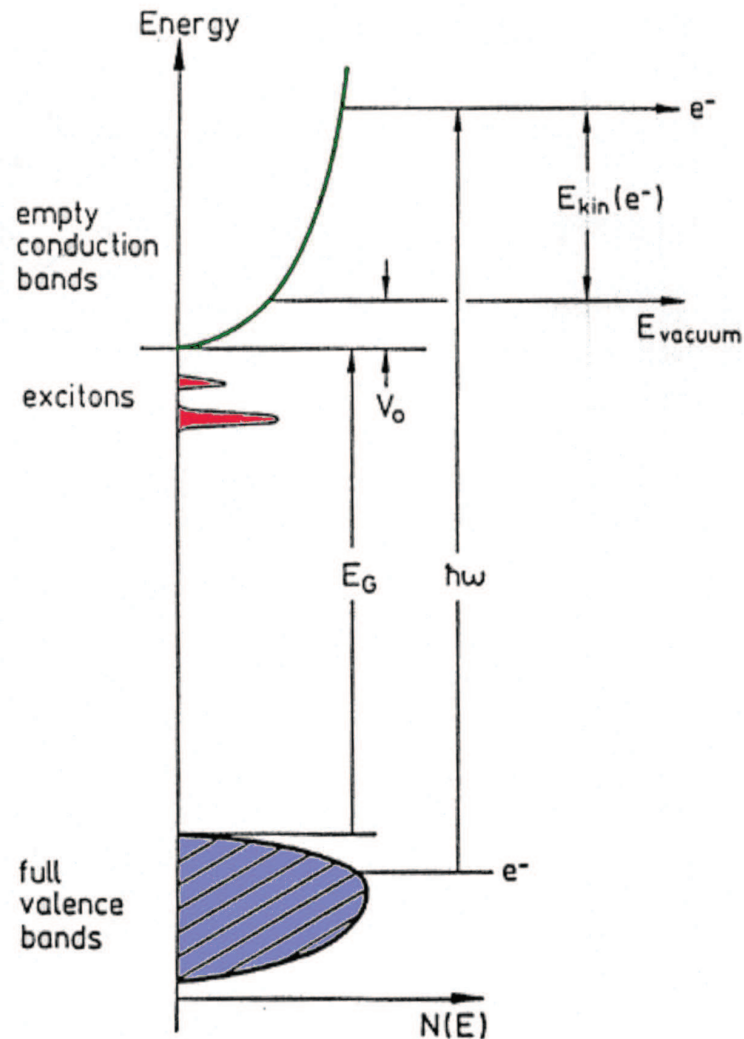


Elektronische Anregungen

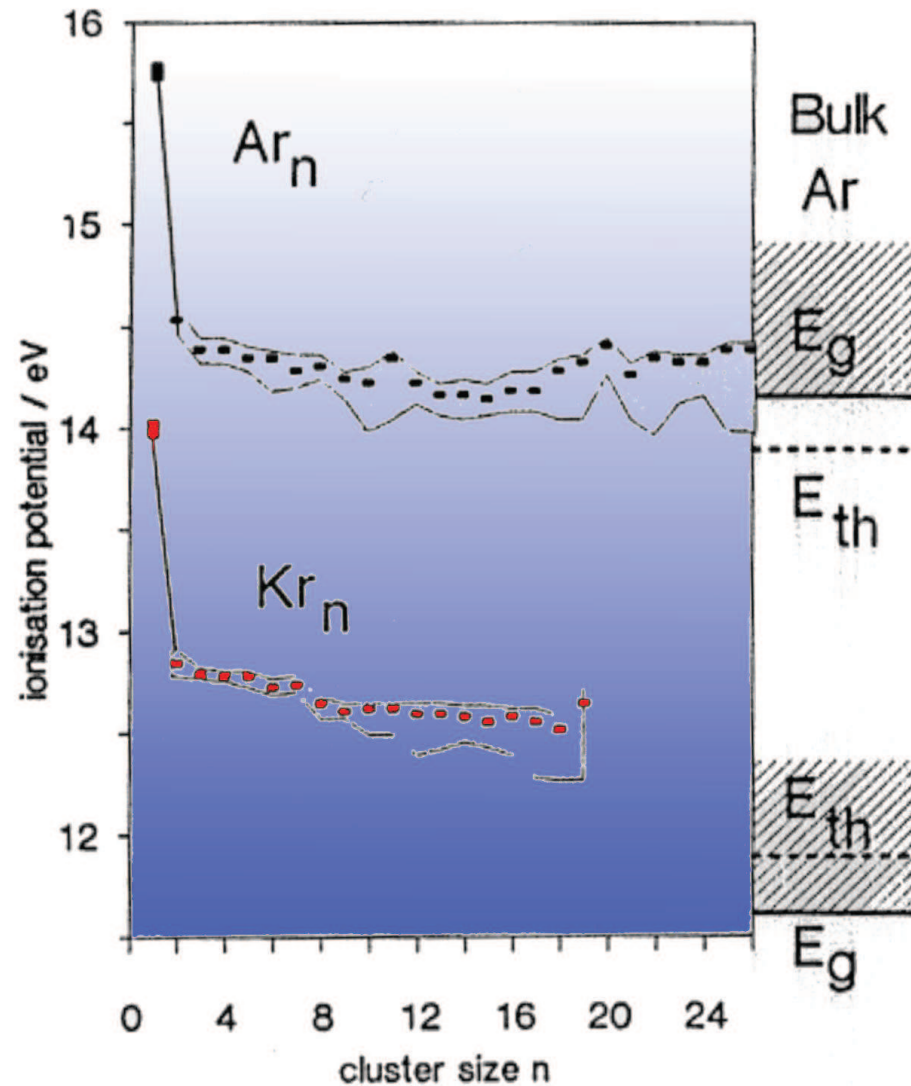
- Anregung von Van-der-Waals Clustern \Rightarrow Elektronische Struktur der Cluster
- Man kann zwischen den folgenden elektronischen Anregungen unterscheiden
 - neutrale Anregung (Photoabsorption)
diese führt typisch zu exzitonischen Zuständen, wobei unterschieden wird zwischen
 - lokalisierten – **Frenkelexziton** – und
 - delokalisierten – **Wannierexziton**
 - Exzitonen.
 - ionische Anregung (Photoionisation)

