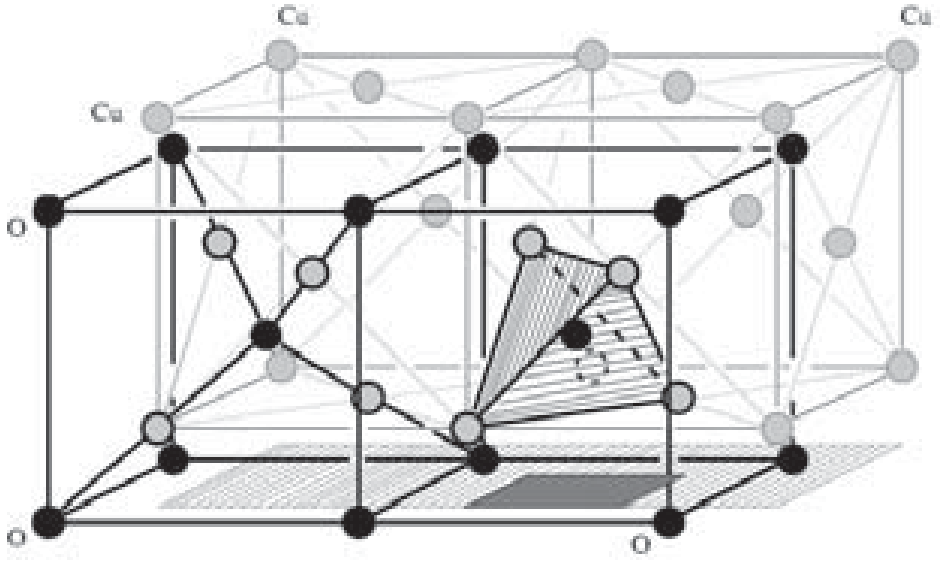

Abbildung 2.1: Kristallstruktur von Cu_2O: Jedes Sauerstoffatom sitzt im Zentrum eines mit Kupferatomen besetzten Tetraeders und das Gitter besitzt Inversionssymmetrie [16].

2.2 Phononen

Da die Einheitszelle zwei Formeleinheiten, also $N = 6$ Atome enthält, existieren in Cu_2O neben 3 akustischen auch $3 \cdot (N - 1) = 15$ optische Phononenzweige. Am Γ-Punkt ($\vec{k} = 0$) reduziert sich deren Anzahl auf Grund von Entartung allerdings auf acht. In Tabelle 2.1 sind die optischen Phononmoden von Cu_2O am Γ-Punkt zusammengestellt [19, 20, 21, 22]. Vor allem bei den höheren Phononenergien variieren die Literaturangaben erheblich. Der Hauptgrund hierfür ist wohl in der unterschiedlichen Herkunft und Qualität der Proben zu suchen.
Ebenfalls in Tabelle 2.1 aufgeführt sind die möglichen experimentellen Nachweismethoden. Mit inelastischer Neutronenstreuung lassen sich prinzipiell alle optischen Phononmoden nachweisen. Insbesondere lässt sich mit dieser Technik auch die Dispersion der Zweige im gesamten $\vec{k}-$Raum vermessen [23]. Eine weitere experimentelle Nachweismethode für optische Phononen ist die so genannte Raman-Spektroskopie: hierbei handelt es sich[2] um inelastische Streuung von Licht an optischen Phononen. In einem idealen Cu_2O-Kristall ist lediglich das optische Phonon Γ_{25}^{+} Raman-aktiv[21]. Ein realer Cu_2O-Kristall enthält allerdings *immer* Störstellen, hauptsächlich in Form von Cu-Fehlstellen und O-Fehlstellen. Die Cu-Fehlstellen fungieren in Cu_2O als Akzeptorzustände [24]: je nach Quelle findet man in der Literatur

[2] auf eine eingehendere Beschreibung soll hier verzichtet werden

Symmetrie	E/meV	Nachweis
Γ_{25}^{-}	11.0 ± 0.5	(R),(L),N
Γ_{12}^{-}	13.4 ± 0.5	(R),L,N
$\Gamma_{15}^{-(1)}$(TO)	18.6 ± 0.5	(R),(L),IR,N
$\Gamma_{15}^{-(1)}$(LO)	18.8 ± 0.5	(R),(L),N
Γ_{2}^{-}	42 ± 1	(R),(L),N
Γ_{25}^{+}	64 ± 2	R,N
$\Gamma_{15}^{-(2)}$(TO)	77 ± 5	(R),L,N,IR
$\Gamma_{15}^{-(2)}$(LO)	80 ± 5	(R),L,N

