Ladungsträgerdynamik in optisch angeregten GaAs-Quantendrähten: Relaxation und Transport

Diplomarbeit von Tobias Pfingsten

angefertigt bei Prof. Dr. T. Kuhn am Institut für Festkörpertheorie



Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Juni 2003

Ladungsträgerdynamik in optisch angeregten GaAs-Quantendrähten: Relaxation und Transport

Diplomarbeit von Tobias Pfingsten

angefertigt bei Prof. Dr. T. Kuhn am Institut für Festkörpertheorie



Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Juni 2003

Inhaltsverzeichnis

| Einleitung | | | | | | |
|------------|------|--------|--|----------|--|--|
| 1 | Alls | gemein | ne Grundlagen | 5 | | |
| | 1.1 | Überb | olick | 5 | | |
| | 1.2 | Mode | ll des Volumenhalbleiters | 6 | | |
| | | 1.2.1 | Der Hamiltonoperator in Blochdarstellung | 6 | | |
| | | 1.2.2 | Transformation auf Wannierbasis | 9 | | |
| | | 1.2.3 | Das Wannierexziton | 11 | | |
| | 1.3 | Elekti | ron-Phonon-Kopplung | 13 | | |
| | | 1.3.1 | Phononisches System und Parametrisierung | 13 | | |
| | | 1.3.2 | Kopplung durch das Deformationspotential | 14 | | |
| | | 1.3.3 | Kopplung durch piezoelektrische Effekte | 15 | | |
| | | 1.3.4 | Kopplung an optische Phononen | 15 | | |
| | 1.4 | Mode | ll des Quantendrahtes | 16 | | |
| | | 1.4.1 | Halbleiterheterostrukturen in Enveloppe-Näherung | 16 | | |
| | | 1.4.2 | Quantendrähte | 17 | | |
| | | 1.4.3 | Grenzflächenstörungen | 19 | | |
| | 1.5 | Zeiter | Ceitentwicklung des Vielteichensystems | | | |
| | | 1.5.1 | Heisenbergbild und | | | |
| | | | Hierarchie der Bewegungsgleichungen | 21 | | |
| | | 1.5.2 | Entwicklung nach Potenzen im Feld gemäß DCT | 21 | | |
| | 1.6 | Trans | port und Boltzmanngleichung | 23 | | |
| | | 1.6.1 | Diffusion und ballistischer Transport | 23 | | |
| | | 1.6.2 | Näherungen und Charakterisierung des Transports | 24 | | |
| | 1.7 | Wigne | erdarstellung | 27 | | |
| | | 1.7.1 | Die Wignerfunktion | 27 | | |
| | | 1.7.2 | Die Wignertransformation | 28 | | |
| | 1.8 | Ensen | nble-Monte-Carlo Methode | 29 | | |
| | | 1.8.1 | Monte-Carlo Methoden | 29 | | |
| | | 1.8.2 | Mathematische Betrachtung | 29 | | |
| | | 1.8.3 | Algorithmus | 32 | | |

INHALTSVERZEICHNIS

| 2 | Das | Modellsystem 38 | | | | | |
|----------|-----|--|--|---|--|--|--|
| | 2.1 | Überb | lick | 5 | | | |
| | 2.2 | Hamil | tonoperator und dynamische Größen | 6 | | | |
| | | 2.2.1 | Hamiltonoperator und Näherungen | 6 | | | |
| | | 2.2.2 | Die Dynamik bestimmende Größen 3 | 7 | | | |
| | 2.3 | Beweg | yungsgleichungen | 9 | | | |
| | 2.4 | Diago | nalisierung von $\hbar\Omega_Y$ | 0 | | | |
| | | 2.4.1 | Bestimmung der Exziton-Wellenfunktionen 4 | 0 | | | |
| | | 2.4.2 | Entwicklung relevanter Größen in die Eigenbasis 4 | 3 | | | |
| | 2.5 | 2.5 Bestimmung der assistierten Größen | | | | | |
| | | 2.5.1 | Die Markov-Näherung | 6 | | | |
| | | 2.5.2 | Bewegungsgleichungen in Markov-Näherung 4 | 8 | | | |
| | 2.6 | Analy | tische Lösung von y_x | 9 | | | |
| | 2.7 | Transf | Formation auf <i>Boltzmann</i> form | 0 | | | |
| | | 2.7.1 | Struktur der Gleichung, Fall homogener Anregung 5 | 0 | | | |
| | | 2.7.2 | Inhomogene Anregung, K-Wignertransformation 5 | 2 | | | |
| | | 2.7.3 | ν -Wignertransformation | 2 | | | |
| | | 2.7.4 | Elektron- und Lochdichte 5 | 6 | | | |
| 3 | Nun | neriscl | ne Ergebnisse 5 | 9 | | | |
| | 3.1 | Überb | lick | 9 | | | |
| | 3.2 | Einfül | rende Betrachtungen | 0 | | | |
| | | 3.2.1 | Veranschaulichung des Modells | 0 | | | |
| | | 3.2.2 | Experimentelle Methoden | 1 | | | |
| | 3.3 | 3 Trennung von Elektronen und Löchern | | | | | |
| | | 3.3.1 | Grenzfall freier Propagation | 3 | | | |
| | | 3.3.2 | Dynamik mit Streuung | 3 | | | |
| | 3.4 | .4 Relaxation ins Gleichgewicht | | | | | |
| | | 3.4.1 | Besetzungen und kinetische Energie 6 | 6 | | | |
| | | 3.4.2 | Abweichung von thermischer Verteilung 6 | 8 | | | |
| | 3.5 | Äußer | e Bedingungen | 0 | | | |
| | | 3.5.1 | Anregungsenergie und Transportlänge | 0 | | | |
| | | 3.5.2 | Temperatur und Expansionsrate | 1 | | | |
| | 3.6 | Zusam | nmenspiel der Streumechanismen | 3 | | | |
| | | 3.6.1 | Optische und akustische Phononen | 3 | | | |
| | | 3.6.2 | Piezoelektrische Kopplung, Deformationspotential 7 | 5 | | | |
| | 3.7 | Trans | port und Relaxation | 7 | | | |
| | | 3.7.1 | Anomaler Transport durch Streuung | 7 | | | |
| | | 3.7.2 | Ballistischer und diffusiver Transport | 9 | | | |
| | 3.8 | Vergle | ich der Messsignale | 1 | | | |
| | | 3.8.1 | Verschiedenartigkeit der Signale | 1 | | | |
| | | 3.8.2 | Lumineszenz- und Pump-Probe Signal 8 | 3 | | | |

| INHALTSVERZEICHNIS | III |
|-------------------------------------|-----|
| Zusammenfassung und Ausblick | 85 |
| A Parameter zur Simulationssoftware | 87 |

Einleitung

Problemstellung

III-V Heterostrukturen

Verbindungshalbleiter auf der Basis von Elementen aus der dritten und fünften Hauptgruppe (z.B. Aluminium und Gallium mit Arsen, und Stickstoff) spielen in speziellen Anwengungsgebieten, insbesondere der Telekommunikation, eine entscheidende Rolle:

Mit modernen Herstellungsverfahren wie der Molekularstrahlepitaxie (MBE) ist es möglich geworden, Strukturen in der Größenordnung einiger Gitterkonstanten herzustellen. Da die Bandlücken von III-V Halbleitern stark mit dem Verhältnis der verwendeten Elemente variieren, können so Bauteile mit ganz neuen elektronischen und optischen Eigenschaften hergestellt werden [Bas, Sha].

Durch Einschränkung der Bewegung von Ladungsträgern in eine, zwei oder alle Richtungen (Quantenfilm, -draht, -punkt) erhält man (quasi-) niederdimensionale Systeme, deren Eigenschaften z.B. in Hochleistungstransistoren (HEMT) [Reit] oder Halbleiterlasern ausgenutzt werden.

In wissenschaftlicher Hinsicht sind diese Systeme besonders interessant, da es durch sie möglich geworden ist, quantenmechanische Systeme mit bestimmten Eigenschaften herzustellen und zu untersuchen. Quantenpunkte zum Beispiel haben Atomen sehr ähnliche Eigenschaften, die aber gezielt angepasst werden können.

Ladungsträgerdynamik

Die Dynamik von Ladungsträgern in Halbleitern kann mit optischen Methoden gut untersucht werden [Ha1]. Mit Lasern ist es möglich, Lichtpulse einer Dauer im Bereich von einigen fs zu realisieren und die in Halbleitern induzierte Dynamik mit dieser zeitlichen Auflösung zu messen [Sha].

Auf dieser Zeitskala spielt sich nach kohärenter optischer Anregung im Festkörper die Dephasierung ab [Loh, Krü, Kru, Ro1, Sha]. Man hofft die ablaufenden Prozesse kohärent kontrollieren zu können [Her], eine Voraussetzung für die Realisierung von Quantengattern [Bou]. Durch Dephasierung bildet sich eine

EINLEITUNG

Besetzung fern vom thermischen Gleichgewicht, die auf einer Zeitskala von μ s relaxiert bzw. thermalisiert [Mei].

Die Dynamik über drei Größenordnungen der Zeitskala, von weniger als einer ps bis zu mehr als einer ns, also die Dephasierung nach optischer Anregung und die anschließende Thermalisierung des Systems wird in der vorliegenden Arbeit untersucht.

Ein wichtiger Aspekt ist hier die Berücksichtigung von Transportprozessen. Insbesondere in den letzten Jahren wurde deutlich, dass der Zusammenhang von Relaxation und Transport nach optischer Anregung interessante Aspekte, von Musterbildung bis hin zur Bose-Einstein Kondensation von Exzitonen [Bu1, Bu2, Sno] zu beleuchten vermag. Während in einer, dieser vorausgehenden Arbeit ein homogenes System untersucht wurde [Si1, Si2], kann das hier präsentierte, erweiterte Modell sich in ortsaufgelösten Messungen [Ax1, Gro, Zh1, Zh2, Zh3, Zh4, Zh5] zeigende Transportphänomene beschreiben.

Wechselwirkungen

Im Festkörper liegt zum einen die Wechselwirkung der Elektronen untereinander vor, zum anderen die mit den Atomrümpfen des Gitters.

Die Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger führt im Wesentlichen zu Korrelationen, wie dem Exziton als Elektron-Loch Paar mit wasserstoffähnlichem Spektrum [Egr]. Über verschiedene Kopplungsmechanismen wechselwirken Gitterschwingungen, Phononen, mit den korrelierten Ladungsträgern und bestimmen die Dynamik des Systems.

In dieser Arbeit werden die durch Coulomb-Wechselwirkung bewirkten Korrelationen über die Transformation in eine Paarbasis, die "Exzitonbasis", die Dynamik der Phononon- und elastischen Streuung über Streuraten zwischen Paarzuständen berücksichtigt [Ax3].

Methodik

Zur Lösung zeitabhängiger Probleme gibt es eine Vielzahl verschiedener Ansätze, hier wird der Dichtematrixformalismus gewählt [Ro1]. Über die durch die Dynamik bestimmte Entkopplung (DCT) werden hier Korrelationen exakt bis zur zweiten Ordnung im elektrischen Feld modelliert [Ax3]. Die sich ergebenden Bewegungsgleichungen können durch Wignertransformationen auf die wohluntersuchte Form einer linearen Boltzmanngleichung gebracht werden, für deren numerische Lösung es sehr effiziente Algorithmen gibt.

Die hier gewählte Methode ist ein modifizierter Ensemble-Monte-Carlo Algorithmus, mit dem insbesondere Streuung mit konstanten Raten und Transport effizient dargestellt werden können [Ja1, Ja2, Ro2, Wag].

Aufbau der Arbeit

Die Gliederung in drei Kapitel trennt allgemeine Betrachtungen von der expliziten Herleitung des numerisch zu behandelnden Modells und der Präsentation und Diskussion der erzielten Ergebnisse.

In Kapitel 1 werden zunächst allgemeine Grundlagen der Festkörperphysik dargestellt. Die sich aus dem hergeleiteten Hamiltonoperator ergebenden Bewegungsgleichungen sollen nach dem Konzept des durch die Dynamik bestimmten Abbruchs geschlossen werden, das im Weiteren aufgezeigt wird.

Im Anschluss werden weitere wichtige Grundlagen gelegt: Eine Charakterisierung des Transports wird anhand von Vereinfachungen der Boltzmanngleichungen vorgenommen, die bei der Umformulierung der Bewegungsgleichungen wichtige Wignertransformation wird eingeführt und der zur numerischen Lösung verwendete Ensemble-Monte-Carlo Argorithmus wird erläutert.

Das folgende 2. Kapitel dient der Herleitung und Transformation des numerisch zu lösenden Modells. Zunächst werden die für die Dynamik wichtigen Größen eingeführt und die zugehörigen Bewegungsgleichungen aufgestellt.

Nach Durchführung einer Entwicklung in die erwähnte Paarbasis können hier die Streuraten berechnet und im Anschluss die Transformationen der Gleichungen auf Boltzmanngestalt erfolgen.

Das in den vorhergehenden Kapiteln aufgestellte Modell erlaubt die numerische Untersuchung des Ladungsträgersystems. In Kapitel 3 werden diese Ergebnisse präsentiert und mit Experimenten verglichen.

Untersucht werden die räumliche Trennung von Elektronen und Löchern, die Relaxation der exzitonischen Besetzung ins thermische Gleichgewicht, die Abhängigkeit von Relaxation und Transport von Anregungsbedingungen und das Wechselspiel der berücksichtigten Streumechanismen.

Der letzte Teil der Arbeit dient der Charakterisierung des Transports und dem Vergleich verschiedener Messsignale.

Kapitel 1 Allgemeine Grundlagen

1.1 Überblick

Da in fast allen Lehrbüchern zur theoretischen Festkörperphysik¹ der Hamiltonoperator des Festkörpers behandelt wird, sollen bei der Aufstellung des Modells der Hamiltonoperator in 2. Quantisierung² bezüglich der Blochbasis zugrunde gelegt und nur die vorgenommenen Näherungen zitiert werden. Im weiteren Verlauf wird eine Transformation in die *Wannierbasis*³ vorgenommen und insbesondere die Elektron-Elektron-Wechselwirkung genauer behandelt. Spineffekte werden von Anfang an unberücksichtigt gelassen⁴.

Am Ende des Abschnitts 1.2 steht der *Hamiltonoperator in 2. Quantisierung* bezüglich der Wannierbasis, wie er z.B. in [Si1] und [Ax3] zu finden ist.

Die Kopplung an die Phononen wird in Abschnitt 1.3 genauer betrachtet. Wie üblich wird eine Parametrisierung der Kopplungskonstanten anhand phämenologischer Überlegungen vorgenommen [Mah].

Ein *Quantendrahtmodell* wird in Abschnitt 1.4 eingeführt, zunächst in Näherung eines idealen Drahtes, dann mit Erweiterung auf Streuung an Grenzflächenrauhigkeit [And].

Die zum in dieser Arbeit untersuchten Modell gehörigen Bewegungsgleichungen werden in Kapitel 2 hergeleitet, in Abschnitt 1.5 wird die theoretische Vorarbeit geleistet: Das verwendete Schema des durch die *Dynamik kontrollierten Abbruchs* wird dargelegt [Ax2].

Auf der Charakterisierung des *Transports* von elementaren Anregungen und Ladungsträgern liegt ein Augenmerk der hier dargestellten Untersuchungen. Abschnitt 3.7 führt das Konzept von diffusivem und ballistischem Transport anhand traditioneller Definitionen und der *Boltzmanngleichung* ein [Ku1].

¹Solche Lehrbücher sind z.B. [Czy, Hak].

 $^{^2 {\}rm Zur}$ 2. Quantisierung siehe z.B. [St2].

³Siehe [Czy, Hak, Kit].

⁴Da der Spin nicht weiter wichtig sein wird, werden dazugehörige Indizes weglassen.

Das Konzept der *Wignerdarstellung* [Wig], eingeführt in Abschnitt 1.7, stellt ein in den hier präsentierten Betrachtungen wichtiges Konzept dar, sowohl in theoretischer als auch in praktischer Hinsicht: Es erlaubt die anschauliche Interpretation berechneter Größen und macht diese einer effizienten Behandlung mit Ensemble-Monte-Carlo Methoden (Abschnitt 1.8) zugänglich.

1.2 Modell des Volumenhalbleiters

1.2.1 Der Hamiltonoperator in Blochdarstellung

Entkopplung von Elektron- und Atomrumpfdynamik

In der Born-Oppenheimer Näherung, in der man die Bewegung von Elektronen und Kernen (bzw. Atomrümpfen und Valenzelektronen) als entkoppelt annimmt, kann man den Festkörper-Hamiltonoperator in den elektronischen \mathcal{H}_{El} und den Anteil der Atomrümpfe \mathcal{H}_{Ph} zerlegen:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{El} + \mathcal{H}_{Ph}.$$
 (1.1)

Die Atomrümpfe ordnen sich bei einer Temperatur von null Kelvin im effektiven Potential in einem periodischen Gitter an. Geht man davon aus, dass Auslenkungen aus den Ruhelagen klein sind, dass also z.B. die Temperatur nicht zu groß ist, kann man die *harmonische Näherung* vornehmen⁵. Man erhält

$$\mathcal{H}_{Ph} = \sum_{l,\vec{q}} \hbar \omega_l(\vec{q}) b^{\dagger}_{l,\vec{q}} b_{l,\vec{q}}$$
(1.2)

 mit

Definition 1. Phononen

- hω_l(q) ist die Phononenergie, abhängig von Phonon -zweig (l) und -wellenvektor (q).
- b[†]_{l,q} und b_{l,q} seien die phononischen Auf- und Absteigeoperatoren.
 Sie gehorchen den Boson-Kommutatorrelationen, weshalb im thermischen Gleichgewicht die Teilchendichte der Bose-Einstein-Verteilung entspricht⁶:

$$\langle n_{l,\vec{q}}^{Ph} \rangle = \langle b_{l,\vec{q}}^{\dagger} b_{l,\vec{q}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_l(\vec{q})}{k_B T}} - 1}$$
(1.3)

⁵Anharmonische Effekte werden z.B. in [Krü] behandelt.

⁶Zur statistischen Physik siehe [St2] oder [Ku1].



In der Näherung effektiver Massen wird angenommen, die Energie sei quadratisch in k. In der Nähe des Γ -Punktes ist diese Näherung gut; dort verhalten sich die Elektronen wie freie Teilchen mit einer Masse m^* . Sollen große Felder oder hohe Ladungsträgerdichten beschrieben werden, sind auch Zustände mit großen k besetzt und die Abweichung der Bänder von der parabolischen Form wird wichtig. GaAs ist ein direkter Halbleiter, die Maxima der Valenzbänder und Minima der Leitungsbänder liegen im Γ -Punkt übereinander.

Abbildung 1.1: Bandschema von GaAs. Aus [Vur].

Den, das elektronische System bestimmenden, Operator \mathcal{H}_{El} kann man zerlegen in einen Anteil, der die Bewegung im gitterperiodischen Rumpfpotential beschreibt ($\mathcal{H}_{El}^{Gitter}$) und den Anteil der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander (\mathcal{H}_{El}^{WW}).