Elektronische Anregungen



- Prinzipielle elektronische Struktur von Xe und Kr Festkörpern
- Für die leichteren Edelgase ist die Elektronenaffinität V_0 negativ

Ionisation

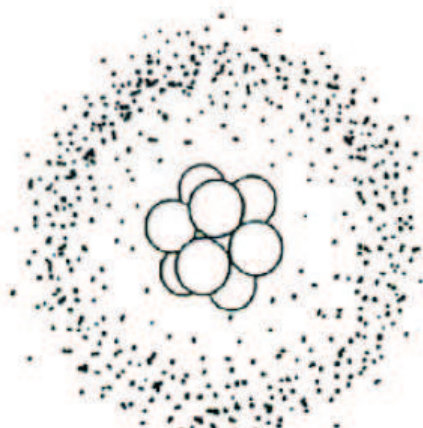


- Ionisationsschwellen von Xe und Kr Clustern
- Die Werte des Festkörpers werden bereits bei kleinen Clustern erreicht
- Nur der Abstand zum nächsten Nachbarn ist wichtig für die Bindung

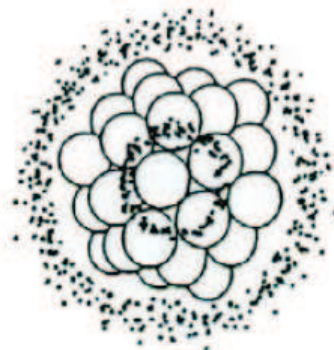
Exzitonen

- Exzitonen stellen neutrale Anregungen eines Edelgasclusters dar
- Wasserstoff-ähnliches System, bei dem das angeregte Elektron an das verbleibende Loch gebunden ist
- Frenkel-Exziton
 - Elektron und Loch sind am gleich Gitterplatz lokalisiert
- Wannier-Mott-Exziton
 - Abstand Elektron–Loch r_e ist groß gegen die Gitterkonstante ($r_e \gg a$)