Tabelle 2.1: Optische Phononen in Cu_2O am Γ-Punkt bei $T \approx 10$K [19, 20, 21, 22]. In der rechten Spalte sind die verschiedenen experimentellen Nachweismethoden aufgeführt. Dabei bedeuten: R=Raman-aktiv, L=exzitonische Lumineszenz (Phononreplica), IR=infrarotaktiv, N=inelastische Neutronenstreuung. Eingeklammerte Buchstaben weisen auf eine schwache Intensität des entsprechenden Signals hin. Die hochgestellten Indizes $^{(1)}$ und $^{(2)}$ dienen der Unterscheidung von Phononmoden gleicher Symmetrie.

Akzeptordichten im Bereich $N_A = 10^{14} - 10^{18}/\text{cm}^3$ [25, 26, 27, 28]. Die O-Fehlstellen wirken hingegen als Donatorzustände mit einer Dichte $N_D < N_A$ da Cu_2O intrinsisch p-leitend ist. Wegen dieser Abweichung von der idealen Kristallstruktur und der einhergehenden "Aufweichung" der Auswahlregeln, sind auch alle anderen optischen Phononen am Zonenzentrum schwach Raman-aktiv [21].

In Cu_2O gibt es zwei infrarotaktive transversale Fundamentalmoden: $\Gamma_{15}^{-(1)}$(TO) und $\Gamma_{15}^{-(2)}$(TO) [29]. Daher lässt sich in Reflexionsspektroskopie die Ausbildung zweier so genannter Reststrahlbanden beobachten, deren Breite gerade der Aufspaltung zwischen der entsprechenden longitudinalen (LO) und transversalen (TO) Mode entspricht. Auch die Existenz dieser Reststrahlbanden impliziert, dass die Bindungen in Cu_2O ionische Anteile haben müssen, da nur so ein schwingungsbegleitendes Dipolmoment entstehen kann, das die Kopplung der transversalen optischen Phononen ans elektromagnetische Feld überhaupt erst ermöglicht.

In Abbildung 2.2 sind Reflexionsspektren aus [20] im Bereich der beiden Reststrahlbanden für verschiedene Temperaturen dargestellt. In der harmonischen Näherung gibt es keine Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Gitterschwingungsmoden des Kristalls. In dieser Näherung kann ein erzeugtes Phonon nicht in andere, niederenergetischere Phononen zerfallen und das Reflexionsvermögen müsste im Bereich der Reststrahlbanden auf 100% ansteigen. Tatsächlich enthält ein reales Kristallpotential aber immer Anharmonizitäten und das Reflexionsvermögen liegt auch innerhalb der Reststrahlbanden unterhalb von 100%. Die bei zunehmender Temperatur beobachtete Rotverschiebung der phononischen Eigenfrequenzen, folgt in