Da $\mathcal{H}_{El}^{Gitter}$ mit den Translationsoperatoren $T_{\vec{R}}$ um Gittervektoren \vec{R} vertauscht, können gemeinsame Eigenfunktionen zu $\mathcal{H}_{El}^{Gitter}$ und den $T_{\vec{R}}$ gefunden werden⁷. Diese sogenannten *Blochfunktionen* lassen sich schreiben als

$$\langle \vec{r} \mid n, \vec{k} \rangle \equiv \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (1.4)$$

wobe
i $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ gitterperiodisch ist. Nimmt man die Näherung effektiver Massen vor, so findet man

$$\mathcal{H}_{El}^{Gitter} = \sum_{j,\vec{k}} \epsilon_j(\vec{k}) a_{j,\vec{k}}^{\dagger} a_{j,\vec{k}}$$
(1.5)

 mit

⁷Zu Symetrieoperationen siehe [St1].

Definition 2. Blochbild

- $\epsilon_j(\vec{k}) = E_j + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_j^*}$, Energie in Näherung effektiver Masse. Der Festkörper wird als isotrop angenommen.
- $a_{i,\vec{k}}^{\dagger}$, $a_{i,\vec{k}}$ seien Erzeuger und Vernichter von Elektronen im Blochzustand $|j,\vec{k}\rangle$. Sie gehorchen den Fermion-Antikommutatorrelationen.

Die \vec{k} -Abhängigkeit der Blockfaktoren $u_{j,\vec{k}}(\vec{r})$ wird durch die Näherung effektiver Massen vernachlässigt [Hak], im Weiteren tragen also die Blochfaktoren keine solchen Indizes. Das exakte Bandschema von GaAs ist in Abbildung 1.1 zu sehen. In der Nähe des Γ -Punktes, also bei kleinen Wellenvektoren \vec{k} , wird die Dispersion gut in Näherung effektiver Massen wiedergegeben.

Eine genauere Betrachtung des Coulombanteils \mathcal{H}_{El}^{WW} folgt in Kap. 1.2.3.

Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Will man nun über eine völlige Entkopplung der Dynamik von Elektronen und Rümpfen hinausgehen, so bietet sich an, die Wechselwirkung, beschrieben durch ein Potential V_{ElPh} , in *linearer Ordnung* der Rumpfauslenkungen zu berücksichtigen [Mah], die man durch die Phononoperatoren $b_{l,\vec{q}}$ und $b_{l,\vec{q}}^{\dagger}$ ausdrücken kann. Als neuen Summanden im Hamiltonoperator erhält man den Term

$$\mathcal{H}_{ElPh}^{WW} = \sum_{\vec{k}, j; \vec{q}, \vec{G}, l} M_{\vec{k}, j; \vec{q} + \vec{G}, l}^{Ph} (b_{l, \vec{q}} + b_{l, -\vec{q}}^{\dagger}) a_{j, \vec{k} + \vec{q} + \vec{G}}^{\dagger} a_{j, \vec{k}} .$$
(1.6)

Phononenergien liegen im Bereich von wenigen 10 meV. Da die elektronischen Bänder⁸ um rund 1.5 eV getrennt sind, so kann, wie in (1.6) angesetzt, ein phononinduzierter Übergang zwischen elektronischen Bändern ausgeschlossen werden (nur Intrabandterme). Weiter werden Umklappprozesse vernachlässigt, d.h. nur Normalprozesse, Summanden in (1.6) mit $\vec{G} = 0$, werden berücksichtigt⁹. Die Matrixelemente $M_{\vec{k},j;\vec{q}+\vec{G},l}^{Ph}$ sind formal mikroskopisch definiert, sie werden aber üblicherweise phänomenologisch bestimmt¹⁰. Mit dem in den Auslenkungen der Rümpfe linearisierten Wechselwirkungspotential V_{ElPh} ist die formale Definition der Kopplungskonstanten in Näherung effektiver Massen

$$\sum_{l} M_{\vec{k},j;\vec{q},l}^{Ph}(b_{l,\vec{q}} + b_{l,-\vec{q}}^{\dagger}) \equiv \langle j, \vec{k} + \vec{q} | V_{ElPh} | j, \vec{k} \rangle$$

$$= \frac{1}{V} \int d^{3}r \ e^{i\vec{q}\vec{r}} u_{j}^{*}(\vec{r}) \ V_{ElPh} \ u_{j}(\vec{r})$$

$$\equiv \sum_{l,\vec{q}} M_{j;\vec{q},l}^{Ph}(b_{l,\vec{q}} + b_{l,-\vec{q}}^{\dagger}) , \qquad (1.7)$$

⁸Betrachtet werden später das GaAs Γ_6^L und Γ_8^V hh Band. ⁹Zur Motivation dieser Näherung siehe auch [Dev], [Krü] und [Kru].

¹⁰Zur Bestimmung siehe Abschnitt 1.3.

also unabhängig von \vec{k} .

Wirkung einer kohärenten Lichtquelle

Die spontane Emission von Photonen ist ein Beispiel für Effekte, die nur durch Quantisierung des elektromagnetischen Feldes verstanden werden können. Werden solche Effekte vernachlässigt, so kann die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld semiklassisch beschrieben werden [Hak]. Erfolgt die Anregung durch einen Laser, also eine äußerst kohärente Lichtquelle, so ist diese Näherung gerechtfertigt. Rechnet man korrekt mit einem quantisierten Lichtfeld, wie F. Rossi in [Ro1] beschreibt, entspricht der semiklassische Term gerade der ersten Ordnung einer Korrelationsentwicklung nach Erzeugern und Vernichtern von Photonen.

Für ein elektrisches Feld

$$\vec{E}_0(\vec{r})\cos(\vec{k}_L\vec{r}-\omega_Lt)$$

findet man, wie beschrieben in [Coh], den entsprechenden semiklassischen Teil des Hamiltonoperators

$$\mathcal{H}_{El}^{Laser} = -e \sum_{El.i} \vec{r}_i \cdot \vec{E}_0(\vec{r}_i) \cos(\omega_L t)$$

$$= -\sum_{j,\vec{k};j',\vec{k'}} \langle j, \vec{k} | \vec{E}_0(\vec{r}) e \vec{r} | j', k' \rangle \cos(\omega_L t) \left(1 - \delta_{jj'}\right) a_{j,\vec{k}}^{\dagger} a_{j',\vec{k'}} .$$
(1.8)

Als Näherung wurde die *Dipolnäherung* durchgeführt, in der angenommen wird, dass die Wellenlänge des Lichts ($\approx 5 \cdot 10^{-7}$ m) groß gegen die typischen Abmessungen im Festkörper (Größe einer Einheitszelle $\approx 10^{-10}$ m) ist. Die Ortsabhängigkeit von $\vec{E}_0(\vec{r})$ sei langsam im Vergleich zur Wellenlänge. Verwendet man Licht, für das $\hbar\omega$ im Bereich von einem eV liegt, also im Bereich der Bandlücke, so liefern Interbandübergänge den wichtigsten Anteil zu (1.8). *Intrabandübergänge* können vernachlässigt werden¹¹. Die allgemein durchgeführte rotating wave Approximation (RWA) wird an späterer Stelle ausgenutzt.

1.2.2 Transformation auf Wannierbasis

Es wird sich als sinnvoll erweisen, vom Blochbild zum Wannierbild zu wechseln. Insbesondere vereinfacht sich dadurch die Betrachtung der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander (siehe Kap. 1.2.3), das allerdings zu dem Preis, dass im Wannierbild $\mathcal{H}_{El}^{Gitter}$ nicht mehr diagonal ist. Definiert sind die Wannierzustände als Linearkombination von Blochzuständen:

¹¹Intrabandübergänge werden durch den Faktor $(1 - \delta_{jj'})$ ausgeschlossen.

Definition 3. Wannierbild

• Wannierzustände $|n, \vec{R}\rangle$

$$\begin{aligned} |n,\vec{R}\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\vec{R}} |n,\vec{k}'\rangle \\ \langle \vec{r} |n,\vec{R}\rangle &\equiv w_{n,\vec{R}}(\vec{r}) = w_n(\vec{r}-\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\vec{R}} \Psi_{n,\vec{k}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{VN}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{R})} u_n(\vec{r}) \end{aligned}$$

 c[†]_{j,R}, c_{j,R} seien Erzeuger und Vernichter von Elektronen im Wannierzustand |j, R⟩. Sie gehorchen den Fermion-Antikommutatorrelationen.

Wie H. Haken in [Hak] zeigt, sind die Wannierfunktionen auf Elementarzellen am Ort \vec{R} lokalisiert, was im Weiteren noch ausgenutzt werden wird. Aus der Definition der Wannierzustände folgen direkt die Transformationsvorschriften für die Vernichtungsoperatoren $a_{n,\vec{k}}$ und $c_{n,\vec{k}}$, bzw. durch hermitesche Konjugation auch für die Erzeugungsoperatoren $a_{n,\vec{k}}^{\dagger}$ und $c_{n,\vec{k}}^{\dagger}$:

$$c_{n,\vec{R}} = \sum_{\vec{k}} \langle n, \vec{R} | n, \vec{k} \rangle a_{n,\vec{k}}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} a_{n,\vec{k}}, \qquad (1.9)$$

$$|n,k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |n,R\rangle$$

und damit $a_{n,\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} c_{n,\vec{R}}.$ (1.10)

Mit den Transformationsvorschriften (1.9) und (1.10), sowie **Definition 4.** Matrixelemente $\vec{M}_{j,j'}^D$, $T_{\vec{R}}^j$ und $\gamma_{\vec{R};\vec{q},l}^j$

$$\vec{M}_{j,j'}^{D} \equiv \frac{1}{V_{EZ}} \int_{V_{EZ}} d^{3}r \ u_{j}^{*} \ e\vec{r} \ u_{j'}$$
$$T_{\vec{R}}^{j} \equiv \left(E_{j} - \frac{\hbar^{2}}{2m_{j}^{*}} \triangle_{\vec{R}}\right)$$
$$\gamma_{\vec{R};\vec{q},l}^{j} \equiv e^{i\vec{q}\vec{R}} M_{j;\vec{q},l}^{Ph}$$

können nun die in Abschnitt 1.2.1 eingeführten Teile des Hamiltonoperators auf die Wannieroperatoren umgeschrieben werden:

1.2. MODELL DES VOLUMENHALBLEITERS

• $\mathcal{H}_{El}^{Gitter}$: Dynamik quasifreier Elektronen im Gitter

$$\mathcal{H}_{El}^{Gitter} = \sum_{j,\vec{k}} \epsilon_{j}(\vec{k}) a_{j,\vec{k}}^{\dagger} a_{j,\vec{k}} = \sum_{j,\vec{R},\vec{R}'} \left\{ \sum_{\vec{k}} \frac{1}{N} \left(E_{j} + \frac{\hbar \vec{k}^{2}}{2m_{j}^{*}} \right) e^{i\vec{k}(\vec{R}-\vec{R}')} \right\} c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}'} = \sum_{j,\vec{R}} \underbrace{\left(E_{j} - \frac{\hbar^{2}}{2m_{j}^{*}} \Delta_{\vec{R}} \right)}_{T_{\vec{R}}^{j}} c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}}$$
(1.11)

Der Laplace operator $\triangle_{\vec{R}}$ trägt nur einen Index, ist aber nicht diagonal in \vec{R}^{12} .

• \mathcal{H}_{El}^{Laser} : kohärente Lichtquelle

$$\mathcal{H}_{El}^{Laser} = -\sum_{j,\vec{R};j',\vec{R}'} \langle j,\vec{R} | \vec{E}_0(\vec{r}) e\vec{r} | j', R' \rangle \, \cos(\omega_L t) \left(1 - \delta_{jj'} \right) \, \cos(\omega_L t) \, c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j',\vec{R}'} \, ,$$

mit Def. 4 kann dieser Ausdruck vereinfacht werden zu^{13}

$$\mathcal{H}_{El}^{Laser} = -\sum_{j \neq j', \vec{R}} \underbrace{\vec{E}_0(\vec{R}) \cos(\omega_L t)}_{\vec{E}(\vec{R}, t)} \vec{M}_{j, j'}^D c^{\dagger}_{j, \vec{R}} c_{j', \vec{R}} .$$
(1.12)

• \mathcal{H}_{ElPh}^{WW} : Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$\mathcal{H}_{ElPh}^{WW} = \sum_{\vec{k},j;\vec{q},l} M_{j;\vec{q},l}^{Ph} (b_{l,\vec{q}} + b_{l,-\vec{q}}^{\dagger}) a_{j,\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} a_{j,\vec{k}}$$
$$= \sum_{\vec{R},j;\vec{q},l} \gamma_{\vec{R};\vec{q},l}^{j} (b_{l,\vec{q}} + b_{l,-\vec{q}}^{\dagger}) c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}}$$
(1.13)

1.2.3 Das Wannierexziton

Charakterisierung des Wannierexzitons

Die Coulombwechselwirkung zwischen Elektronen im Leitungsband und Löchern im Valenzband führt zu "Bindungszuständen mit einem wasserstoffähnlichen

¹²Der bei der Definition von $T_{\vec{R}}^{j}$ eingeführte Laplaceoperator ist strenggenommen auf der diskreten Menge der Gittervektoren nicht definiert, diese wird aber ohnehin als kontinuierlich angenommen werden.

¹³Es gilt $\langle j, \vec{R} | \vec{E}_0(\vec{r}) e\vec{r} | j', R' \rangle \approx \vec{E}_0(\vec{R}) \langle j, \vec{R} | e\vec{r} | j', R' \rangle = \delta_{\vec{R}\vec{R}'} \vec{E}_0(\vec{R}) \vec{M}_{j,j'}^D$, weil sich lt. Voraussetzung das Feld innerhalb einer Einheitszelle nicht merklich ändern soll.

Spektrum" [Hak]. Elektronen und Löcher in diesen Zuständen nennt man *Ex*zitonen. Diese Quasiteilchen teilt man grob auf in Frenkel- und Wannierexzitonen, die im einen durch starke und im anderen Fall durch schwache Bindung charakterisiert sind. In dem in dieser Arbeit betrachteten GaAs sind Exzitonen charakterisiert durch kleine Bindungsenergie und großen Bohrradius¹⁴ [Egr]; es handelt sich also um *Wannierexzitonen*.

Vereinfachungen in \mathcal{H}_{El}^{WW}

Nach den Regeln der zweiten Quantisierung kann man den Anteil der Coulombwechselwirkung im Hamiltonoperator mit den Matrixelementen

$$V_{\lambda\mu\nu\rho}^{lnmr} \equiv \langle l, \vec{R}_{\lambda}^{-1} | \langle m, \vec{R}_{\mu}^{-2} | \left\{ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 | \vec{r_1} - \vec{r_2} |} \right\} | n, \vec{R}_{\nu}^{-2} \rangle | r, \vec{R}_{\rho}^{-1} \rangle$$
(1.14)

$$= \int d^3r \int d^3r' \ w_l^*(\vec{r} - \vec{R}_{\lambda}) w_m^*(\vec{r}' - \vec{R}_{\mu}) \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r'}|} w_n(\vec{r}' - \vec{R}_{\nu}) w_r(\vec{r} - \vec{R}_{\rho})$$

schreiben als

$$\mathcal{H}_{El}^{WW} = \frac{1}{2} \sum_{lnmr}^{\text{Bänder}} \sum_{\lambda\mu\nu\rho}^{\text{Orte}} V_{\lambda\mu\nu\rho}^{lnmr} c_{l,\lambda}^{\dagger} c_{m,\mu}^{\dagger} c_{n,\nu} c_{r,\rho} . \qquad (1.15)$$

Die Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander führt zu einer Vielzahl von Effekten, die man nicht alle zugleich wird berücksichtigt können. Deshalb werden nun im Folgenden einige Näherungen vorgenommen, wie sie in [Egr] diskutiert werden. Bei der Diskussion reicht es, sich auf ein Valenz- und ein Leitungsband zu beschränken, da in dieser Arbeit ohnehin ein solches Zweibandmodell behandelt werden soll. Es sind also die Bandindizes auf die Menge $\{L, V\}$ eingeschränkt. Im Zweibandfall ergeben sich für $V_{\lambda\mu\nu\rho}^{lnmr}$ 16 verschiedene Kombinationen von Bändern. Die zwei Kombinationen mit vier gleichen Indizes beschreiben Intrabandeffekte und sollen nicht weiter berücksichtigt werden, da sie bei kleinen Besetzungen des Leitungsbands ohnehin nicht wichtig sind. Acht weitere Terme ent-

halten je drei gleiche Bandindizes. Sie beschreiben l
t. Egri Coulombabschirmung und Polaronen. Die Abschirmung wird berücksichtigt, indem in den Matrixelementen $V_{\lambda\mu\nu\rho}^{LVVL}$ und $V_{\lambda\mu\nu\rho}^{VLLV}$
 ϵ_0 durch ϵ_{∞} ersetzt wird.

Weiter wird ausgenutzt, dass die Wannierfunktionen näherungsweise auf etwa eine Elementarzelle lokalisiert sind (siehe [Hak]), was dazu führt, dass mit (1.14) gilt

$$V^{lnmr}_{\lambda\mu\nu\rho} = \delta_{\lambda\rho}\delta_{\nu\mu}V^{lnmr}_{\lambda\mu\nu\rho}$$

und damit in (1.15) nur Terme bleiben, bei denen $\lambda = \rho$ und $\nu = \mu$ ist. Die auftretenden Größen $ew_l^*(\vec{r} - \vec{R}_{\lambda})w_r(\vec{r} - \vec{R}_{\rho})$ und $ew_m^*(\vec{r}' - \vec{R}_{\mu})w_n(\vec{r}' - \vec{R}_{\nu})$

¹⁴Verglichen mit der Größe einer Einheitszelle a und der Bandlücke, d.h. $E_B \ll E_{\text{Bandlücke}}$ und $a_B \ll a$.

1.3. ELEKTRON-PHONON-KOPPLUNG

kann man nun als Ladungsdichten auffassen und für $\mu \neq \lambda$ eine Multipolentwichklung von $V_{\lambda\mu\mu\lambda}^{lnmr}$ vornehmen. Terme mit $\mu = \lambda$ kommen ohne Berücksichtigung des Spins nicht vor und werden weiter nicht berücksichtigt. Wegen der Orthogonalität der Wannierfunktionen fallen Monopolterme weg, wenn nicht l = r und m = n gilt.