Rydberg
Zustand

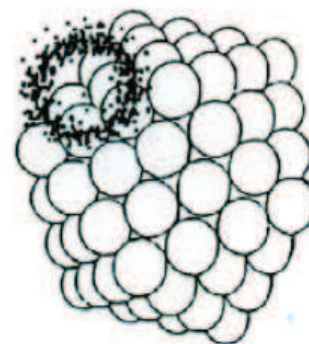


Cluster

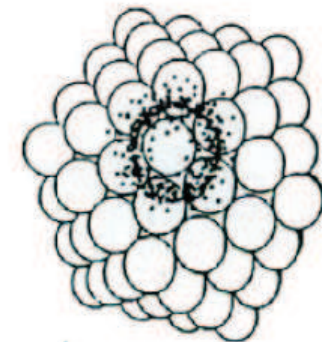


Exzitonen

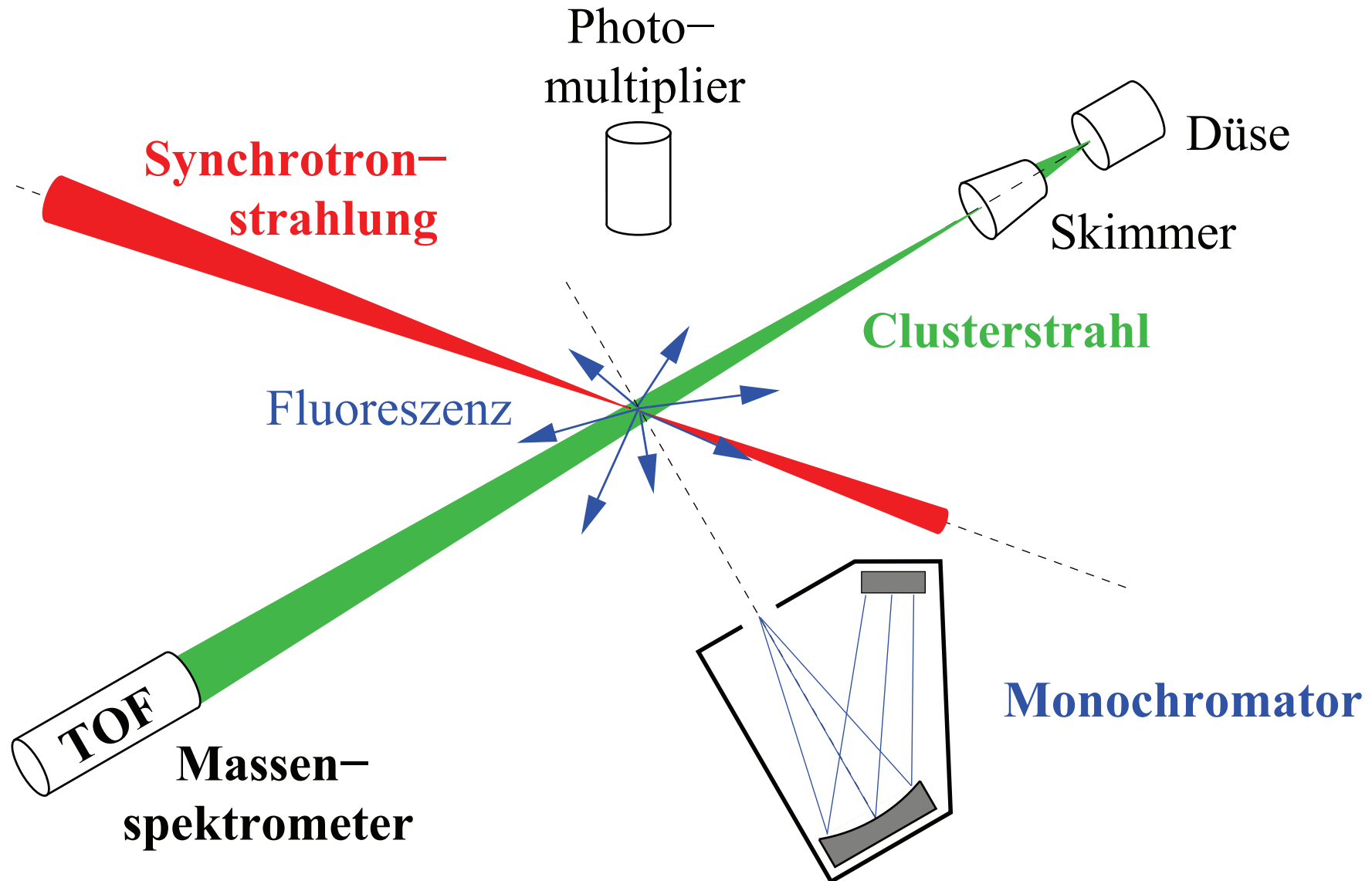
Oberfläche



Bulk

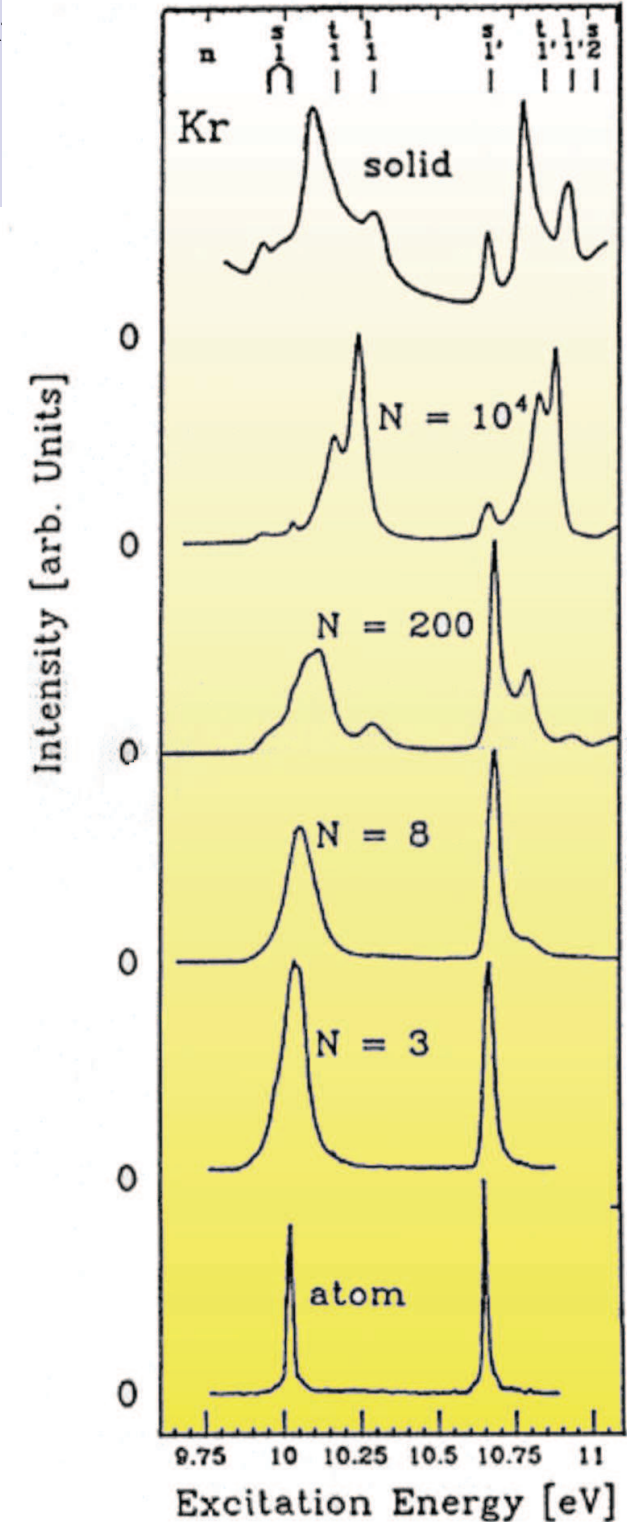


Exzitonen – Experimente



Exzitonen

- Fluoreszenzstrahlung von Kr_n -Clustern
- Starke Variation der Fluoreszenzstrahlung mit der Clustergröße
- Selbst für $\langle N \rangle = 10^4$ stimmt das Spektrum noch nicht mit dem Festkörper überein



Exzitonen

- Energie der Exzitonen

$$E_n = E_{gap} - \frac{\mu e^4}{2(4\pi e_0)^2 \epsilon^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} + \frac{\hbar^2 \cdot K^2}{2(m_e^{eff} + m_{hole}^{eff})} \quad (115)$$

Bandlücke + *Bindungsenergie* + *Translation*

mit

K Wellenvektor der Schwerpunktsbewegung

ϵ Dielektrizitätskonstante

μ reduzierte Masse des Exzitons

m_e^{eff} und m_{hole} sind die effektiven Massen des Elektrons bzw. des Lochs

- Im allgemeinen ist $m_e^{eff} \ll m_{hole}$, da die Kopplung des Lochs an das Gitter stärker ist