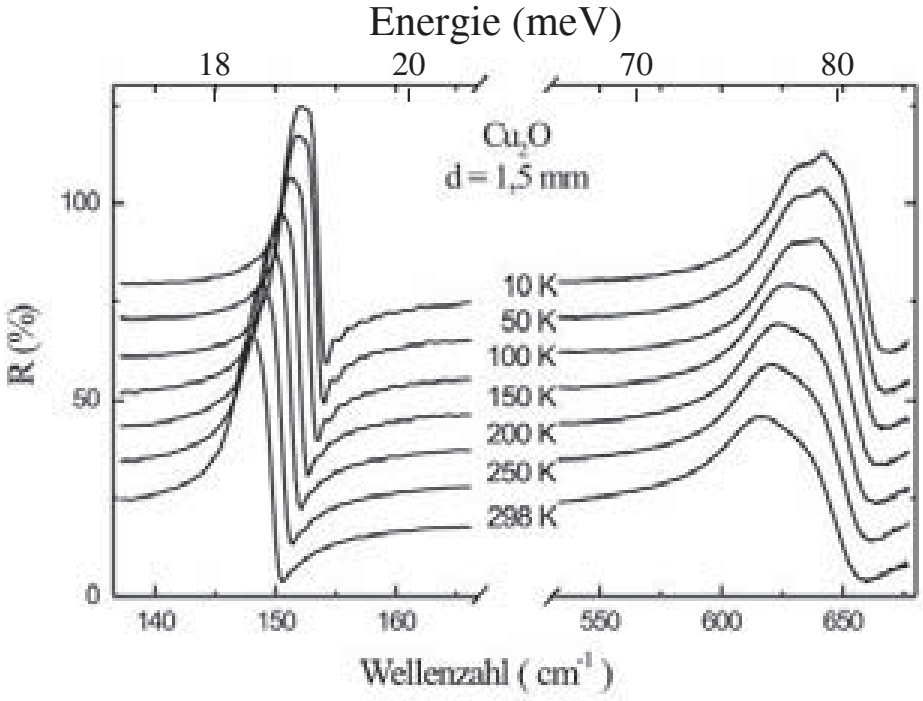

Abbildung 2.2: Reflexionsvermögen einer 1.5mm dicken Cu_2O Probe bei verschiedenen Temperaturen, übernommen aus [20]. Zur besseren Übersichtlichkeit sind die Spektren um ein Vielfaches von 10% additiv nach oben verschoben.

Cu_2O näherungsweise dem Zusammenhang

$$\omega(T) = \omega(T = 0) - C_1 T - C_2 T^2. \tag{2.1}$$

Dabei beschreibt der lineare Term den Einfluss der Volumenausdehnung, der zweite Term berücksichtigt Anharmonizitäten, die zu Phonon-Phonon Wechselwirkungen führen [30]. Auch für alle anderen optischen Phononen am Zonenzentrum wird in Cu_2O mit zunehmender Temperatur eine Rotverschiebung beobachtet, die sich mit Gleichung 2.1 annähern lässt [21, 31].

2.3 Exzitonen

2.3.1 Elektronen in Festkörpern

Die Wellenfunktion eines Elektrons im periodischen Potential eines kristallinen Festkörpers lässt sich nach dem Bloch'schen Theorem als Produkt einer ebenen Welle

und einer gitterperiodischen Funktion $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ audrücken:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}. \tag{2.2}$$

Für kleine $\vec{k}$, also in der Umgebung des Γ-Punktes, kann man die Impulsabhängigkeit der $u_{\vec{k}}$ vernachlässigen und durch ihren Wert bei $\vec{k} = 0$ annähern. In dieser Approximation lässt sich das Elektron nun wieder als (quasi) freies Teilchen betrachten und der Einfluss des gitterperiodischen Potentials geht lediglich durch die Modulation der Wellenfunktion mit $u_0(\vec{r})$ ein. Für die Dispersion des Elektrons, also den Zusammenhang $E(\vec{k})$ zwischen Energie und Quasiimpuls, bedeuted dies, dass sie in der Nähe des Γ-Punktes parabolisch angenähert werden kann

$$E(\vec{k}) = \hbar^2 k^2/(2m_e^*) \quad \text{mit} \quad m_e^* = \hbar^2 / \left(\frac{d^2E(k)}{dk^2}\right) = \text{konst.} \tag{2.3}$$

Hierbei ist m_e^* die so genannte effektive Masse, die sich im Allgemeinen von der Masse m_0 des freien Elektrons unterscheidet.
Die Entstehung von Energiebändern kann man sich vereinfacht in der Näherung des "fast freien Elektrons" vorstellen [32]. Dabei geht man von einem freien Elektron mit parabolischer Dispersion aus und schaltet in einem Gedankenexperiment ein schwaches periodisches Potential der Art $V(\vec{r}) = V(\vec{r}+\vec{R})$ ein, wobei $|\vec{R}| = a$ die Gitterkonstante ist. Ist der Betrag des Wellenvektors $\vec{k}$ ein ganzzahliges Vielfaches von π/a findet man jeweils zwei Linearkombinationen ebener Wellen, die zwei unterschiedliche stehende Wellen ergeben. Eine der beiden Lösungen entspricht dabei einer erhöhten Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei den positiven Rumpfatomen und führt zu einer Absenkung der Energie. Die andere Lösung beschreibt eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Gitteratomen was eine Erhöhung der Energie impliziert. Der Einfluss des gitterperiodischen Potentials lässt sich also berücksichtigen, indem man die $E(\vec{k})$-Parabel des freien Elektrons bei $|\vec{k}| = n \cdot \pi/a$ (mit $n \in \mathbb{N}$) "aufschneidet". Weiterhin kann wegen $E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G})$, wobei $\vec{G}$ ein reziproker Gittervektor mit $|\vec{G}| = 2\pi n/a$ ist, die Darstellung auf die erste Brillouinzone ($-\pi/a < |\vec{k}| < \pi/a$) reduziert werden. Somit bilden Elektronen in Festkörpern Energiebänder, die in der Nähe des Γ-Punktes durch parabolische Dispersionen $E_i(k) = \hbar^2 k^2/(2m_{e,i}^*)$ gekennzeichnet sind.
Von einem Halbleiter oder Isolator spricht man, wenn für $T \to 0$ nur vollständig besetzte oder vollständig unbesetzte Bänder existieren. Dies bedeutet, dass die Fermienergie E_F innerhalb der so genannten Bandlücke zwischen dem energetisch höchstgelegenen, noch besetzten (Valenz-)Band und dem niederenergetischsten, noch nicht besetzten (Leitungs-)Band liegt. Ein *direkter* Halbleiter liegt vor, wenn sich globales Valenzbandmaximum und Leitungsbandminimum an der gleichen Stelle im $\vec{k}$-Raum befinden, wie es im Falle von Cu_2O bei $\vec{k} = 0$ der Fall ist. Von einem Isolator spricht man in der Regel, wenn die Größe der Bandlücke E_g ca. 4eV übersteigt.