Wannierexzitonen sind charakterisiert durch große Bohrradien, weshalb nur Monopolterme berücksichtigt werden müssen. So ergibt sich für die Matrixelemente der Coulombwechselwirkung letztendlich

$$V_{\lambda\mu\nu\rho}^{lmnr} = \delta_{lr}\delta_{mn}\delta_{\lambda\rho}\delta_{\mu\nu}(1-\delta_{\lambda\mu})\underbrace{\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_{\infty}|\vec{R}_{\lambda}-\vec{R}_{\mu}|}}_{V_{\lambda\mu}}$$
(1.16)

und damit für den Operator \mathcal{H}_{El}^{WW}

$$\mathcal{H}_{El}^{WW} = \frac{1}{2} \sum_{lm}^{\text{Bånder}} \sum_{\lambda \neq \mu}^{\text{Orte}} V_{\lambda\mu} c_{l,\lambda}^{\dagger} c_{m,\mu}^{\dagger} c_{m,\mu} c_{l,\lambda} . \qquad (1.17)$$

Weitere Näherungen

Die Voraussetzung eines großen Bohrradius hatte im letzten Abschnitt die Vernachlässigung aller über die Monopolterme hinausgehenden Beiträge zur Konsequenz. Eine weitere Konsequenz ist die, dass die Näherung effektiver Massen sinnvoll bleibt¹⁵, da bei der Entwicklung der ausgedehnten Wellenfunktionen nur Blockzustände mit kleinen \vec{k} beitragen. Zudem bietet es sich an, die diskreten Gitterorte \vec{R} durch ein Kontinuum anzunähern, was schon mit (1.11) angesprochen wurde. Schließlich wurde der Unterschied der dielektrischen Konstanten von GaAs und AlAs vernachlässigt [Bán], die zur Herstellung der Heterostruktur dienen sollen (siehe 1.4).

1.3 Elektron-Phonon-Kopplung

1.3.1 Phononisches System und Parametrisierung

In Abschnitt 1.2 wurden die Anteile \mathcal{H}_{Ph} (1.2) und \mathcal{H}_{ElPh}^{WW} (1.6) des Hamiltonoperators eingeführt. Die Dispersionsrelationen $\omega_L(\vec{q})$, dargestellt in Abb. 1.2, werden in dieser Arbeit in grober Näherung behandelt: Wie üblich wird für akustische Zweige eine lineare Dispersion angesetzt, außerdem wird nur ein optischer Zweig mit konstanter Energie ω_{LO} berücksichtigt [Czy, St2]. Zwischen longitudinalen und transversalen Moden wird durch verschiedene Schallgeschwindigkeiten c_l und c_t unterschieden.

¹⁵Hier siehe wieder [Egr], woraus die Diskussion in diesem Abschnitt entlehnt ist.



Die dargestellten Phononmoden von GaAs werden nur näherungsweise behandelt. Es werden nur ein optischer Zweig (LO) mit konstanter Energie ω_{LO} und drei akustische Zweige (ein longitudinaler und zwei transversale) mit linearer Dispersion angesetzt. Anisotropien werden vernachlässigt.

Abbildung 1.2: Phononische Dispersionsrelationen von GaAs. Aus [Lan].

Das phononische System soll in dieser Arbeit nur in thermischer Besetzung durch Wechselwirkung mit Ladungsträgern eingehen. Die Wechselwirkung mit Phononen großer Wellenvektoren ist schwächer, als mit Phononen nahe des Γ-Punktes [Si1]. Obwohl also bei großen Temperaturen auch Phononenmoden großer Wellenvektoren angeregt sein mögen¹⁶, wird sich die Abweichung von der angenommenen, stark vereinfachten, Dispersion kaum bemerkbar machen.

Die Kopplungskonstanten $M_{j;\vec{q},l}^{Ph}$ (1.7) der Elektron-Phonon-Wechselwirkung können prinzipiell mikroskopisch berechnet werden, wie zum Beispiel in [Shu] beschrieben. In Fällen aber, in denen nur Phononen langer Wellenlängen wichtig sind, werden laut Mahan¹⁷ diese Matrixelemente parametrisiert. Bei dieser Parametrisierung werden Matrixelemente semiklassisch durch messbare Größen ausgedrückt und bekannten Effekten zugeordnet. Hier wird jeweils so vorgegangen, dass die Auslenkungen der Atomrümpfe aus den Ruhelagen in erster Ordnung berücksichtigt und durch Phononoperatoren ausgedrückt werden. Die verschiedenen Kopplungsarten werden in den folgenden Abschnitten kurz angedeutet und die parametrisierten Matrixelemente zitiert.

1.3.2 Kopplung durch das Deformationspotential

Als Deformationspotential wird die Änderung der Energie $\epsilon_j(\vec{k})$ (Def. 2) mit der Volumenänderung des Kristalls bezeichnet [Kit]. Die Deformationspotentialkonstante D_j bezeichnet die Änderung der Bandenergie $\epsilon_j(\vec{k})$ mit Druck und kann durch Messung der Bandenergien bei verschiedenen Drücken bestimmt werden [Mah]. Laut Mahan gilt

$$M_{DP,j,\vec{q}}^{Ph} = D_j \sqrt{\frac{\hbar}{\mathcal{V}2\rho\omega(\vec{q}, \mathrm{LA})}} \ |\vec{q}|.$$
(1.18)

 $^{^{16}}$ Siehe dazu Abb. 1.2 be
i $k_B\cdot$ 300 K \approx 25 meV \doteq 6,25 THz.

¹⁷Der Abschnitt zur Parametrisierung der Elektron-Phonon-Kopplung basiert auf [Mah], eine Beschreibung findet sich auch in [Uml].

Die Dichte ρ von GaAs ist bekannt, das Normierungsvolumen $\mathcal V$ des Kristalls geht in das Modell letztlich nicht ein.

Nur longitudinale akustische Moden (LA) koppeln über das Deformationspotential an die Ladungsträger.

1.3.3 Kopplung durch piezoelektrische Effekte

GaAs ist als III-V Halbleiter schwach piezoelektrisch. Erfahren piezoelektrische Festkörper eine Verzerrung, so bilden sich elektrische Felder [Kit]. In erster Näherung gilt laut [Uml] für die so erzeugte Polarisation \vec{P}_{PZ}

$$ec{P}_{PZ} = \mathcal{E} \cdot \mathcal{S}$$
 .

 \mathcal{S} bezeichnet den Verspannungstensor, der *piezoelektrische Tensor* \mathcal{E} hat bei GaAs (Zinkblendestuktur) nur eine unabhängige Komponente, e_{14} genannt.

Mahan führt eine Funktion $M_{\lambda}(\hat{q})$ ein und schreibt die Kopplungskonstanten als

$$M_{PE,\lambda,j,\vec{q}}^{Ph} = i \sqrt{\frac{\hbar}{\mathcal{V}2\rho\omega(\vec{q},\lambda)}} M_{\lambda}(\hat{q}) , \qquad (1.19)$$

wobei der Index λ für die longitudinale (LA) oder zwei transversalen (TA) akustischen Moden steht. Die durch $M_{\lambda}(\hat{q})$ berücksichtigte Anisotropie der Wechselwirkung soll in dieser Arbeit nicht weiter eingehen, es wird über die Winkel gemittelt.

Die Winkelabhängigkeit wird in [Uml] beschrieben, durch Mittelung erhalten Siantidis [Si1] und Krummheuer [Kru]

$$M_{\lambda}(\hat{q}) = \frac{2e_{14}e}{\epsilon_{s}\epsilon_{0}} \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{35}} & \text{für } \lambda = \text{LA} \\ \sqrt{\frac{2}{35}} & \text{für } \lambda = \text{TA} \end{cases}$$
(1.20)

1.3.4 Kopplung an optische Phononen

Anders als bei akustischen schwingen bei optischen Phononmoden die verschiedenartigen Atomrümpfe auch im Grenzfall verschwindender Wellenvektoren nicht in gleicher Phase [Krü]. Im Grenzfall ionischer Bindung sind die Ionen verschieden geladen und erzeugen durch solche Schwingungen eine Polarisation.

Die Kopplungkonstanten der Wechselwirkung von Elektronen mit solchen optischen Phononen¹⁸ können ausgedrückt werden durch die Dielektrizitätskonstanten bei großen (ϵ_{∞}) und kleinen Frequenzen (ϵ_s):

$$M_{LO,j,\vec{q}}^{Ph} = \sqrt{\frac{2\pi \mathrm{e}^2 \hbar \omega_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_s}\right)}{\mathcal{V}}} \frac{1}{|\vec{q}|}$$
(1.21)

¹⁸Die Wechselwirkung wird u.A. in den Lehrbüchern [Hak] und [Mah] beschrieben.

1.4 Modell des Quantendrahtes

1.4.1 Halbleiterheterostrukturen in Enveloppe-Näherung

Durch Methoden wie Molekularstrahlepitaxie (MBE) ist es möglich geworden, Strukturen in Größenordnungen von wenigen Nanometern herzustellen¹⁹. In Quantenpunkten zum Beispiel sind Elektronen auf einen sehr kleinen Raumbereich eingeschränkt und befinden sich wie in Atomen in diskreten Energiezuständen. Quantenfilme schränken die Bewegung nur in einer Raumrichtung ein, Quantendrähte in zwei Richtungen. In den Richtungen, in die die Bewegung eingeschränkt ist, können sich Elektronen bei kleinen Energien wieder nur in diskreten Zuständen befinden, so dass man schließlich von einem zwei- beziehungsweise eindimensionalen System spricht.

Bei der Modellierung solcher Strukturen stellt sich das Problem, dass hier strenggenommen nicht wie für Volumenkristalle eine Gitterstruktur vorausgesetzt werden kann. Es kann also weder das Blochtheorem verwendet, noch die Phonondispersion von Volumenkristallen übernommen werden. Um dennoch Heterostrukturen für Simulationen zugänglich zu machen, müssen einige Näherungen vorgenommen werden, die unter den Begriff *Enveloppe*-Näherung fallen [Bas]. Sie führen im Endeffekt dazu, dass elektronische Wellenfunktionen die des Volumenhalbleiters sind, ergänzt um einen Faktor, die Enveloppe-Funktion, der den Einfluss der Struktur beschreibt:

Wenn sich die Gitterstrukturen der verwendeten Materialien nicht stark unterscheiden, so kann man annehmen, dass sich die Dynamik der Atomrümpfe nicht stark von der des Substrats unterscheidet und verwendet also auch in der Struktur den Phonon-Hamiltonoperator eines Volumenkristalls. Nimmt man weiter an, dass die Strukturen räumlich sehr viel größer sind als die Gitterkonstanten, so wird man in Teilbereichen eines Materials für die elektronischen Zustände wieder die des entsprechenden Volumenfestkörpers ansetzen können. In Näherung effektiver Massen heißt das, dass sich die Energie der Elektronen schreiben lässt als $\epsilon_j(\vec{k}) = E_j(Material) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_j^*(Material)}$, dass sich also nur die Energien $E_j(Material)$ und die effektiven Massen je nach Material unterscheiden.

In dieser Arbeit wird ein Quantendraht aus AlAs/GaAs untersucht. Es liegen sowohl GaAs wie auch AlAs in Zinkblendestruktur vor und haben ähnliche Gitterkonstanten²⁰, doch unterscheiden sich die Bandlücken²¹ um rund 1,5 eV (siehe Abb. 1.3).

¹⁹Zur Herstellung solcher Strukturen siehe [Reit].

 $^{^{20}\}text{Die}$ Abweichung beträgt bei 300K rund 0,79 %. Diese und viele andere Materialparameter finden sich in [Vur].

²¹Es ist hier die Rede von der Energiedifferenz zwischen den Punkten Γ_6^L und Γ_8^V .



Die Bandlücken von AlAs und GaAs unterscheiden sich stark, die Gitterkonstanten nur wenig. Mittels MBE können Heterostrukturen aus diesen Materialien besonders gut hergestellt werden, da aufgrund sehr ähnlicher Gitterkonstanten kaum Wachstumsstörungen auftreten. Der Unterschied in den Bandlücken beträgt rund 1,5 eV.

Abbildung 1.3: Bandlücke am Γ -Punkt und Gitterkonstante für verschiedene III-V Legierungen. Aus [Vur].

1.4.2 Quantendrähte

Herstellung

Ein Quantendraht ist eine Heterostruktur, in der die Bewegung der Elektronen in zwei Raumrichtungen eingeschränkt ist. Eine mögliche Realisierung ist ein in AlAs eingefügter Draht aus GaAs auf einem GaAs-Substrat, wie er in dieser Arbeit beschrieben werden soll. Typischerweise werden Quantenfilme lithographisch weiterverarbeitet oder es wird selbstorganisiertes Wachstum von Drahtstrukturen ausgenutzt [Wu, Nit]. Eine Kombination aus beiden Varianten wird in [Cro] beschrieben, Abb. 1.4 zeigt Aufnahmen des hergestellten Quantendrahtes.

Idealer Quantendraht

Laut [Vur] beträgt die Differenz der Bandlücken von AlAs und GaAs 1,580 eV. Beim idealen Quantendraht vernachlässigt man ein Eindringen der Elektronen in das umschließende Material, setzt also in (1.5) E_j (AlAs) unendlich. Störungen an Grenzflächen zwischen den verschiedenen Materialien werden vernachlässigt. In Enveloppe-Näherung ist damit für einen runden idealen Quantendraht mit Radius D entlang der z-Achse

$$\mathcal{H}_{El}^{Gitter} \to \mathcal{H}_{El}^{Draht} = \sum_{j,\vec{R}} T_{\vec{R}}^{j} c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}'}$$

mit

$$T^{j}_{\vec{R}} = \begin{cases} E_{j}(\text{GaAs}) - \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}_{j}} \triangle_{\vec{R}} & \text{für } \sqrt{R^{2}_{x} + R^{2}_{y}} \le D\\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$
(1.22)



In einem in [Cro] beschriebenen lithographischen Prozess wird eine V-förmige Struktur in ein GaAs-Substrat geätzt. Im weiteren Wachstumsprozess werden auf diese Struktur eine Schicht Al_{0.33}Ga_{0.67}As, eine Schicht GaAs und eine abschließende Schicht $AI_{0,33}Ga_{0,67}As$ aufgebracht. Im unteren Bereich der V-Struktur bildet sich durch selbstorganisiertes Wachstum ein GaAs Quantendraht. Die obere Abbildung zeigt eine Elektronenmikroskop-Aufnahme des Drahtes im Querschnitt, in der unteren Abbildung sieht man in Aufsicht ein Lumineszenz-Signal des Quantendrahtes, aufgenommen nach Anregung mit einem Laser.

Abbildung 1.4: Aufnahmen eines Quantendrahtes. Aus [Cro].

Die Enveloppe im idealen Quantendraht

Die letzten zwei Anteile von^{22}

$$T_{\vec{R}}^{j} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{j}^{*}} \triangle_{R_{\parallel}} + \underbrace{\begin{cases} E_{j}(\text{GaAs}) - \frac{\hbar^{2}}{2m_{j}^{*}} \triangle_{\vec{R}_{\perp}} & \text{für } \sqrt{R_{x}^{2} + R_{y}^{2}} \le D\\ \infty & \text{sonst} \end{cases}}_{T_{\vec{R}_{\perp}}^{j}}$$

beschreiben die Form des Quantendrahtes. Unter den in Abschnitt 1.4.1 eingeführten Enveloppe-Funktionen versteht man die Lösungen $u_j(\vec{R}_\perp)^{23}$ der Eigenwertgleichung

$$T_{\vec{R}_{\perp}}^{j} u_{j}(\vec{R}_{\perp}) = \left\{ E_{j}^{\text{Env}} + E_{j}(\text{GaAs}) \right\} u_{j}(\vec{R}_{\perp})$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m_{j}^{*}} \bigtriangleup_{\vec{R}_{\perp}} \right) u_{j}(\vec{R}_{\perp}) &= E_{j}^{\text{Env}} u_{j}(\vec{R}_{\perp}) \\ u_{j}(\vec{R}_{\perp}) &= 0 \text{ für } \sqrt{R_{x}^{2} + R_{y}^{2}} \ge D \end{cases} \right\}, \quad (1.23)$$

 ${}^{22} \triangle_{\vec{R}_{\perp}} \equiv \partial_x^2 + \partial_y^2, \, \triangle_{R_{\parallel}} \equiv \partial_z^2$

 $^{^{23}}$ Es wird die gleiche Bezeichnung wie für die Blochfunktionen gewählt, da eine Verwechselung ausgeschlossen werden kann.

1.4. MODELL DES QUANTENDRAHTES

die analytisch bestimmt werden können. Gleichung (1.23) ist verwandt mit der Bessel*schen* Differentialgleichung. Nach Transformation auf Zylinderkoordinaten und Produktansatz bezüglich R_{\perp} und ϕ erhält man als Lösungen die Besselfunktionen J_n mit Phasenfaktoren²⁴:

$$\mathbf{u}_{j}^{ni}(\vec{R}_{\perp}) = \frac{e^{in\phi}}{N_{ni}} \mathbf{J}_{n}\left(\frac{\alpha_{ni}}{D}R_{\perp}\right)$$
(1.24)

mit den Eigenwerten

$$E_{j}^{ni} = \frac{\hbar^{2}}{2m_{j}^{*}} \left(\alpha_{ni}D\right)^{2}.$$
 (1.25)

Die Indizierung wird hier wie in [Abr, Si1] festgelegt. J_n ist die n. Besselfunktion, α_{ni} ihre i. Nullstelle. Mit der angegebenen Normierung bilden die $u_j(\vec{R}_{\perp})$ ein vollständiges Normalsystem bezüglich \vec{R}_{\perp} .

Wie in [Si1] untersucht wurde, ist die Grundzustandsenergie E_j^{01} bei dem im Weiteren betrachteten Quantendraht deutlich kleiner als alle übrigen, so dass davon ausgegangen werden kann, dass angeregte Drahtmoden nicht besetzt sein werden. Es wird also weiterhin *nur die Grundmode (n=0, i=1)* berücksichtigt.

1.4.3 Grenzflächenstörungen

Die Näherung eines idealen Quantendrahtes geht von einer idealen Grenzfläche zwischen den verwandten Materialien aus. Grenzflächenrauhigkeiten führen aber zu einer Streuung von Ladungsträgern, wie sie z.B. in [Pen, Zim] untersucht wurde und auch in dieser Arbeit berücksichtigt werden soll.

Benutzt wird hier ein einfaches Modell zur Beschreibung dieser, unter dem Namen *Interface Roughness* (IR) bekannten, Grenzflächenrauhigkeit, wie es in [And] vorgestellt und auch in anderen Arbeiten²⁵ verwendet wurde.

Man geht davon aus, dass die Dicke des Drahtes nicht konstant ist, sondern in Richtung parallel zum Draht (R_{\parallel}) schwankt. Für die Dickeschwankungen $\Delta(R_{\parallel})$ werden im allgemeinen eine gaußförmige Korrelation und ein verschwindender Mittelwert angesetzt. In dieser Arbeit geht es nicht primär um durch Unordnung verursachte Effekte, so dass eine noch einfachere, eine δ -förmige Korrelation, ver-

²⁴Eine ausführliche Herleitung findet sich in [Ha1, Si1], die Besselfunktionen und ihre Eigenschaften werden eingehend in [Abr] beschrieben.