Exzitonen

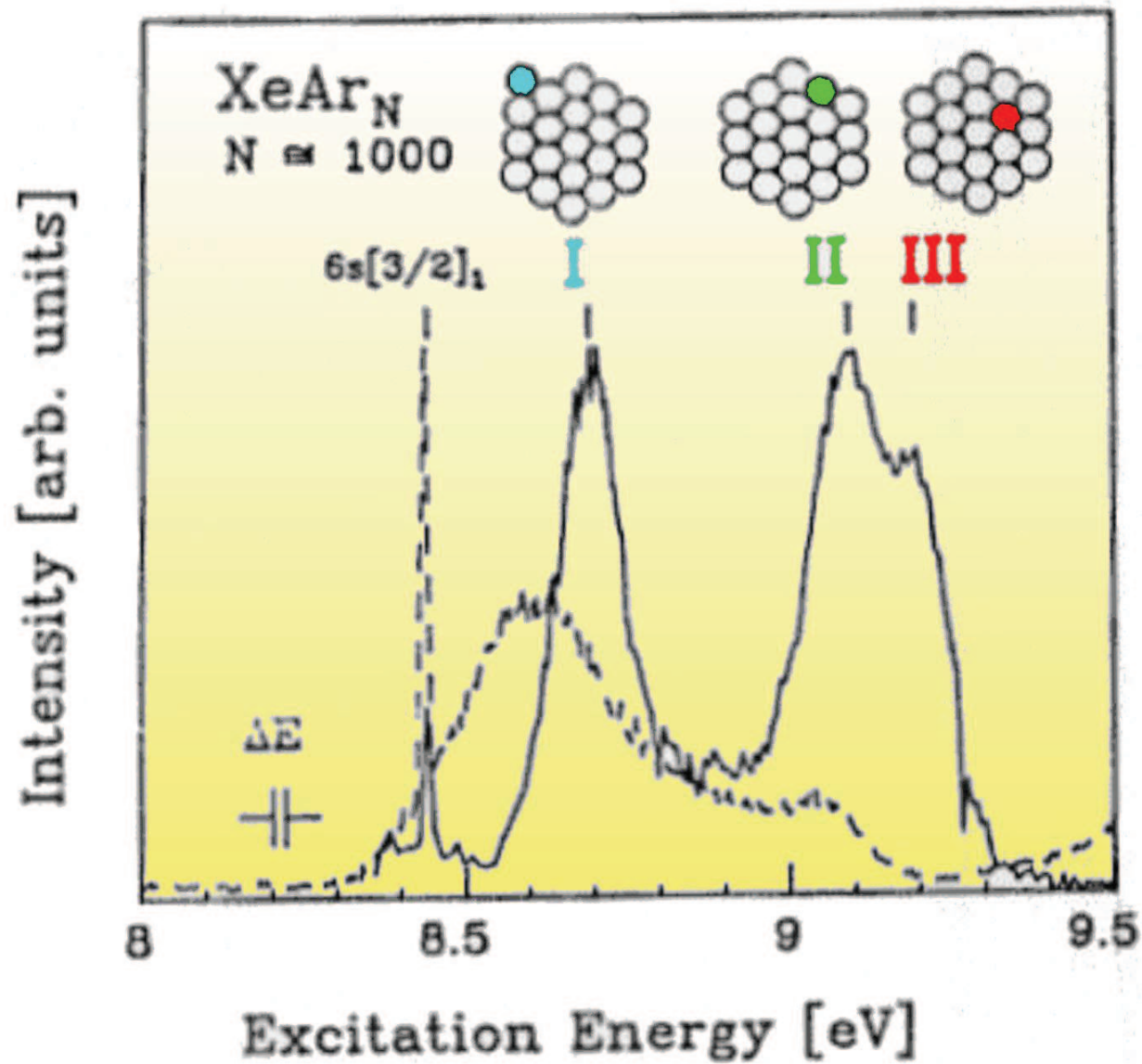
- Radius eines Exzitons

$$r_n = \frac{\hbar^2 \epsilon \epsilon_0}{\pi \mu e^2} \cdot n^2 = \frac{\epsilon}{\mu} a_0 \cdot n^2 \quad (116)$$

- Für $n \geq 2$ ist meist die Beschreibung durch ein Wannier-Mott Exziton gegeben
- Für $n = 1$ kommen oft noch Austauschterme hinzu, die die Beschreibung komplizierter machen

	Ar	Kr	Xe
m_e^{eff}	$0.48m_e$	$0.42m_e$	$0.35m_e$
m_{hole}^{eff}	$5.3m_e$	$2.1m_e$	$2.1m_e$
μ	$0.47m_e$	$0.4m_e$	$0.37m_e$
Radius $n = 1$	0.18 nm	0.25 nm	0.32 nm
Radius $n = 2$	0.72 nm	1.0 nm	1.2 nm
Radius $n = 3$	1.6 nm	2.3 nm	2.9 nm

Exzitonen



Exzitonen

- Fluoreszenzstrahlung von Xe Atomen, die sich in/an einem Ar Cluster befinden
- Fluoreszenzstrahlung von unterschiedlichen Positionen des Xe-Atoms kann unterschieden werden