Regt man ein Elektron vom Valenzband ins Leitungsband an, so hinterlässt es im Valenzband ein so genanntes Loch, das als Quasiteilchen mit entgegengesetztem Impuls und Spin, der Ladung $+e$ und der effektiven Masse m_h^* aufgefasst werden kann.

2.3.2 Wannier-Exzitonen: die gelbe np-Serie

Elektron und Loch können auf Grund der Coulomb-Wechselwirkung einen gebundenen Zustand bilden. Geht man vom Zweiteilchenbild ins Einteilchenbild über, kann man diesen Zustand wiederum als Quasiteilchen auffassen, das *Exziton* genannt wird. Bei der Herleitung der exzitonischen Wellenfunktion wird zunächst analog zu Abschnitt 2.3.1 vorgegangen: unter der Voraussetzung, dass Elektron- und Lochwellenfunktion über viele Elementarzellen mitteln[3], werden ihre gitterperiodischen Anteile $u_{\vec{k}}^i(\vec{r}_i)$ durch $u_0^i(\vec{r}_i)$ angenähert. Dies führt zu einem wasserstoffähnlichen Problem und man erhält durch Separation in Relativkoordinaten ($\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$) und Schwerpunktskoordinaten ($\vec{R} = (\vec{r}_e m_e^* + \vec{r}_h m_h^*)/(m_e^* + m_h^*)$ bzw. $\vec{K} = \vec{k}_e + \vec{k}_h$) exzitonische Wellenfunktionen der Form

$$\Phi_{\vec{K},n,\ell,m}(\vec{R},\vec{r}_e,\vec{r}_h) \propto e^{i\vec{K}\vec{R}} u_0^C(\vec{r}_e) u_0^V(\vec{r}_h) \psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) \tag{2.4}$$

wobei u_0^C und u_0^V die gitterperiodischen Anteile der Blochfunktionen von Elektron und Loch im Leitungsband (C) bzw. Valenzband (V) für $\vec{k} = 0$ sind. Die exzitonischen Envelope-Funktionen $\psi_{n,\ell,m}(\vec{r})$ sind in der hier vorgenommenen Näherung identisch[4] mit den Envelope-Funktionen des H-Atoms. Man erhält eine Serie von unendlich vielen gebundenen Zuständen mit den Energieeigenwerten:

$$E_n = E_g \quad -\mathrm{Ry}^*/n^2 \quad + \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2M} \tag{2.5}$$

$$\text{mit} \qquad \mathrm{Ry}^* = \frac{\hbar^2}{2\mu a_\mathrm{B}^2} = 13.6\mathrm{eV}\frac{\mu}{\varepsilon^2} \tag{2.6}$$

$$\text{und} \qquad a_\mathrm{B} = \frac{\varepsilon\hbar^2}{\mu e^2} \tag{2.7}$$

Hierbei sind
μ : reduzierte Elektron-Loch-Masse ($\mu^{-1} = m_e^{*^{-1}} + m_h^{*^{-1}}$),
M : Gesamtmasse des Exzitons ($M = m_e^* + m_h^*$),
E_g : Bandlücke
ε : Dielektrizitätskonstante.

Zur Beschreibung der Exzitonen wurde die Terminologie aus Atomphysik und

[3] dies entspricht der Wannier-Näherung
[4] abgesehen vom Absolutwert des Bohrradius