²⁵In [Goo] findet sich eine experimentelle Überprüfung der bei [And] gemachten Annahmen, in [Bri, Thr, Zim] finden sich theoretische Untersuchungen zur Dephasierung aufgrund der Grenzflächenrauhigkeit, in [Pen] zur Mobilität von Elektronen in Quantenfilmen.

wendet wird:

$$D(R_{\parallel}) = D + \Delta(R_{\parallel}) \tag{1.26a}$$

$$\int dR'_{\parallel} \Delta(R'_{\parallel}) = 0 \tag{1.26b}$$

$$\int dR'_{\parallel} \,\Delta(R'_{\parallel}) \Delta(R'_{\parallel} - R_{\parallel}) \propto \delta(R_{\parallel}) \tag{1.26c}$$

Aufgrund von Dickeschwankungen variieren die Eigenenergien der Drahtmoden E_i^{ni} aus (1.25) entlang des Drahtes und es ergibt sich in erster Näherung

$$\delta E_j^{ni}(R_{\parallel}) = \frac{dE_j^{ni}}{dD} \Delta(R_{\parallel}) . \qquad (1.27)$$

Falls nur die Grundmode besetzt ist 26 kann man Streuung an der Grenzflächenrauhigkeit durch den Term

$$\mathcal{H}_{El}^{IR} = \sum_{j,\vec{R}} \delta E_j^{01}(R_{\parallel}) c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}} = \sum_{j,\vec{R}} \frac{dE_j^{01}}{dD} \Delta(R_{\parallel}) c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}}$$
(1.28)

berücksichtigen.

In die Ladungsträgerdynamik geht die Größe $\langle \Delta(R_{\parallel})\Delta(R'_{\parallel})\rangle$ ein. Wie in [Thr] wird analog zu (1.26c) eine δ -förmige Korrelation

$$\langle \Delta(R_{\parallel})\Delta(R'_{\parallel})\rangle \propto \delta(R_{\parallel}-R'_{\parallel})$$
 (1.29)

angesetzt.

Die Streuung an Grenzflächenstörungen kann mathematisch ganz analog zur Phononstreuung behandelt werden, was nach Fouriertransformation der $\Delta(R_{\parallel})$ sofort zu erkennen ist. Mit

$$\begin{split} \tilde{\Delta}(q) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dR_{\parallel} e^{iR_{\parallel}q} \Delta(R_{\parallel}) \\ \gamma_{j,\vec{R},q}^{IR} &\equiv \frac{1}{2} \frac{dE_{j}^{01}}{dD} e^{iqR_{\parallel}} \end{split}$$

gilt

$$\mathcal{H}_{El}^{IR} = \sum_{j,\vec{R},q} \gamma_{j,\vec{R},q}^{IR} \left(\tilde{\Delta}(q) + \tilde{\Delta}^{\dagger}(-q) \right) c_{j,\vec{R}}^{\dagger} c_{j,\vec{R}} \,. \tag{1.30}$$

Äquivalent zu (1.29) gilt

$$\langle \tilde{\Delta}(q)\tilde{\Delta}(q')\rangle \propto \delta(q+q').$$
 (1.31)

Die Analogie zur Phononstreuung ist rein formaler Natur, sie kann aber dazu ausgenutzt werden, die Streuung an Grenzflächenstörungen in kompakter Form zusammen mit der Elektron-Phonon-Wechselwirkung zu behandeln²⁷.

20

²⁶Siehe Abschnitt 1.4.2

 $^{^{27}\}mathrm{Es}$ ist darauf zu achten, dass sich die Vertauschungsrelationen der $\Delta(q)$ und $b_{l\vec{q}}$ unterscheiden.

1.5 Zeitentwicklung des Vielteichensystems

1.5.1 Heisenbergbild und Hierarchie der Bewegungsgleichungen

Durch den Hamiltonoperator wird die zeitliche Entwicklung des betrachteten Vielteilchensystems festgelegt. In Experimenten typischerweise betrachtete Größen sind Polarisation und Ladungsträgerdichten, die durch die Einteilchendichtematrizen

$$\langle c_{i\vec{R}_1}^{\dagger} c_{l\vec{R}_2} \rangle \tag{1.32}$$

bestimmt werden [Ax2, Ro1]. Für j = l =Leitungsband stehen die Ortsdiagonalen für Elektronendichten, für j = l =Valenzband für Lochdichten, für j=Valenz-, l =Leitungsband für exzitonische Übergänge. Nebendiagonale Matrixelemente spiegeln Phasenbeziehungen wieder.

Im $Heisenbergbild^{28}$ ist die zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten gegeben durch die Zeitentwicklung der Operatoren

$$i\hbar\partial_t A_H = [A_H, H_H] + i\hbar \left\{\partial_t A_S(t)\right\}_H . \tag{1.33}$$

Mit dem Hamiltonoperator, gegeben durch

$$\mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H}_{El}^{Gitter}}_{(1.11)} + \underbrace{\mathcal{H}_{Ph}^{Frei}}_{(1.2)} + \underbrace{\mathcal{H}_{El}^{Laser}}_{(1.12)} + \underbrace{\mathcal{H}_{ElPh}^{WW}}_{(1.13)} + \underbrace{\mathcal{H}_{El}^{WW}}_{(1.17)} + \underbrace{\mathcal{H}_{El}^{IR}}_{(1.28)}, \qquad (1.34)$$

ergibt sich für die Operatoren (1.32) eine Hierarchie von Bewegungsgleichungen, d.h. die Bewegungsgleichung für einen Operator aus n Fermioperatoren enthält Operatoren aus mehr als n Fermioperatoren²⁹. Wenn auch diese Hierarchie durch die endliche Anzahl der Elektronen im Festkörper begrenzt sein mag, so ist man doch gezwungen, diese an geeigneter Stelle zu unterbrechen.

1.5.2 Entwicklung nach Potenzen im Feld gemäß DCT

Eine Möglichkeit der Unterbrechung bietet die *Hartree-Näherung*, in der nach dem Schema

$$\langle AB \rangle \approx \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Erwartungswerte von zwei Operatoren entkoppelt werden [Ax2]. Der Ununterscheidbarkeit der Teilchen wird in der Erweiterung auf die sog. *Random Phase Approximation* (RPA) Rechnung getragen [Hak, Czy]. Wie Axt in [Ax2] schreibt, wird im Grenzfall verschwindender Wechselwirkung zwischen den Teilchen die RPA exakt, es werden aber durch Wechselwirkung verursachte Korrelationen nur

²⁸Zu Quantenmechanischen Bildern siehe z.B. [Coh, Nol, St1].

²⁹Die Hierarchie ist ähnlich zur Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood Hierarchie.

näherungsweise berücksichtigt. Entkopplungsverfahren wie die RPA bergen das Problem, dass dort nicht klar ist wie groß vernachlässigte Terme sind. Das in [Ax2] von Axt eingeführte Schema zur ,,*Durch die Dynamik bestimmten Entkopplung*^{"30} bietet einen anderen Zugang. Unter (unter anderem) der Voraussetzung, dass vor Einsetzen des elektrischen Feldes (d.h. vor Eintreffen eines Laserpulses) alle Valenzbänder voll und Leitungsbänder leer sind³¹, sind lt. Axt alle Korrelationen durch das elektrische Feld verursacht und es kann die Ordnung der Erwartungswerte von Operatoren im elektrischen Feld bestimmt werden. Die im vorigen Abschnitt besprochene Hierarchie kann also nach Ordnungen im elektrischen Feld geordnet, entsprechend abgebrochen und damit die Dynamik des Ladungsträgersystems bis zu einer bestimmten Ordnung im Feld exakt gelöst werden.

Es wird im Folgenden die *Elektron-Loch-Darstellung* verwendet, in der für alle Valenzbänder α

$$d_{\alpha,\vec{R}} \equiv c^{\dagger}_{\alpha,\vec{R}} \text{ und } d^{\dagger}_{\alpha,\vec{R}} \equiv c_{\alpha,\vec{R}}$$
(1.35)

gesetzt wird.

Satz über dynamisch bestimmte Entkopplung³²

Sei A_n ein normalgeordneter n-Punkt-Operator bezüglich Elektron-Loch-Darstellung (1.35). Es bezeichne n_c (n_d) die Anzahl der Elektron- (Loch-) Operatoren, die in \hat{A}_n als Faktoren enthalten sind, so dass gilt $n = n_c + n_d$. Man betrachte ein System, dessen Zeitentwicklung durch den Hamiltonoperator (1.34) bestimmt ist und das sich zu einem beliebig vorgegebenen Zeitpunkt vor dem Eintreffen äußerer Pulse im Grundzustand gefüllter Valenz- und leerer Leitungsbänder befindet. Dann folgt

$$\langle \hat{A}_n \rangle = \mathcal{O}(m) \quad \text{für } m \ge \max\{n_c, n_d\}.$$

In zweiter Ordnung im Feld kommen die folgenden Operatoren zum tragen, wobei wieder die Elektron-Loch-Darstellung verwendet werden soll:

Definition 5. Operatoren mit Erwartungswerten bis $\mathcal{O}(E^2)$

 $\bullet \ Operatoren$

| Elektronendichte | \hat{C}_{12}^{ab} | $\equiv c^{\dagger}_{a\vec{B}_{1}}c_{b\vec{R}_{2}}$ | |
|------------------------|--|---|--------|
| Lochdichte | $\hat{\mathrm{D}}_{12}^{lphaeta}$ | $\equiv d_{\alpha\vec{R}_1}^{\dagger} d_{\beta\vec{R}_2}$ | (1.26) |
| exzitonischer Übergang | $\hat{\mathbf{Y}}_{12}^{\alpha b}$ | $\equiv d_{\alpha\vec{R}_1} c_{b\vec{R}_2}$ | (1.30) |
| exzitonische Besetzung | $\hat{\mathbf{N}}_{1234}^{a\beta\gamma d}$ | $\equiv c^{\dagger}_{a\vec{R}_1} d^{\dagger}_{\beta\vec{R}_2} d_{\gamma\vec{R}_3} c_{d\vec{R}_4}$ | |

• Der Erwartungswert eines Operators \hat{A} wird mit A bezeichnet.

³⁰Das Schema ist bekannt unter dem Namen *dynamics controlled truncation* (DCT). ³¹Nicht vereinbar ist diese Annahme z.B. mit Dotierungen.

 $^{^{32}}$ Der Satz ist [Ax2] entlehnt.

Exakt bis zur vierten Ordnung im Feld können die Ladungsträgerdichten durch Summen über die exzitonischen Besetzungen ausgedrückt werden [Ax2]:

Spurrelationen

$$C_{12}^{ab} = \sum_{\nu \vec{R}_j} N_{1jj2}^{a\nu\nu b} + \mathcal{O}(E^4)$$
(1.37)

$$D_{12}^{ab} = \sum_{c\vec{R}_j} N_{j12j}^{c\alpha\beta c} + \mathcal{O}(E^4)$$
(1.38)

Im Grenzfall verschwindender Elektron-Phonon-Wechselwirkung kann die exzitonische Besetzung durch exzitonische Übergänge ausgedrückt werden [Ax2]:

Faktorsatz

$$N_{1234}^{a\beta\gamma d} = Y_{21}^{\beta a*} Y_{34}^{\gamma d} + \mathcal{O}(E^4)$$
(1.39)

1.6 Transport und Boltzmanngleichung

1.6.1 Diffusion und ballistischer Transport

Die *Diffusion* einer Gassorte in einer anderen definiert Feynman³³ als die Ausbreitung des speziellen Gases, dominiert durch Stöße mit Molekülen des Hintergrundgases. *Ballistischer Transport* auf der anderen Seite ist die Ausbreitung eines Ensembles von Teilchen bei Abwesenheit von Streuung.

In dieser Arbeit geht es nicht um die Ausbreitung von Gasen, es soll die Dynamik von Exzitonen behandelt werden, die durch eine (in Kap. 2 explizit hergeleitete) *Boltzmanngleichung* bestimmt ist³⁴. Der Begriff der Diffusion, ursprünglich festgemacht an in Gasen oder Flüssigkeiten suspendierten Teilchen, kann allerdings problemlos verallgemeinert werden.

Diffusiver Transport

Es sei ein Ensemble von Teilchen definiert durch eine Ortsverteilungsfunktion n(r,t), die auf die Teilchenzahl N normiert sei. Erfolgt diffusiver Transport dieser Teilchen, so ist er durch die Fick*schen* Gesetze bestimmt [Vog]:

$$j = -D\partial_r n \tag{1.40a}$$

$$\dot{n} = -\partial_r j = D\partial_r^2 n \tag{1.40b}$$

Die analytische Lösung der Gleichung (1.40b) mit der Anfangsbedingung

$$n(r,t=0) = N\delta(r)$$

³³Siehe dazu [Fey]

³⁴Zu Diffusion und ballistischem Transport siehe auch [Vol].

lautet

$$n(r,t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-\frac{r^2}{4Dt}}}{\sqrt{t}},$$

wie sie, samt Herleitung der Fick*schen* Gesetze, in [Ein] zu finden ist. Mit dieser Lösung leitet dort Einstein die Beziehung

$$\langle r^2 \rangle_D \equiv \int dr \ r^2 n(r) = 2Dt$$
 (1.41)

her, die unter dem Namen *Einstein-Relation* bekannt ist. Im Weiteren soll an der Proportionalität von $\langle r^2 \rangle$ zur Zeit diffusiver Transport festgemacht werden.

Ballistischer Transport

Für ballistischen Transport, der als Transport von Teilchen bei Abwesenheit von Streuung definiert ist, gilt nicht die Einstein-Relation. Die hier geltende Zeitabhängigkeit von $\langle r^2 \rangle$ kann aber leicht bestimmt werden:

Ein Ensemble von Teilchen gleicher Masse m, gegeben durch eine Verteilungsfunktion f(r,p,t), wird ohne Streuung klassisch beschrieben durch die *Liouville*-Gleichung [Nol]

$$\frac{d}{dt}f(r,p,t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m}\frac{\partial f}{\partial r} = 0, \qquad (1.42)$$

womit also

$$f(r, p, t) = f(r - \frac{p}{m}t, p)$$

gilt. Für das mittlere Ortsquadrat gilt damit unter Annahme einer im Impuls symmetrischen Verteilung

$$\langle r^2 \rangle_B \equiv \int dr \int dp \ r^2 f(r - \frac{p}{m}t, p)$$

$$= \int dr' \int dp \ \left(r'^2 + 2 \ r \frac{p}{m}t + \left(\frac{p}{m}t\right)^2\right) f(r', p)$$

$$= \langle r^2 \rangle_0 + \left(\int dr' \int dp \ \left(\frac{p}{m}\right)^2 f(r', p)\right) t^2$$

$$= \langle r^2 \rangle_0 + \frac{2}{m} \langle \mathbf{E}_{kin} \rangle \ t^2 \ .$$

$$(1.43)$$

1.6.2 Näherungen und Charakterisierung des Transports

Die Dynamik des in dieser Arbeit behandelten Ensembles von Exzitonen wird beschrieben durch einee lineare Boltzmanngleichung. Anhand dieser Gleichung soll in diesem Abschnitt der Transport näher untersucht werden und es sollen in verschiedenen Näherungsstufen Kriterien zur Charakterisierung des Transports aufgestellt werden.

Boltzmanngleichung

Die Verteilungsfunktion $f(\nu, k, r)$ bezeichne den Zustand des betrachteten Ensembles, wobei ν einen inneren Freiheitsgrad nummeriert, r den Ort, k eine Art Impuls angibt³⁵. Die Normierung der Verteilungsfunktion auf die Teilchenzahl sei gegeben durch

$$\sum_{\nu} \int dr \int dk \ f(\nu, k, r) = N,$$

sie genüge der Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\nu,k,r) + ck\frac{\partial}{\partial r}f(\nu,k,r) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}}$$
(1.44)

 mit

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{stoß}} = \sum_{\nu'} \int dk' \left\{ \tilde{R}(\nu, k, \nu', k') f(\nu', k', r) - \tilde{R}(\nu', k', \nu, k) f(\nu, k, r) \right\} ,$$
(1.45)

einer *Boltzmanngleichung*³⁶, wie sie in [Ha2] und [Ku1, Ku2] behandelt wird. Für die Streumatrizen \tilde{R} gelte

$$\tilde{R}(\nu, k, \nu', k') = e^{\frac{\epsilon(\nu', k') - \epsilon(\nu, k)}{k_B T}} \tilde{R}(\nu', k', \nu, k) , \qquad (1.46)$$

so dass der Stoßterm zur Relaxation des Ensembles ins thermische Gleichgewicht führt³⁷, in dem sich die Verteilungsfunktion schreiben lässt als

$$f_0(\nu, k, r) = n(r) \ e^{\frac{-\epsilon(\nu, k)}{k_B T}}.$$
 (1.47)

Die Funktion $\epsilon(\nu, k)$ steht für eine vom inneren Freiheitsgrad und vom Impuls abhängige Energie.

Relaxationszeitnäherung

Gleichung (1.44) ist mit Stoßterm außerordentlich komplex, weshalb man in vielen Fällen annimmt, die Verteilung unterscheide sich nur sehr wenig von der des

$$\frac{f(\nu',k',r)}{f(\nu,k,r)} = \frac{R(\nu',k',\nu,k)}{R(\nu,k,\nu',k')} = e^{\frac{\epsilon(\nu,k) - \epsilon(\nu',k')}{k_B T}} \,.$$

 $^{^{35}\}rm{Die}$ genaue Bedeutung der verwendeten Größen ist an dieser Stelle nicht wichtig. Sie wird an späterer Stelle eindeutig definiert werden.

³⁶Der Stoßterm beschreibt Stöße der Exzitonen mit Phononen und Grenzflächenrauhigkeit. An dieser Stelle ist es nicht notwendig, ihn genauer zu spezifizieren.

³⁷Die sogenannte *Detaillierte Bilanz* für Mastergleichungen wird ausführlich in [Ha2] besprochen. Im Gleichgewicht gilt mit (1.45), (1.46) und der Bedingung $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} = 0$

thermischen Gleichgewichts (1.47) [Ku1, Ha2] und schreibt

$$f(\nu, k, r) = f_0(\nu, k, r) + \delta f(\nu, k, r) , \qquad (1.48)$$

wobei $f_0(\nu, k, r) \gg \delta f(\nu, k, r)$ gelten soll. Der Stoßterm wird ersetzt durch den Ausdruck

$$\left(\frac{\partial f(\nu, k, r)}{\partial t}\right)_{\text{StoB}} = -\frac{\delta f(\nu, k, r)}{\tau(\nu, k)}, \qquad (1.49)$$

was der Annahme entspricht, das System nähere sich exponentiell dem Gleichgewichtszustand. Für den Stoßterm (1.45) heißt diese Näherung, dass der Reinstreuterm von

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} \stackrel{(1.46)}{=} \sum_{\nu'} \int dk' \left\{ \overbrace{-\tilde{R}(\nu',k',\nu,k)\delta f(\nu,k,r)}^{\text{Rausstreu-}} + \overbrace{\tilde{R}(\nu,k,\nu',k')\delta f(\nu',k',r)}^{\text{Reinstreuterm}} \right\} \\ \approx \sum_{\nu'} \int dk' \left\{ -\tilde{R}(\nu',k',\nu,k)\delta f(\nu,k,r) \right\} \equiv -\tau(\nu,k)\delta f(\nu,k,r) \ (1.50)$$

vernachlässigt wird.

Zusammen mit (1.44) ergeben (1.48) und (1.49) in erster Näherung

$$\delta f(\nu, k, r) = -\tau(\nu, k) \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial t} + ck \frac{\partial f_0}{\partial r} \right\} .$$
(1.51)

Bezug zur Einsteinrelation

Über die Teilchenstromdichte kann in dieser Näherung mit

$$j(r) \equiv \sum_{\nu} \int dk \, \underbrace{\stackrel{ck}{\nu} f(\nu, k, r)}_{\substack{(1.48)\\ =}} \sum_{\nu} \int dk \, ck \, \{\delta f(\nu, k, r)\}$$

$$\stackrel{(1.49)}{=} -\sum_{\nu} \int dk \, ck \, \tau(\nu, k) \, \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial t} + ck \frac{\partial f_0}{\partial r} \right\}$$

$$\stackrel{(1.47)}{=} -\sum_{\nu} \underbrace{\left\{ \int dk \, (ck)^2 \, \tau(\nu, k) \frac{f_0(\nu, k, r)}{n(r)} \right\}}_{D_{\nu}} \frac{\partial n(r)}{\partial r} \qquad (1.52)$$

ein direkter Bezug zum ersten Fick*schen* Gesetz (1.40a) und somit durch Ausnutzung des Teilchenerhalts³⁸ zur Einstein-Relation (1.41) geschaffen werden. Es gilt also

$$D^* \equiv \sum_{\nu} D_{\nu} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle r^2 \rangle , \qquad (1.53)$$

 ${}^{38}\left\{\frac{\partial j}{\partial r} + \frac{\partial n}{\partial t}\right\} = 0$

1.7. WIGNERDARSTELLUNG

bei konstanter Relaxationszeit $\tau(\nu, k) \equiv \tau$

$$\tau \langle \mathcal{E}_{\rm kin} \rangle \propto \sum_{\nu} D_{\nu} = \frac{d}{dt} \langle r^2 \rangle .$$
 (1.54)

1.7 Wignerdarstellung

1.7.1 Die Wignerfunktion

Einführung der Wignerfunktion

Für inhomogene Systeme bietet die *Wignerdarstellung*, wie sie von E. Wigner vorgeschlagen wurde, den Vorteil, dass sich Erwartungswerte zu orts- und impulsabhängigen Größen auf einfache und anschauliche Weise berechnen lassen. Dieser Abschnitt soll die in [Wig] dargestellten Überlegungen wiedergeben, um so die später angewandte Transformation auf Wignerdarstellung zu motivieren.

In der klassischen Mechanik ist ein Vielteilchensystem bestimmt durch eine Verteilungsfunktion $f(\vec{r}, \vec{p})^{39}$, Erwartungswerte zu einer Größe $A(\vec{r}, \vec{p})$ sind über eine Mittelung

$$\langle A(\vec{r},\vec{p})\rangle_{\text{klassisch}} \equiv \int d^n r \int d^n p \ A(\vec{r},\vec{p}) f(\vec{r},\vec{p})$$
(1.55)

gegeben. Die Kenntnis der Verteilungsfunktion $f(\vec{r}, \vec{p})$ bietet also einen sehr direkten, anschaulichen Zugang zu allen wichtigen Systemeigenschaften. Sie ist Lösung der Liouville-Gleichung.

In der quantenmechanischen Orts- oder Impulsdarstellung⁴⁰ sind für einen reinen Zustand $\Psi(\vec{r})$ bzw. $\tilde{\Psi}(\vec{p})$ die Erwartungswerte zur Observablen $\hat{A}(\vec{r},\vec{p})$ gegeben durch

$$\langle \hat{A}(\vec{r},\vec{p}) \rangle_{\rm QM} \equiv \int d^n r \ \Psi^*(\vec{r}) \hat{A}\left(\vec{r},-i\hbar\partial_{\vec{r}}\right) \Psi(\vec{r}) = \int d^n p \ \tilde{\Psi}^*(\vec{p}) \hat{A}\left(i\hbar\partial_{\vec{p}},\vec{p}\right) \tilde{\Psi}(\vec{p}) \ . \tag{1.56}$$

Falls die Observable \hat{A} nur vom Ort abhängig ist, hat (1.56) die anschaulichere Form

$$\langle \hat{A}(\vec{r}) \rangle_{\rm QM} = \int d^n r \ A(\vec{r}) \underbrace{\Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})}_{\rho(\vec{r})} ,$$

in der $\rho(\vec{r})$ als Ortsverteilungsfunktion interpretiert werden kann. Dasselbe gilt ganz analog für Observablen $\hat{A}(\vec{p})$.

Es ist, wie erwähnt, wünschenswert, eine Darstellung zu finden, in der Erwartungswerte zu sowohl von Orten als auch Impulsen abhängigen Observablen

³⁹Es stehen \vec{r} und \vec{p} für Orte (x_1, x_2, \dots, x_n) und Impulse (p_1, p_2, \dots, p_n) .

⁴⁰Zu Darstellungen siehe Lehrbücher wie [Coh, Nol, St1].

 $\hat{A}(\vec{r},\vec{p})$ wie in der klassischen Mechanik mit Hilfe einer Verteilungsfunktion $P(\vec{r},\vec{p})$ berechnet werden können⁴¹. Die in [Wig] vorgeschlagene Funktion⁴²

$$P(\vec{r},\vec{p}) \equiv \left(\frac{1}{2\hbar\pi}\right)^n \int d^n\xi \ e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\xi}\vec{p}} \ \Psi^*\left(\vec{r}+\frac{\vec{\xi}}{2}\right) \Psi\left(\vec{r}-\frac{\vec{\xi}}{2}\right) \ , \tag{1.57}$$

die Wignerfunktion genannt wird, erfüllt mit⁴³

$$\int d^n r \ P(\vec{r}, \vec{p}) = \tilde{\Psi}^*(\vec{p}) \tilde{\Psi}(\vec{p}) \quad \text{und} \quad \int d^n p \ P(\vec{r}, \vec{p}) = \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})$$

die geforderte Eigenschaft

$$\langle \hat{A}(\vec{r},\vec{p}) \rangle_{\rm QM} = \int d^n r \int d^n p \ A(\vec{r},\vec{p}) P(\vec{r},\vec{p}) \ , \tag{1.58}$$

falls sich $A(\vec{r}, \vec{p})$ als Summe $A_r(\vec{r}) + A_p(\vec{p})$ schreiben lässt.

Eigenschaften der Wignerfunktion

Wie schon angedeutet hat die Wignerfunktion $P(\vec{r}, \vec{p})$ nicht alle Eigenschaften einer Verteilungsfunktion, steht aber dennoch in engem Zusammenhang zur klassischen Verteilungsfunktion (1.55). Wie Wigner zeigt, geht $P(\vec{r}, \vec{p})$ im klassischen Grenzfall in die klassische Verteilungsfunktion $f(\vec{r}, \vec{p})$ über, die Bewegungsgleichung für $P(\vec{r}, \vec{p})$ weicht erst in dritter Ordnung von \hbar von der klassischen Liouville-Gleichung ab. Die Wignerfunktion ist laut Definition reell, kann aber negative Werte annehmen.

1.7.2**Die Wignertransformation**

Im Allgemeinen befinden sich quantenmechanische Systeme in gemischten Zuständen, die durch eine Dichtematrix $\hat{\rho}$ festgelegt werden. Erwartungswerte zu Observablen \hat{A} werden über

$$\langle \hat{A} \rangle_{\rm QM} \equiv \operatorname{Sp}\left(\hat{A}\hat{\rho}\right) = \int dr \int dr' \, \langle r|\hat{A}|r'\rangle \langle r'|\hat{\rho}|r\rangle \equiv \int dr \int dr' \, A_{rr'}\rho_{r'r}$$

gebildet. Die im vorigen Abschnitt eingeführte Transformation auf die Wignerdarstellung, die der Definition nach eine Fouriertransformation bezüglich des Relativortes r' - r ist, lässt sich durch die Definition

$$\tilde{A}(R,k) \equiv \frac{1}{2\pi} \int d\xi \ e^{-i\xi k} A_{R+\frac{\xi}{2},R-\frac{\xi}{2}}$$
(1.59)

⁴¹Da Orte und Impulse nicht vertauschen und damit kein System von gemeinsamen Eigenzuständen existiert, können wir nicht erwarten, dass eine solche Funktion alle Eigenschaften einer Verteilungsfunktion wie $f(\vec{r}, \vec{p})$ erfüllt.

⁴²In [Wig] ist die Fouriertransformation mit entgegengesetztem Vorzeichen definiert. Hier soll gelten $\Psi(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\hbar\pi}\right)^n \int d^n p \ e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\xi}\vec{p}}\tilde{\Psi}(\vec{p}).$ ⁴³Die Herleitung erfolgt über die Regeln für Fouriertransformationen. Dazu siehe [Bron].

1.8. ENSEMBLE-MONTE-CARLO METHODE

auf Matrizen verallgemeinern. Durch elementare Umformungen erhält man

$$\langle \hat{A} \rangle_{\rm QM} = \int dR \int dk \left\{ 2\pi \tilde{A}(R,k) \right\} \tilde{\rho}(R,k) .$$
 (1.60)

Die transformierte Dichtematrix entspricht also der Wignerfunktion des vorigen Abschnitts, denn es ergibt sich für $\hat{A} = \hat{A}_r(r) + \hat{A}_k(k)$

$$\left\{2\pi\tilde{A}(R,k)\right\} = \langle R \mid \hat{A}_r \mid R \rangle + \langle k \mid \hat{A}_k \mid k \rangle \equiv A_r(R) + A_k(k) .$$
(1.61)

Wie gezeigt, lassen sich mit der transformierten Dichtematrix $\tilde{\rho}(R, k)$ die Erwartungswerte sowohl von Impuls- als auch von Ortsobservablen auf anschauliche Art berechnen. Weiter wird es möglich sein, die in 2.3 und 2.4.2 hergeleitete Bewegungsgleichung für die Dichte inkohärenter Exzitonen auf eine Boltzmanngleichung zu transformieren (siehe dazu Abschnitt 2.7), die für eine numerische Simulation besonders zugänglich ist (nächster Abschnitt).

1.8 Ensemble-Monte-Carlo Methode

1.8.1 Monte-Carlo Methoden

Seit leistungsstarke Rechner zur Verfügung stehen, werden Monte-Carlo-Methoden in starkem Umfang benutzt, um verschiedenste Systeme zu simulieren [Cep, Spa, Ja1]. Im Gegensatz etwa zu Quanten-Monte-Carlo Methoden zur Berechnung von Grundzuständen [Fou] bieten Ensemble-Monte-Carlo (EMC) Methoden einen Zugang zu zeitabhängigen Problemen. In dieser Arbeit wird eine solche Methode gewählt, in früheren Arbeiten wurden letztere insbesondere auch zur Untersuchung von Exzitonerzeugung [Sel, Com] und Exzitontransport [Zh3, Tak] benutzt.

Der Algorithmus existiert in verschiedenen Modifikationen (z.B. als gewichtete Methode [Ro2] oder zur Untersuchung von kohärenten Prozessen [Ku4]). In dieser Arbeit wurde eine erweiterte Form des EMC benutzt, in der eine Gleichung der Form (1.44), die in Kap. 2 hergeleitete Gleichung (2.59), gelöst werden soll.

Die verwendete Methode wird in diesem Abschnitt erläutert: Zunächst werden die mathematischen Grundlagen, dann der Algorithmus dargelegt.

1.8.2 Mathematische Betrachtung

Methode, Integration

Monte-Carlo Methoden bieten einen statistischen Zugang zur Lösung mathematischer Probleme. Als grundlegendes Beispiel können hochdimensionale Integrale effizient gelöst werden. Bei der Integration nach der klassischen Simpson*schen*
Regel zum Beispiel hat der Quadraturfehler die Ordnung $M^{-4/d}$, mit M als Anzahl der Gitterpunkte und dals Dimension des Integrals. Der zentrale Grenzwertsatz besagt, dass mit einer Monte-Carlo-Quadratur der Fehler mit $\frac{1}{\sqrt{M}}$ geht, unabhängig von der Dimension [Fou].

Zur Lösung von Boltzmanngleichungen mit stochastischen Methoden sind in [Wag] ein kurzer geschichtlicher Abriss und ein Beweis der Konvergenz einer numerischen Lösung mit *direkter MC Simulation*⁴⁴ gegeben.

Verteilungsfunktionen

Boltzmanngleichungen (1.44)

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\nu,k,r) = -ck\frac{\partial}{\partial r}f(\nu,k,r) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Quelle}}$$
(1.62)

beschreiben die Dynamik von Ensembles einer großen Zahl von Teilchen, definiert durch die Verteilungsfunktion $f(\nu, k, r)$. Im Monte-Carlo Ansatz wird die Näherung eines Kontinuums von Teilchen rückgängig gemacht und die Dynamik durch ein *Test*ensemble stochastisch simuliert. In diesem Sinne bieten Monte-Carlo Methoden einen sehr direkten und anschaulichen Zugang zu diesen Gleichungen. Mathematisch wird die Approximation durch

$$f(\nu, k, r) \equiv f(x, r) \approx \sum_{i=1}^{N_{MC}} \frac{1}{N_{MC}} \,\delta(x - x_i)\delta(r - r_i)$$
 (1.63)

ausgedrückt⁴⁵. Anschaulich heißt das, dass man die Verteilung durch eine Verteilung von N_{MC} einzelnen "Teilchen" $m_i(x_i, r_i)$ nähert, was bei Erwartungswerten besonders deutlich wird:

$$\langle A(x,r)\rangle \equiv \int dx \int dr \ f(x,r) \ A(x,r) \stackrel{(1.63)}{\approx} \sum_{i=1}^{N_{MC}} \frac{1}{N_{MC}} A(x_i,r_i)$$
(1.64)

Auf einem Rasterelement Δ_x , Δ_r gilt für die Besetzungszahl⁴⁶

$$P_{\Delta_x,\Delta_r} \equiv \int_{\Delta_x} dx \int_{\Delta_r} dr \ f(x,r) \stackrel{(1.63)}{\approx} \sum_{i=1}^{N_{MC}} \frac{1}{N_{MC}} \sigma(x_i \in \Delta_x \land r_i \in \Delta_r) \ . \tag{1.65}$$

Dynamik

Es gilt, die Differentialgleichung (1.62) für die approximierte Verteilungsfunktion aufzustellen, also eine Regel für die zeitliche Entwicklung des Testensembles

⁴⁴Bei der DSMC handelt es sich um die hier Ensemble MC Methode genannte Methode.

⁴⁵Der Einfachheit halber wird hier - im Vorgriff - $x \equiv (\nu, k)$ definiert.

⁴⁶Wie üblich bezeichnet $\sigma(A) \equiv 1$ falls A wahr, 0 sonst.

1.8. ENSEMBLE-MONTE-CARLO METHODE

 $\{m_i | i = 1 \dots N_{MC}\}$ herzuleiten. Generell werden Streu- und Erzeugungswahrscheinlichkeiten aus (1.62) mit Hilfe eines Zufallszahlengenerators nachempfunden. Die Umsetzung ist in [Ja1] ausführlich beschrieben.

Die Normierung von f(x,r,t) sei zeitlich veränderlich, also

$$\int_{\Delta_x} dx \int_{\Delta_r} dr \ f(x, r, t) = N(t) \ ,$$

wobei allerdings die Gesamtzahl monoton steigend sei⁴⁷. Dementsprechend soll das Testensemble eine steigende Zahl $N_{MC}(t)$ von "Teilchen" beinhalten.

Auf einem Raster Δ_x , Δ_r gilt laut (1.65) und (1.62)

$$\frac{\partial}{\partial t}P_{\Delta_x,\Delta_r} = \int_{\Delta_x} dx \int_{\Delta_r} dr \left\{ -ck \frac{\partial}{\partial r} f(\nu, k, r) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Quelle}} \right\}.$$
 (1.66)

Führt man eine Zeitdiskretisierung (Δ_t) ein und löst (1.62) explizit in der Zeit, so können die Terme auf der rechten Seite von (1.66) leicht auf das Testensemble übertragen werden. Als Anfangsverteilung sei $f(x, r, t = 0) \equiv 0$ vorgegeben, damit enthalte auch das Testensemble keine "Teilchen", also $N_{MC}(t = 0) = 0$.

• Quelle:

$$P_{\Delta_x,\Delta_r}(t+\Delta_t) = P_{\Delta_x,\Delta_r}(t) + \Delta_t \int_{\Delta_x} dx \int_{\Delta_r} dr \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Quelle}} (t)$$

die Besetzungszahlen sind anzupassen, indem neue Testteilchen gemäß der Quellverteilung zufällig erzeugt werden.

• Streuterm der Form (1.45): Entsprechend

$$\Delta_{t} \int_{\Delta_{x}} dx \int_{\Delta_{r}} dr \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} = \Delta_{t} \int_{\Delta_{x}} dx \int_{\Delta_{r}} dr \int_{x'} dx' \left\{\tilde{R}_{x,x'}f(x',r) - \tilde{R}_{x',x}f(x,r)\right\}$$
$$\approx \frac{\Delta_{t}}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} \left\{\underbrace{\int_{\Delta_{x}} dx \ \tilde{R}_{x,x_{i}}}_{\text{Rein-}} - \underbrace{\int_{X'} dx' \ \tilde{R}_{x',x_{i}}\sigma(x_{i} \in \Delta_{x})}_{\text{Rausstreuterm}}\right\}$$
$$\Rightarrow P(\Delta_{x}, \text{Streu}) = \Delta_{t} \int dx' \ \tilde{R}_{x',x}, \quad P(\Delta x \to \Delta_{y}) = \Delta_{t} \int_{\Delta_{y}} dx' \ \tilde{R}_{x',x}$$
(1.67)

streut mit einer Wahrscheinlichkeit $P(\Delta_{x_i}, \text{Streu})$ ein Teilchen $m_i(x_i, r_i)$, jeweils mit der Wahrscheinlichkeit $P(\Delta_{x_i} \to \Delta_y)$ auf ein Rasterelement Δ_y . Der Ort r_i bleibt unverändert. Indem das gesamte Testensemble durchlaufen wird, wird der Reinstreuterm automatisch richtig berücksichtigt.

,

⁴⁷Diese Annahme ist nicht zwingend, allerdings im hier betrachteten Problem gegeben.

• **Transport:** Ohne Quell- und Streuterm in (1.62) ist die Zeitentwicklung der Verteilungsfunktion gegeben durch $f(x, r_0 - ckt)$. Einer Trennung von Propagation und Streuung entsprechend wird der Transport im Testensemble durch freie Flüge

$$m_i(x_i, r_i) \xrightarrow{\Delta_t} m_i(x_i, r_i - ck_i\Delta_t)$$
 (1.68)

realisiert.

1.8.3 Algorithmus

Vorteile der EMC Methode

Der im vorigen Abschnitt hergeleitete Algorithmus bietet einen sehr effizienten und einfachen Zugang zu linearen Boltzmanngleichungen (1.62). Ein Vorteil gegenüber klassischen Verfahren ist gegeben:

- Teilchen des Testensembles werden nur in Zuständen erzeugt, die für die Dynamik von Bedeutung sind. Bei klassischen Methoden dagegen muß der gesamte Phasenraum berücksichtigt werden.
- Der Transportterm kann mit freien Flügen sehr effizient und einfach implementiert werden. Bei klassischen Methoden hat man es letzendlich mit einer partiellen Differentialgleichung zu tun, deren Lösung aufwändig sein kann.
- Da Integrationsfehler von Monte-Carlo Methoden statistischer Natur sind, ist es möglich, mit kleinen Testensembles erste Abschätzungen sehr schnell zu berechnen. Fehler können als Rauschen gut identifiziert werden.

Ein Nachteil des Algorithmus ist der, dass Besetzungen einzelner Rasterelemente klein und so prinzipiell großen statistischen Fehlern unterworfen sind. Bei der Berechnung der Lumineszenz zum Beispiel (siehe 3.2.2) ist man gezwungen, mit sehr großen Testensembles zu arbeiten. Einen Ausweg bietet eine gewichtete Methode⁴⁸ [Ro2], in der wichtige, schwach besetzte, Bereiche des Phasenraums besser untersucht werden können. Generell ist die Varianzunterdrückung bei direkten MC Verfahren ein sehr wichtiger Aspekt [Wag].

Implementierung

Im letzten Abschnitt wurde bei der mathematischen Herleitung deutlich, wie der EMC Algorithmus umzusetzen ist:

1. Anfangszustand: Der Anfangszustand der Verteilung sei f(x,r) = 0, somit sei das Testensemble leer.

⁴⁸Die gewichtete Monte-Carlo Methode ist als *weighted Monte Carlo approach* bekannt.

1.8. ENSEMBLE-MONTE-CARLO METHODE

2. Man lege die Mächtigkeit des Testensembles fest (N_{MCmax}) und normiere die Quelle

$$N_{\text{Quelle}} \equiv \int dt \int_{\Delta_x} dx \int_{\Delta_r} dr \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Quelle}} (t)$$

Erzeugt man nun in jedem Zeitschritt und Rasterelement mit der Wahrscheinlichkeit

$$P(\Delta_x, \Delta_r, \Delta_t) \equiv \Delta_t \frac{N_{\text{MCmax}}}{N_{\text{Quelle}}} \int_{\Delta_x} dx \int_{\Delta_r} dr \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Quelle}} (t)$$

Testteilchen⁴⁹, so wird die maximale Teilchenzahl N_{MCmax} nur im Rahmen statistischer Ungenauigkeiten überschritten. Entsprechend reserviere man Speicher für die $m_i(x_i, r_i)$.

- 3. Gestreut wird in jedem Zeitschritt ein Testteilchen mit den Wahrscheinlichkeiten (1.67), das gesamte Ensemble wird durchlaufen. Die Zeit ist so zu diskretisieren, dass in jedem Schritt die **Streuwahrscheinlichkeit** kleiner als eins ist.
- 4. In jedem Zeitschritt führen die Teilchen einen freien Flug aus (1.68).
- 5. Zu gewissen Zeiten sind zu Observablen Mittelwerte aus dem Testensemble $\{m_i\}$ zu berechnen (1.64).

⁴⁹Für $P(\Delta_x, \Delta_r, \Delta_t) > 1$ sind entsprechend mehrere Teilchen zu erzeugen.

Kapitel 2

Das Modellsystem

2.1 Überblick

Nachdem in Kapitel 1 die benötigten Grundlagen eingeführt und die erforderlichen Definitionen festgelegt worden sind, ist das Ziel dieses Kapitels die Definition und Motivation des zu behandelnden Modells. Es werden Vereinfachungen vorgenommen, die das Verständnis der untersuchten Effekte ermöglichen und Transformationen durchgeführt, die eine numerische Simulation ermöglichen.

Der Hamiltonoperator, in Kapitel 1 allgemein hergeleitet, wird in Abschnitt 2.2 dem untersuchten Modell angepasst. Charakteristische Größen werden eingeführt.

Mit dem Hamiltonoperator ist die Zeitentwicklung des Systems festgelegt, in Abschnitt 2.3 finden sich die entsprechenden Bewegungsgleichungen.

Die zunächst im Ortsraum definierten Observablen werden in die *Exziton*basis entwickelt und so die Bewegungsgleichungen teilweise gelöst. Abschnitt (2.4).

In der neuen Basis wird eine *Markov*näherung vorgenommen und damit in Abschnitt 2.5 das System von Differentialgleichungen geschlossen.

Nach analytischer Lösungs eines Teils der Gleichungen in 2.6 werden Wignertransformationen auf den verbleibenden Teil angewandt. Abschnitt (2.7). Nach wichtigen Vereinfachungen sind so anschauliche Interpretation und numerische Simulation möglich.

Am Ende dieses Kapitels steht eine *Boltzmann*gleichung, wie sie numerisch gelöst werden kann. Ergebnisse der numerischen Untersuchungen finden sich in Kapitel 3.

2.2 Hamiltonoperator und dynamische Größen

2.2.1 Hamiltonoperator und Näherungen

In Kapitel 1 wird die mikroskopische Beschreibung der Dynamik von durch kohärentes Licht angeregten Ladungsträgern und Phononen in einem idealen Quantendraht dargelegt. In der Form (1.34) beschreibt der Hamiltonoperator eine Dynamik, wie sie in ihrer Komplexität einer Analyse völlig unzugänglich ist.

Es werden daher folgende Vereinfachungen vorgenommen, sowohl um die Möglichkeit einer mathematischen Beschreibung der Dynamik zu erlangen, als auch um eine kausale Verknüpfung von Ursachen und Effekten zu ermöglichen:

• Untersucht wird ein idealer GaAs-Quantendraht (siehe Abschnitt 1.4). In Abb. 1.1 ist das Bänderschema von GaAs dargestellt. Bei der Anregung mit Licht einer Wellenlänge, die etwa der Bandlücke¹ entspricht, wird man annehmen können, dass nur Übergänge zwischen dem untersten Leitungsband und den obersten Valenzbändern induziert werden. Die effektiven Massen der Elektronen in den im Γ -Punkt entarteten oberen Valenzbändern sind unterschiedlich, man redet von Leicht- und Schwerlochband. Aus Gleichung (1.25) liest man ab, dass die Eigenenergien der Quantendrahtmoden mit $\frac{1}{m_j^*}$ skalieren. Deshalb wird im Quantendraht die Entartung aufgehoben und die Grundmode des Schwerlochbandes (HH) liegt näher an der des Leitungsbandes (Γ 6).

Aufgrund der obigen Argumentation werden in diesem Modell deshalb **nur das unterste Leitungs- und das Schwerlochband** berücksichtigt und es wird wie üblich die Elektron-Loch-Darstellung verwendet (1.35):

$$d_{\vec{R}} \equiv c^{\dagger}_{_{\mathrm{HH},\vec{R}}} \qquad d^{\dagger}_{\vec{R}} \equiv c_{_{\mathrm{HH},\vec{R}}} \qquad c_{\vec{R}} \equiv c_{_{\Gamma 6,\vec{R}}} \qquad \text{und} \quad c^{\dagger}_{\vec{R}} \equiv c^{\dagger}_{_{\Gamma 6,\vec{R}}}. \tag{2.1}$$

Als Bandindizes werden e für das Leitungs- und h für das Valenzband verwendet. Die effektiven Massen m_e^* und m_h^* werden umbenannt und die negative effektive Elektronenmasse im Valenzband als positive Lochmasse aufgefasst:

$$m_e \equiv m_e^* \qquad m_h \equiv -m_h^*. \tag{2.2}$$

• Vor Anregung der Halbleiterprobe mit dem elektrischen Feld befindet sich das phononische System im thermischen Gleichgewicht (1.3). Über die Wechselwirkung der durch das Lichtfeld angeregten Ladungsträger mit den Phononen wird diese Besetzung verändert. Solche Effekte *heißer Phononen* sollen nicht beschrieben werden und es wird angenommen, das **phononische**

¹Die Bandlücke E_{Gap} ist definiert als Energiedifferenz zwischen dem Energieminimum des untersten Leitungsbandes und dem Energiemaximum der obersten Valenzbänder.

2.2. HAMILTONOPERATOR UND DYNAMISCHE GRÖSSEN

System befinde sich zu allen Zeiten im thermischen Gleichgewicht. Das hat zur Folge, dass kohärente Phononamplituden verschwinden:

$$\langle b_{j,\vec{q}} \rangle = 0 . \tag{2.3}$$

Das vereinfachte System wird beschrieben durch den Hamiltonoperator²

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{El}^{Draht} + \mathcal{H}_{Ph}^{Frei} + \mathcal{H}_{El}^{Laser} + \mathcal{H}_{ElPh}^{WW} + \mathcal{H}_{El}^{WW} + \mathcal{H}_{El}^{IR}$$
(2.4a)

 mit

$$\mathcal{H}_{El}^{Draht} \stackrel{(1.22)}{=} \sum_{\vec{R}} \left(T_{\vec{R}}^{e} c_{\vec{R}}^{\dagger} c_{\vec{R}} - T_{\vec{R}}^{h} d_{\vec{R}}^{\dagger} d_{\vec{R}} \right)$$
(2.4b)

$$\mathcal{H}_{Ph}^{Frei} \stackrel{(1.2)}{=} \sum_{l,\vec{q}} \hbar \omega_l(\vec{q}) \, b_{l,\vec{q}}^{\dagger} b_{l,\vec{q}} \tag{2.4c}$$

$$\mathcal{H}_{El}^{Laser} \stackrel{(1.12)}{=} \sum_{\vec{R}} \vec{E}(\vec{R}) \left(-\vec{M}_{h,e}^{D} d_{\vec{R}} c_{\vec{R}} + \vec{M}_{e,h}^{D} d_{\vec{R}}^{\dagger} c_{,\vec{R}}^{\dagger} \right)$$
(2.4d)

$$\mathcal{H}_{ElPh}^{WW} \stackrel{(1.13)}{=} \sum_{\vec{R};\vec{q},l} \left(b_{l,\vec{q}} + b_{l,-\vec{q}}^{\dagger} \right) \left\{ \gamma_{\vec{R};\vec{q},l}^{e} c_{\vec{R}}^{\dagger} c_{\vec{R}} - \gamma_{\vec{R};\vec{q},l}^{h} d_{\vec{R}}^{\dagger} d_{\vec{R}} \right\}$$
(2.4e)

$$\mathcal{H}_{El}^{WW} \stackrel{(1.17)}{=} \frac{1}{2} \sum_{\vec{R} \neq \vec{R}'} V_{\vec{R}\vec{R}'} \left(c_{\vec{R}}^{\dagger} c_{\vec{R}} - d_{\vec{R}}^{\dagger} d_{\vec{R}} \right) \left(c_{\vec{R}'}^{\dagger} c_{\vec{R}'} - d_{\vec{R}'}^{\dagger} d_{\vec{R}'} \right)$$
(2.4f)

$$\mathcal{H}_{El}^{IR} \stackrel{(1.30)}{=} \sum_{\vec{R},q} \left(\tilde{\Delta}(q) + \tilde{\Delta}^{\dagger}(-q) \right) \left\{ \gamma_{e,\vec{R},q}^{IR} c_{\vec{R}}^{\dagger} c_{\vec{R}} - \gamma_{h,\vec{R},q}^{IR} d_{\vec{R}}^{\dagger} d_{\vec{R}} \right\}$$
(2.4g)

Der Term zur Coulomb-Wechselwirkung (2.4f) wurde gegenüber (1.17) vereinfacht³.

2.2.2 Die Dynamik bestimmende Größen

In den in Abschnitt 3.2.2 beschriebenen Experimenten wird die Antwort des Halbleiters auf eine Anregung mit kohärentem Lichte untersucht. Die klassische Antwort eines Mediums wird durch die Polarisation bestimmt⁴, definiert als mittleres

 $^{^2 \}rm{Die}$ einzelnen Komponenten des Operators sind in Kapitel 1 ausführlich beschrieben, dort sind auch alle Größen definiert.

³In (1.17) ist der Term $\frac{1}{2} \sum_{\vec{R} \neq \vec{R}'} V_{\vec{R}\vec{R}'} \left(1 + 2c_{\vec{R}}^{\dagger}c_{\vec{R}} - 2d_{\vec{R}}^{\dagger}d_{\vec{R}} \right)$ enthalten. Es handelt sich zum einen um den konstanten Beitrag des gefüllten Valenzbandes, zum anderen um Einteilchenbeiträge, die mit \mathcal{H}_{El}^{Draht} berücksichtigt werden können.

⁴Zur Elektrodynamik siehe Standardliteratur, wie z.B. [Nol].

Dipolmoment. Der zur Polarisation gehörige Operator \hat{P} lässt sich im in 2.2.1 definierten Modell schreiben als [Ax3, Ro1]

$$\hat{P} \equiv e\hat{r} = \sum_{ijRR'} \langle i, \vec{R} | e\hat{r} | j, \vec{R}' \rangle c^{\dagger}_{i,\vec{R}} c_{j,\vec{R}'} = \sum_{ij\vec{R}} M^{D}_{ij} c^{\dagger}_{i,\vec{R}} c_{j,\vec{R}}
= \sum_{\vec{R}} \left\{ M^{D}_{ee} c^{\dagger}_{\vec{R}} c_{\vec{R}} - M^{D}_{hh} d^{\dagger}_{\vec{R}} d_{\vec{R}} + M^{D}_{eh} c^{\dagger}_{\vec{R}} d^{\dagger}_{\vec{R}} + M^{D}_{he} d_{\vec{R}} c_{\vec{R}} \right\}.$$
(2.5)

Werden die Bewegungsgleichungen der $\langle c_{j\vec{R}_1}^{\dagger} c_{l\vec{R}_2} \rangle$ im Heisenbergbild aufgestellt, so ergibt sich eine Hierarchie von Bewegungsgleichungen (siehe Abschnitt 1.5.1), die in dieser Arbeit nach dem durch die Dynamik bestimmten Entkopplungsschema (Abschnitt 1.5.2) nach **zweiter Ordnung im elektrischen Feld** abgebrochen werden soll. Da Elektronen im Leitungsband und Löcher im Valenzband erst durch das Lichtfeld erzeugt werden, heißt das, dass eine kleine Ladungsträgerdichte vorausgesetzt wird. Effekte, wie zum Beispiel solche, die als Wechselwirkung von Exzitonen zu deuten sind, werden nicht berücksichtigt⁵.

In die Zeitentwicklung der bis $\mathcal{O}(E^2)$ exakten Polarisation gehen folgende Größen ein (siehe (1.36) und (2.5)) :

Dekohärenz, der Verlust von Phaseninformationen eines quantenmechanischen Systems, wird verursacht durch Kopplung an ein externes System [Rae]. Da in dieser Arbeit angenommen wird, dass die Phononen sich zu allen Zeiten im thermodynamischen Gleichgewicht befinden, stellen die Gitterschwingungen ein solches externes System dar⁶. Ohne Kopplung zwischen Phononen und Ladungsträgern gilt der Faktorsatz⁷ (1.39) und es wird deshalb der nicht faktorisierbare Anteil der exzitonischen Besetzung

$$\bar{N}_{14}^{23} \equiv N_{14}^{23} - Y_1^{2*} Y_4^3 \equiv \langle \hat{\bar{N}}_{14}^{23} \rangle = \langle (\hat{Y}_1^2 - Y_1^2)^{\dagger} (\hat{Y}_4^3 - Y_4^3) \rangle$$
(2.7)

inkohärente Exzitondichte genannt.

Der Begriff der Kohärenz ist in diesem Zusammenhang nicht eindeutig. Wird das Modell in einer höheren Ordnung im Feld beschrieben, so kann \bar{N}_{14}^{23} weiter

⁵Zur Entwicklung und biexzitonischen Effekten siehe [Ax2].

⁶In Analogie zum *Wärmebad* spricht man hier vom *Phononbad*.

⁷Der Faktorsatz gilt in $\mathcal{O}(E^4)$

2.3. BEWEGUNGSGLEICHUNGEN

faktorisiert werden. Letztlich entspricht hier die *Inkohärenz* der des nicht interferierfähigen Lichts [Ax4].

Die inkohärente Exzitondichte stellt sich als die Quelle der Lumineszenz außerhalb der Richtung des eingestrahlten Lasers heraus [Ro1, Si1], sie baut sich durch Streuung der durch das Lichtfeld erzeugten *kohärenten Exzitondichte* $Y_1^{2*}Y_4^3$ mit Phononen und Grenzflächenrauhigkeiten auf.

Durch Ausnutzung der Spurrelationen (1.37) können Elektronen- und Lochdichte durch die exzitonische Besetzung N_{14}^{23} ausgedrückt werden. Die einzigen für die Dynamik entscheidenden Größen sind damit der exzitonische Übergang Y_2^1 und die inkohärente Exzitondichte \bar{N}_{14}^{23} .

2.3 Bewegungsgleichungen

Die Dynamik des durch (2.4) festgelegten Systems soll im Heisenbergbild (Abschnitt 1.5.1) beschrieben werden, der Anfangszustand seien ein leeres Leitungsund ein volles Valenzband mit verschwindenden Korrelationen, also $Y_1^2 = \bar{N}_{14}^{23} =$ 0. In zweiter Ordnung im elektrischen Feld (1.5.2, 2.2.1) ergeben sich über (1.33) für die Größen Y_2^1 (2.6) und \bar{N}_{14}^{23} (2.7) die Differentialgleichungen

$$i\hbar\partial_t Y_1^2 = \overline{\left\{ (T_1^e - T_2^h) - V_{12} \right\}} Y_1^2 - \vec{E}(\vec{R}_1) \vec{M}_{eh}^D \delta_{\vec{R}_1, \vec{R}_2}$$
(2.8a)

$$+\sum_{\mu=(\vec{a},l)} \left(\gamma_{1\mu}^{e} - \gamma_{2\mu}^{h}\right) \left\langle \left(b_{l,-\vec{q}}^{\dagger} + b_{l,\vec{q}}\right) \hat{Y}_{1}^{2} \right\rangle$$
(2.8b)

$$+ \sum_{q} \left(\gamma_{e1q}^{IR} - \gamma_{h2q}^{IR} \right) \left\langle \left(\tilde{\Delta}_{l,-q}^{\dagger} + \tilde{\Delta}_{l,q} \right) \hat{Y}_{1}^{2} \right\rangle$$

$$(2.8c)$$

$$i\hbar\partial_t \bar{\mathbf{N}}_{14}^{23} = \overline{\left\{ (T_4^e - T_3^h) - V_{34} - (T_1^e - T_2^h) + V_{12} \right\}} \bar{\mathbf{N}}_{14}^{23}$$
(2.8d)

$$+\sum_{\mu=(\vec{q},l)} \left\{ \left\langle \ddot{\mathbf{N}}_{14}^{23}(b_{l,-\vec{q}}^{\dagger}+b_{l,\vec{q}}) \right\rangle \left(\gamma_{4\mu}^{e}+\gamma_{2\mu}^{h}-\gamma_{1\mu}^{e}-\gamma_{3\mu}^{h} \right) -\mathbf{Y}_{1}^{2*} \left\langle \dot{\mathbf{Y}}_{4}^{3}(b_{l-\vec{q}}^{\dagger}+b_{l,\vec{q}}) \right\rangle \left(\gamma_{1\mu}^{e}-\gamma_{2\mu}^{h} \right) \right\}$$
(2.8e)

$$+ Y_{4}^{3} \langle \hat{Y}_{1}^{2} (b_{l,-\vec{q}}^{\dagger} + b_{l,\vec{q}}) \rangle^{*} (\gamma_{4\mu}^{e} - \gamma_{3\mu}^{h})^{*} \}$$

$$+ \sum_{q} \left\{ \langle \hat{N}_{14}^{23} (\tilde{\Delta}_{-q}^{\dagger} + \tilde{\Delta}_{q}) \rangle (\gamma_{e4q}^{IR} + \gamma_{h2q}^{IR} - \gamma_{e1q}^{IR} - \gamma_{e3q}^{IR}) - Y_{1}^{2*} \langle \hat{Y}_{4}^{3} (\tilde{\Delta}_{-q}^{\dagger} + \tilde{\Delta}_{q}) \rangle (\gamma_{e1q}^{IR} - \gamma_{h2q}^{IR}) + Y_{4}^{3} \langle \hat{Y}_{1}^{2} (\tilde{\Delta}_{-q}^{\dagger} + \tilde{\Delta}_{q}) \rangle^{*} (\gamma_{e4q}^{IR} - \gamma_{h3q}^{IR})^{*} \right\}.$$

$$(2.8f)$$

Die Differentialgleichungen bilden in dieser Form kein abgeschlossenes System. Wie in (2.8b, 2.8e, 2.8c, 2.8f) zu erkennen ist, koppeln Y_2^1 und \bar{N}_{14}^{23} an die

phononassistierten Größen

$$\mathbf{Y}_{1\mu}^{2+} \equiv \left\langle b_{\mu}^{\dagger} \hat{\mathbf{Y}}_{1}^{2} \right\rangle, \qquad \mathbf{Y}_{1\mu}^{2-} \equiv \left\langle b_{\mu} \hat{\mathbf{Y}}_{1}^{2} \right\rangle, \qquad (2.9a)$$

$$\bar{N}_{14\mu}^{23+} \equiv \left\langle b_{\mu}^{\dagger} \hat{N}_{14}^{23} \right\rangle, \qquad \bar{N}_{14\mu}^{23-} \equiv \left\langle b_{\mu} \hat{N}_{14}^{23} \right\rangle$$
(2.9b)

und ganz analog an die rauhigkeitsassistierten Größen

$$Y_{1q}^{2ir+} \equiv \left\langle \tilde{\Delta}_q^{\dagger} \hat{Y}_1^2 \right\rangle, \qquad Y_{1q}^{2ir-} \equiv \left\langle \tilde{\Delta}_q \hat{Y}_1^2 \right\rangle, \qquad (2.10a)$$

$$\bar{\mathbf{N}}_{14q}^{23ir+} \equiv \left\langle \tilde{\Delta}_q^{\dagger} \bar{\mathbf{N}}_{14}^{23} \right\rangle, \qquad \bar{\mathbf{N}}_{14q}^{23ir-} \equiv \left\langle \tilde{\Delta}_q \bar{\mathbf{N}}_{14}^{23} \right\rangle. \tag{2.10b}$$

Im weiteren Vorgehen werden die Gleichungen durch eine Basistransformation vereinfacht und dann entkoppelt:

- Der Operator $\hbar\Omega_{Y_1^2}$, der die freie Bewegung, den Einschluss in den Draht und die Coulombwechselwirkung ausdrückt, wird diagonalisiert. Es werden dann Y_1^2 und \bar{N}_{14}^{23} in dessen Eigenbasis, die *Exzitonbasis* entwickelt. Abschnitt 2.4.2.
- Die Phononstreuung und die Streuung an Grenzflächenrauhigkeit werden in zweiter Ordnung einer *Korrelationsentwicklung* in *Markov*näherung berücksichtigt. Abschnitt 2.5.1.

2.4 Diagonalisierung von $\hbar\Omega_Y$

2.4.1 Bestimmung der Exziton-Wellenfunktionen

Separation in Anteile senkrecht und parallel zur Drahtrichtung

Die Terme (2.8a) und (2.8d), also die Anteile der freien Bewegung und der Coulombwechselwirkung an den Bewegungsgleichungen, sollen durch Diagonalisierung des Operators $\hbar \Omega_{Y_1}^2$ vereinfacht werden⁸:

Alle für die Dynamik wichtigen Größen werden in die Eigenfunktionen Ψ_{21}^{χ} des Operators, die *Exziton-Wellenfunktionen*, entwickelt und dann die Bewegungsgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten anhand von (2.8) aufgestellt.

Die gesuchten Funktionen sind also die, die

$$\hbar \Omega_{Y_1^2} \Psi_{21}^{\chi} \equiv \left\{ (T_1^e - T_2^h) - V_{21} \right\} \Psi_{21}^{\chi} = E^{\chi} \Psi_{21}^{\chi}$$
(2.11)

erfüllen, wobei die Eigenzustände mit χ nummeriert sind und die Eigenenergien mit E^{χ} bezeichnet werden.

⁸Zur Entwicklung in Eigenfunktionen siehe [Si1] und insbesondere [Ax2].

2.4. DIAGONALISIERUNG VON $\hbar\Omega_Y$

Die Eigenfunktionen zu den $T^j_{\vec{R}_\perp}$, die Drahtmoden u^{ni}_j (1.24) aus (1.23), sind bekannt. Über den Separationsansatz

$$\Psi_{21}^{\chi} = \sum_{\substack{\alpha = (ni)\\\beta = (mj)}} \psi_{\alpha\beta}^{x}(R_{\parallel 1}, R_{\parallel 2}) \mathbf{u}_{e}^{\alpha}(\vec{R}_{\perp 1}) \mathbf{u}_{h}^{\beta}(\vec{R}_{\perp 2})$$
(2.12)

und Ausnutzung der Vollständigkeit der u_i^{ni} (1.4.2) erhält man

$$\left(E^{\chi} - E_{e}^{\alpha} - E_{h}^{\beta} - E_{\text{Gap}}\right)\psi_{\alpha\beta}^{x} = -\left(\frac{\hbar^{2}}{2m_{e}}\triangle_{R_{\parallel 1}} + \frac{\hbar^{2}}{2m_{h}}\triangle_{R_{\parallel 2}}\right)\psi_{\alpha\beta}^{x} - \sum_{\alpha'\beta'}V_{\alpha'\beta'}^{\alpha\beta}\psi_{\alpha'\beta'}^{x},$$
where
(2.13)

wobei

$$V_{\alpha'\beta'}^{\alpha\beta} \equiv \int d^2 \vec{R}_{\perp 1} \int d^2 \vec{R}_{\perp 2} \, \left(\mathbf{u}_e^{\alpha*}(\vec{R}_{\perp 1}) \mathbf{u}_h^{\beta*}(\vec{R}_{\perp 2}) \, V_{21} \, \mathbf{u}_e^{\alpha'}(\vec{R}_{\perp 1}) \mathbf{u}_h^{\beta'}(\vec{R}_{\perp 2}) \right)$$

als Projektion des Coulomb-Potentials auf die entsprechende Drahtmode definiert wurde.

Analog zur Argumentation in 1.4.2 wird angenommen, nur die energetisch günstigste Drahtmode sei besetzt. Damit tragen in (2.13) nur Terme mit $\alpha = \beta = (0, 1)$ bei, die Indizes α und β bei $\psi^x_{\alpha\beta}$ können weggelassen werden. Mit den Definitionen

$$E^x \equiv E^{\chi} - E_e^{\alpha} - E_h^{\beta} - E_{\text{Gap}}$$
 und $V(|R_{\parallel 1} - R_{\parallel 2}|) \equiv V_{(0,1)(0,1)}^{(0,1)}$

ergibt sich damit das Eigenwertproblem für die ψ^x :

$$E^{x}\psi^{x}(R_{\parallel 1}, R_{\parallel 2}) = \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m_{e}} \triangle_{R_{\parallel 1}} - \frac{\hbar^{2}}{2m_{h}} \triangle_{R_{\parallel 2}} - V(|R_{\parallel 1} - R_{\parallel 2}|)\right)\psi^{x}(R_{\parallel 1}, R_{\parallel 2}) \quad (2.14)$$

Anteil in Drahtrichtung

Die Funktionen $\psi^x(R_{\parallel 1}, R_{\parallel 2})$, die die Ortsabhängigkeit der Wellenfunktionen in Drahtrichtung festlegen, werden durch (2.14) bestimmt. Durch Einführung von Relativ- und Schwerpunktkoordinaten ist es möglich, die freie Schwerpunktbewegung vom Relativabstand zu separieren [Si1]. Es seien

Massen:
$$M \equiv m_e + m_h$$
, $\mu \equiv \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$ (2.15a)

Massenanteile:
$$\mu_e \equiv \frac{m_e}{m_e + m_h}$$
, $\mu_h \equiv \frac{m_h}{m_e + m_h}$ (2.15b)

Orte:
$$R \equiv \mu_h R_{\parallel 2} + \mu_e R_{\parallel 1}$$
 (2.15c)

$$r \equiv R_{\parallel 1} - R_{\parallel 2} \tag{2.15d}$$

Energien :
$$E^K \equiv \frac{\hbar^2}{2M} K^2$$
, $E^\nu \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} \nu^2$. (2.15e)

Mit diesen Definitionen⁹ und dem Separationsansatz

$$\psi^x \equiv \chi^K(R)\varphi_\nu(r)$$
 und $E^x \equiv E^K + E^\nu$ bei $\mathbf{x} = (\nu, K)$

⁹Die Energie E^{ν} zum Exzitonzustand wird zur Schwerpunktsenergie formal identisch definiert. Die Begründung wird in Abschnitt 2.7.3 geliefert.

erhält man aus (2.14) die Gleichungen

$$-\partial_R^2 \chi_K(R) = K^2 \chi_K(R)$$
 (2.16a)

$$-\left(V(|r|) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_r^2\right)\varphi_\nu(r) = E^\nu\varphi_\nu(r) . \qquad (2.16b)$$

Gleichung (2.16a) wird durch die ebenen Wellen

$$\chi_K(R) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iKR} \tag{2.17}$$

mit L als Normierungskonstante¹⁰ gelöst. Es ist keine analytische Lösung zur Gleichung (2.16b) bekannt, die Relativfunktionen müssen numerisch bestimmt werden. Im übernächsten Abschnitt wird aufgezeigt, wie die numerische Lösung durchgeführt wird.

Eigenschaften der Wellenfunktionen

Die Wellenfunktionen Ψ_{21}^{χ} bilden ein Orthonormalsystem bezüglich \vec{R}_1 und \vec{R}_2 . Mit dem Multiindex $\chi = (\nu, K, \alpha, \beta)$ und der Definition

$$\oint_{\chi} \equiv \int dK \oint_{\nu} \sum_{\alpha\beta}$$
(2.18)

heißt das^{11}

$$\sum_{\chi} \Psi_{21}^{\chi} \Psi_{34}^{\chi*} = \delta(\vec{R}_2 - \vec{R}_3) \,\delta(\vec{R}_1 - \vec{R}_4) \tag{2.19a}$$

$$\int d^3R_1 \int d^3R_2 \ \Psi_{21}^{\chi*} \Psi_{21}^{\chi'*} = \delta_{\chi,\chi'} \ . \tag{2.19b}$$

In (2.19b) ist $\delta_{\chi,\chi'}$ für diskrete Indexteile als Kronecker-Delta, für kontinuierliche Teile als Diracsche Deltadistribution anzusehen. Die Ψ_{21}^{χ} sind Eigenfunktionen zu $\hbar \Omega_{Y_1}^2$:

$$\hbar\Omega_{Y_{1}^{2}}\Psi_{21}^{\chi} = \underbrace{\left(\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nu^{2} + \frac{\hbar^{2}}{2M}K^{2} + E_{e}^{\alpha} + E_{h}^{\beta} + E_{Gap}\right)}_{E^{\chi}}\Psi_{21}^{\chi}$$

Sie wurden zerlegt in die Anteile $u_{e/h}^{\alpha}(\vec{R}_{\perp})$ (Drahtmoden), $\chi_{K}(R)$ (freie Schwerpunktbewegung) und $\varphi_{\nu}(r)$ (Abhängigkeit vom Relativort):

$$\Psi_{21}^{\chi} = \sum_{\substack{\alpha = (ni)\\\beta = (mj)}} \chi_K(R) \varphi_{\nu}(r) \mathbf{u}_e^{\alpha}(\vec{R}_{\perp 1}) \mathbf{u}_h^{\beta}(\vec{R}_{\perp 2}) .$$
(2.20)

¹⁰Es gelte $\int dR \, \chi_K^*(R) \chi_{K'}(R) = \delta(K - K')$. ¹¹Mit dem Summen-/Integralzeichen in (2.18) wird dem sowohl diskreten als auch kontinulierlichen Charakter der Indizes Rechnung getragen.

Numerische Bestimmung der Relativfunktionen φ_{ν}

Bei (2.16b) handelt es sich um eine Differentialgleichung mit Randbedingungen. Sie soll gelöst werden, indem sie auf die fouriertransformierten Größen umgeschrieben, diskretisiert und als Eigenwertproblem gelöst wird. Auf diese Weise erhält man ein vollständiges Orthonormalsystem im zum Relativort reziproken Raum zu einer gegebenen Diskretisierung.

Die Fouriertransformation sei in dieser Arbeit als

$$f(k) \equiv \mathcal{F}[f](k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dr \ e^{-ikr} f(r)$$
(2.21)

festgesetzt, durch Transformation von (2.16b) erhält man mit (2.15e)

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(k^2 - \nu^2\right) \varphi_{\nu}(k) = \mathcal{F}[V\varphi_{\nu}](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\tilde{k} \ V(k - \tilde{k}) \varphi_{\nu}(\tilde{k}) \ . \tag{2.22}$$

Setzt man nun die Funktionen $\varphi_{\nu}(r)$ nach einem festzulegenden Intervall periodisch fort, so wird aus der kontinuierlichen Fouriertransformierten eine diskrete Funktion

$$\varphi_{\nu}(k) = \sum_{k_i} \Delta k \ \delta(k - k_i) \varphi_{\nu}^{k_i} ,$$

wobei die k_i äquidistant verteile Stützstellen mit einem Abstand Δk sind, der antiproportional zur Länge des Periodizitätsintervalls ist. Aus (2.22) ergibt sich nach periodischer Fortsetzung das diskrete Eigenwertproblem

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} (k_i^2 - \nu^2) \varphi_{\nu}^{k_i} = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k_l} V(k_i - k_l) \varphi_{\nu}^{k_l} .$$
(2.23)

Der Vergleich von (2.22) und (2.23) zeigt, dass die periodische Fortsetzung der Wellenfunktionen bezüglich r eine diskrete Approximation der $\varphi_{\nu}(k)$ durch Werte an den Stützstellen k_i und eine Approximation des Integrals in (2.22) durch die Summe in (2.23) zur Folge hat.

Eine exakte Bestimmung der exzitonischen Bindungsenergie ist in [Bán] beschrieben.

2.4.2 Entwicklung relevanter Größen in die Eigenbasis

Durch Entwicklung der für die Dynamik wichtigen Größen in die Eigenbasis $\{\Psi^{\chi}, \chi\}$ der Operatoren $\hbar\Omega_Y$ können die Differentialgleichungen (2.8) entscheidend vereinfacht werden, durch Coulombwechselwirkung bewirkte Korrelationen, der Einschluss in Drahtmoden und die freie Schwerpunktbewegung in Drahtrichtung sind in den Exziton-Wellenfunktionen enthalten. Bei der Entwicklung wichtig sind nur Wellenfunktionen für die untersten Drahtmoden, also mit $\alpha = \beta =$

(0, 1), so dass im weiteren nur der Teilindex $x = (\nu, K)$ von χ verwendet wird¹²:

$$\mathbf{Y}_{1}^{2} = \sum_{x} \Psi_{21}^{x} y_{x} \qquad \bar{\mathbf{N}}_{14}^{23} = \sum_{x\bar{x}} \Psi_{21}^{x*} \Psi_{34}^{x} \bar{n}_{x\bar{x}} \qquad (2.24a)$$

$$Y_{1\mu}^{2\pm} = \sum_{x} \Psi_{21}^{x} y_{x\mu}^{\pm} \qquad \bar{N}_{14\mu}^{23\pm} = \sum_{x\bar{x}} \Psi_{21}^{x*} \Psi_{34}^{x} \bar{n}_{x\bar{x}\mu}^{\pm}$$
(2.24b)

Durch die Diskretisierung des Eigenwertproblems (2.23) werden die Entwicklungen (2.24) approximiert, die Summe für den diskretisierten Kontinuumsteil wiederum kann durch ein Integral genähert werden¹³:

$$Y_{1}^{2} = \int dK \sum_{\nu} \Psi_{21}^{\nu K} y_{\nu K} \approx \int dK \sum_{i} \Psi_{21}^{\nu_{i} K} y_{\nu_{i} K}$$
$$\approx \int dK \Big\{ \sum_{i \text{geb}} \Psi_{21}^{\nu_{i} K} y_{\nu_{i} K} + \int d\nu \rho(\nu) \Psi_{21}^{\nu K} y_{\nu K} \Big\}.$$
(2.25)

Die hier eingeführte Zustandsdichte $\rho(\nu)$ ist durch das diskrete Spektrum näherungsweise gegeben als¹⁴

$$\rho(\nu_i) \approx \frac{1}{\nu_{i+1} - \nu_{i-1}}$$
(2.26)

Die Streuung an Grenzflächenstörungen kann völlig analog zur Phononstreuung behandelt werden. Die Entwicklung der assistierten Größen (2.10) und die folgenden Umformungen sind identisch zur Behandlung der Phononstreuung. Es genügt daher, sich in diesem Abschnitt auf die Phononstreuung zu beschränken.

Mit der Definition der Übergangsmatrixelemente der Phononstreuung, wie sie in [Ax3] vorgeschlagen wird¹⁵,

$$\Gamma^{\mu}_{xx'} \equiv \int d^3 R_1 \int d^3 R_2 \ \Psi^{x*}_{21} \left(\gamma^e_{1\mu} - \gamma^h_{2\mu}\right)^* \Psi^{x'}_{21} \tag{2.27}$$

und dem nach den Wellenfunktionen entwickelten elektrischen Feld

$$\vec{E}_x \equiv \int d^3R_1 \int d^3R_2 \ \Psi_{21}^{x*} \vec{E}(\vec{R}_1) \delta(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \ \propto \ \varphi_{\nu}^*(r=0) \ \vec{E}(K)$$

 $^{^{12}{\}rm Für}$ die Ausnutzung der Vollständigkeit sind weiterhin alle Drahtmoden wichtig, es wird nur berücksichtigt, dass die Besetzung höherer Moden vernachlässigbar ist.

¹³Dieser Schritt ist wichtig für die Berechnung von Elektron- und Lochdichte in Abschnitt 2.7.4.

 $^{^{14}{\}rm Siehe}$ hierzu Transformation in 2.7.3.

 $^{^{15}}$ Anders als bei [Ax3] sind hier die $\gamma^e_{1\mu}\,$ komplex konjugiert, was an unterschiedlicher Definition dieser Konstanten liegt.

lauten die Bewegungsgleichungen der Entwicklungskoeffizienten zu \mathbf{Y}_1^2 und $\bar{\mathbf{N}}_{14}^{23}$

$$i\hbar\partial_t y_x = \hbar\omega_x y_x - \vec{E}_x \vec{M}_{eh}^D + \sum_{\mu x'} \left\{ \Gamma^{\mu *}_{x'x} y_{x'\mu}^- + \Gamma^{\mu}_{xx'} y_{x'\mu}^+ \right\}$$
(2.28a)

$$i\hbar\partial_{t}\bar{n}_{x\bar{x}} = (\hbar\omega_{\bar{x}} - \hbar\omega_{x}) \ \bar{n}_{x\bar{x}}$$

$$+ \sum_{\mu\tilde{x}} \left\{ \left(\Gamma^{\mu}_{\bar{x}\bar{x}}\bar{n}^{+}_{x\bar{x}} + \Gamma^{\mu*}_{\bar{x}\bar{x}}\bar{n}^{-}_{x\bar{x}} \right) - \left(\Gamma^{\mu}_{\bar{x}x}\bar{n}^{+}_{\bar{x}\bar{x}} + \Gamma^{\mu*}_{x\bar{x}}\bar{n}^{-}_{\bar{x}\bar{x}} \right) \right\}$$

$$+ \sum_{\mu\tilde{x}} \left\{ \left(\Gamma^{\mu*}_{\bar{x}\bar{x}}y^{+*}_{x} + \Gamma^{\mu}_{\bar{x}\bar{x}}y^{-*}_{x} \right) y_{\bar{x}} - y^{*}_{\bar{x}} \left(\Gamma^{\mu}_{\bar{x}x}y^{+}_{\bar{x}} + \Gamma^{\mu*}_{x\bar{x}}y^{-}_{\bar{x}} \right) \right\} .$$

$$(2.28b)$$

Die entsprechenden Gleichungen für die Entwicklungskoeffizienten zu $Y_{1\mu}^{2\pm}$ und $\bar{N}_{14\mu}^{23\pm}$ erhält man über die Relation¹⁶

$$\left[\hat{\mathbf{Y}}_{1\mu}^{2\pm}, \mathcal{H}\right] = \underbrace{\left[b_{\mu}^{\pm}, \mathcal{H}\right]\hat{\mathbf{Y}}_{1}^{2}}_{(a)} + \underbrace{b_{\mu}^{\pm}\left[\hat{\mathbf{Y}}_{1}^{2}, \mathcal{H}\right]}_{(b)}.$$
(2.29)

Nach Bildung der Erwartungswerte bleibt in zweiter Ordnung im Feld von (a) in (2.29) nur $\hbar \omega_{\mu} Y_{1\mu}^{2\pm}$, in (b) fällt wegen $\langle b_{\mu}^{\pm} \rangle = 0$ der Term $\langle b_{\mu}^{\pm} \vec{E}_{x} \vec{M}_{eh}^{D} \rangle$ weg. Analog verfährt man bei $\bar{N}_{14\mu}^{23\pm}$.

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung (wie auch die Wechselwirkung mit Grenzflächenstörungen) soll in zweiter Ordnung einer Korrelationsentwicklung berücksichtigt werden, wie sie Rossi und Kuhn in [Ro1] beschreiben, in der Streuvorgänge und Dephasierung behandelt werden können. Da in dieser Arbeit der Fall ohne kohärente Phononen beschrieben werden soll, vereinfacht sich die Faktorisierung zu

$$\langle \hat{A} b^{\dagger}_{\mu} b_{\mu'} \rangle = \delta_{\mu,\mu'} n^{Ph}_{\mu} \langle \hat{A} \rangle,$$

Erwartungswerte von Größen $\langle \hat{A}b_{\mu}b_{\mu'}\rangle$ verschwinden und mit der Definition

$$\delta_{\pm} \equiv \begin{cases} 1 & \text{bei } \pm \\ 0 & \text{bei } \mp \end{cases}$$

gilt (für die Grenzflächenstreuung wegen (1.31))

$$\left\langle b_{\mu}^{\pm} \left(b_{l',-q'}^{\dagger} + b_{\mu'=(l',q')} \right) \right\rangle = \delta_{\pm} \delta_{\mu,\mu'} n_{\mu}^{Ph} + \delta_{-} \delta_{\mu,(l',-q')} (n_{\mu}^{Ph} + 1)$$
(2.30)

$$\left\langle \tilde{\Delta}_{q}^{\pm} \left(\tilde{\Delta}_{-q'}^{\dagger} + \tilde{\Delta}_{q'} \right) \right\rangle = \sigma^{IR} \, \delta(\pm q + q') \,. \tag{2.31}$$

¹⁶Es steht b^+_{μ} für b^{\dagger}_{μ} , b^-_{μ} für b_{μ} .

Alle Größen, in denen verschiedene Wechselwirkungen vorkommen, also z.B. Phonon- und Rauhigkeitsoperatoren, *Kreuzterme* genannt, werden hier unberücksichtigt gelassen, eine Näherung, wie sie lt. [Ax3] üblich ist. In der Bewegungsgleichung für $\bar{N}_{14\mu}^{23\pm}$ werden nur Terme beibehalten, die proportional zu \bar{N}_{14}^{23} sind, von Axt *Selbstenergieterme* genannt. Man erhält letztendlich die Gleichungen

$$i\hbar\partial_t y_{x\mu}^{\pm} = \left(\hbar\omega_x \mp \hbar\omega_\mu\right) y_{x,\mu}^{\pm}$$

$$+ \sum_{x'} y_{x'} \left\{ \delta_+ n_\mu^{Ph} \Gamma_{x'x}^{\mu*} + \delta_- (n_\mu^{Ph} + 1) \Gamma_{xx'}^{\mu} \right\}$$

$$i\hbar\partial_t \bar{n}_{x\bar{x}\mu}^{\pm} = \left(\hbar\omega_{\bar{x}} - \hbar\omega_x \mp \hbar\omega_\mu\right) \bar{n}_{x\bar{x}\mu}^{\pm}$$

$$+ \delta_+ n_\mu^{Ph} \sum_{x\bar{x}} \left\{ \Gamma_{x\bar{x}}^{\mu*} \bar{n}_{x\bar{x}} - \Gamma_{x\bar{x}}^{\mu*} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} \right\}$$

$$+ \delta_- (n_\mu^{Ph} + 1) \sum_{\bar{x}} \left\{ \Gamma_{\bar{x}\bar{x}}^{\mu} \bar{n}_{x\bar{x}} - \Gamma_{\bar{x}x}^{\mu} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} \right\} .$$

$$(2.32a)$$

2.5 Bestimmung der assistierten Größen

2.5.1 Die Markov-Näherung

Nach Faktorisierung bezüglich der Phonon- und Rauhigkeitsoperatoren ist das System von Differentialgleichungen (2.28), (2.32) abgeschlossen, kann also im Prinzip in dieser Form gelöst werden. Mit den assistierten Variablen ist allerdings eine große Zahl von Unbekannten involviert, so dass eine weitere Vereinfachung zur Lösung unabdingbar ist. Rossi und Kuhn beschreiben in [Ro1] eine Möglichkeit, die assistierten Variablen zu eliminieren, die in dieser Arbeit verwendet werden soll. Auf die *Markovnäherung* wird auch in [Si1] und [Ax3] näher eingegangen.

Die Gleichungen (2.32) haben die Form

$$\left(\partial_t + i\omega + \gamma\right)f(t) = g(t) , \qquad (2.33)$$

wobei die Konstante γ einem phämenologisch eingeführten, exponentiellen Zerfall in höhere Korrelationen entspricht¹⁷. Mit der Anfangsbedingung $f(t) \xrightarrow{t \to -\infty} 0$, die einem anfänglich korrelationslosen System entspricht, ist die formale Lösung von (2.33) laut [Wal]

$$f(t) = e^{-(i\omega+\gamma)t} \int_{-\infty}^{t} d\xi \ g(\xi)e^{(i\omega+\gamma)\xi} \ .$$
(2.34)

Unter der Annahme, dass die Quelle g(t) eine hauptsächlich oszillatorische Zeitabhängigkeit hat, sich also in

$$g(t) = e^{-i\overline{\omega}t}\overline{g}(t) \tag{2.35}$$

 17 Vgl. [Ax3].

mit einem langsam veränderlichen $\bar{g}(t)$ zerlegen lässt, gilt mit (2.34)

$$f(t) \approx e^{-(i\omega+\gamma)t}\bar{g}(t) \int_{-\infty}^{t} d\xi \ e^{-i\bar{\omega}\xi} e^{(i\omega+\gamma)\xi}$$

$$= g(t) \frac{1}{i(\omega-\bar{\omega})+\gamma} = g(t) \left\{ i \frac{\gamma}{(\omega-\bar{\omega})^2+\gamma^2} + \frac{(\omega-\bar{\omega})}{(\omega-\bar{\omega})^2+\gamma^2} \right\} .$$

$$(2.36)$$

Der Realteil beschreibt für $y_{x\mu}^{\pm}$ und $\bar{n}_{x\bar{x}\mu}^{\pm}$ Polaroneffekte, die durch angepasste effektive Massen berücksichtigt werden [Si1, Czy] und wird deshalb weiter nicht mitgenommen. Der Imaginärteil hat die Form einer Lorentzkurze der Breite γ , die lt. Axt die durch die endliche Lebensdauer der assistierten Variablen bedingte Aufweichung des Energieerhalts ausdrückt. Solche Effekte sollen hier nicht berücksichtigt werden, die Lösung wird im Grenzfall¹⁸ $\gamma \to 0$ betrachtet:

$$\Im(f(t)) \xrightarrow{\gamma \to 0} \pi g(t) \,\delta(\omega - \bar{\omega})$$
.

Bei dieser sogenannten *adiabatischen Elimination*¹⁹ oder *Markov-Näherung* wird also durch Vernachlässigung des Gedächtniskerns eine semiklassische Streurate analog zu Fermis goldener Regel hergeleitet.

In den Bewegungsgleichungen (2.32) für $y_{x\mu}^{\pm}$ und $\bar{n}_{x\bar{x}\mu}^{\pm}$ übernehmen die y_x und $\bar{n}_{x\bar{x}}$ die Rolle von g(t). An deren Differentialgleichungen (2.28) kann man erkennen, dass sie ohne Berücksichtigung der Terme der Wechselwirkung mit Phononen oder Grenzflächenstörungen²⁰ tatsächlich eine oszillatorische Zeitabhängigkeit (2.35) haben. Es wird nun sofort klar, warum eine Entwicklung in die Eigenbasis zu $\hbar\Omega_Y$ wichtig war:

Nahe der Bandkante spielt die Coulombwechselwirkung eine große Rolle und nur durch Entwicklung in die Exziton-Wellenfunktionen kann eine hauptsächlich oszillatorische Zeitabhängigkeit angenommen werden. Wie Siantidis in [Si1] schreibt, legt man durch die Wahl der Basis, in der die Markov-Näherung durchgeführt wird, fest, welche Quasiteilchen man den semiklassischen Streuraten zugrunde legt.

¹⁸Zum Grenzübergang siehe [Fic, Nol].

¹⁹Gemeint ist hier, dass die assistierten Größen aus den Bewegungsgleichungen eliminiert werden.

²⁰In GaAs ist die Elektron-Phonon-Kopplung schwach, bei modernen Wachtumsmethoden können Grenzflächenstörungen weitgehend vermieden werden. Diese Terme sind also offensichtlich kleine Korrekturen.

Bewegungsgleichungen in Markov-Näherung 2.5.2

Durch Anwendung der im vorigen Abschnitt beschriebenen Markov-Näherung erhält man für die phononassistierten Größen

$$y_{x\mu}^{\pm} = \frac{-i\pi}{\hbar} \sum_{x'} \delta\left(\left[\omega_x \mp \omega_\mu \right] - \omega_{x'} \right) y_{x'} \left\{ \delta_+ n_\mu^{Ph} \Gamma_{x'x}^{\mu*} + \delta_- (n_\mu^{Ph} + 1) \Gamma_{xx'}^{\mu} \right\}$$
(2.37)
$$\bar{n}_{x\bar{x}\mu}^{\pm} = \frac{-i\pi}{\hbar} \sum_{\bar{x}} \left\{ \delta_+ n_\mu^{Ph} \left[\delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega_{\bar{x}} - \omega_\mu \right) \Gamma_{\bar{x}\bar{x}}^{\mu*} \bar{n}_{x\bar{x}} - \delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega_x - \omega_\mu \right) \Gamma_{x\bar{x}}^{\mu*} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} \right] \right\}$$
$$+ \delta_- (n_\mu^{Ph} + 1) \left[\delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega_{\bar{x}} + \omega_\mu \right) \Gamma_{\bar{x}\bar{x}}^{\mu} \bar{n}_{x\bar{x}} - \delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega_x + \omega_\mu \right) \Gamma_{\bar{x}x}^{\mu} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} \right] \right\} ,$$

für die rauhigkeitsassistierten Größen ergeben sich formal identische Gleichungen.

Dieses Ergebnis, in (2.28) eingesetzt, liefert ein geschlossenes Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten der hier betrachteten Größen Y_1^2 und \bar{N}_{14}^{23} . Aufgrund der speziellen Struktur der Gleichungen ist eine Erweiterung der Definition von Streumatrizen wie in (2.27) sinnvoll:

Definition 6. Streumatrizen

$$\Gamma^{\mu}_{xx'} \equiv \int d^3R_1 \int d^3R_2 \ \Psi^{x*}_{21} \left(\gamma^e_{1\mu} - \gamma^h_{2\mu}\right)^* \Psi^{x'}_{21}$$
(2.38)

$$\Gamma^{Ph}_{xx'\bar{x}\bar{x}'} \equiv \frac{-i\pi}{\hbar} \sum_{\mu} \left\{ \Gamma^{\mu}_{xx'} \Gamma^{\mu*}_{\bar{x}'\bar{x}} \ n^{Ph}_{\mu} \ \delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega'_{\bar{x}} - \omega_{\mu}\right) + \Gamma^{\mu*}_{x'\pi} \Gamma^{\mu}_{\bar{x}\bar{x}'}(n^{Ph}_{\mu} + 1) \ \delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega'_{\bar{x}} + \omega_{\mu}\right) \right\}$$
(2.39)

$$+\Gamma^{\mu*}_{x'x}\Gamma^{\mu}_{\bar{x}\bar{x}'}(n^{Ph}_{\mu}+1)\,\delta\big(\omega_{\bar{x}}-\omega'_{\bar{x}}+\omega_{\mu}\big)\Big\}$$
(2.40)

$$\Gamma_{qxx'}^{IR} \equiv \int d^3R_1 \int d^3R_2 \ \Psi_{21}^{x*} \left(\gamma_{e1q}^{IR} - \gamma_{h2\mu}^{IR}\right)^* \Psi_{21}^{x'}$$
(2.41)

$$\Gamma_{xx'\bar{x}\bar{x}'}^{IR} \equiv \frac{-i\pi}{\hbar} \sum_{q} \left\{ \Gamma_{qxx'}^{IR} \Gamma_{q\bar{x}'\bar{x}}^{IR*} \sigma^{IR} \delta(\omega_{\bar{x}} - \omega_{\bar{x}}') \right\}$$
(2.42)

$$\left. + \Gamma_{qx'x}^{IR*} \Gamma_{q\bar{x}\bar{x}'}^{IR} \sigma^{IR} \delta\left(\omega_{\bar{x}} - \omega_{\bar{x}}'\right) \right\}$$

$$(2.43)$$

$$\Gamma_{xx'\bar{x}\bar{x}'} \equiv \Gamma_{xx'\bar{x}\bar{x}'}^{Ph} + \Gamma_{xx'\bar{x}\bar{x}'}^{IR}$$
(2.44)

$$\hbar\Omega_{Y_{x}}^{x'} \equiv \sum_{\tilde{x}} \Gamma_{x\tilde{x}\tilde{x}x'}$$
(2.45)

$$\hbar\Omega_{\bar{N}x\bar{x}}^{x'\bar{x}'} \equiv \Gamma^*_{\bar{x}'\bar{x}xx'} - \Gamma_{x'x\bar{x}\bar{x}'} + \sum_{\tilde{x}} \left\{ \delta_{xx'}\Gamma_{\bar{x}\tilde{x}\bar{x}\bar{x}'} - \delta_{\bar{x}\bar{x}'}\Gamma^*_{x\tilde{x}\bar{x}xx'} \right\}$$
(2.46)

Bei Verwendung dieser Definitionen und Gleichung (2.37) kann man die Bewe-

gungsgleichungen (2.28) in der einfachen Form

$$i\hbar\partial_t y_x = \hbar\omega_x \ y_x - \vec{E}_x \vec{M}_{eh}^D + \sum_{x'} \hbar\Omega_{Y_x}^{x'} y_{x'}$$
(2.47a)

$$i\hbar\partial_t \bar{n}_{x\bar{x}} = \left(\hbar\omega_{\bar{x}} - \hbar\omega_x\right)\bar{n}_{x\bar{x}} \tag{2.47b}$$
$$+ \sum_{\underline{x}'\bar{x}'} \hbar\Omega_{\bar{N}x\bar{x}}^{x'\bar{x}'} \left\{\bar{n}_{x'\bar{x}'} + y_{x'}^*y_{\bar{x}'}\right\} - \sum_{\bar{x}} \left\{y_x^* \left(\hbar\Omega_Y{\bar{x}}y_{\bar{x}}\right) + y_{\bar{x}} \left(\hbar\Omega_Y{\bar{x}}y_{\bar{x}}\right)^*\right\}$$

schreiben, die den Ausgangspunkt der Analyse des Modells bilden soll. Wie man
sieht, handelt es sich um eine lineare Differentialgleichung mit konstanten Koef-
fizienten, deren Lösung nach Diskretisierung theoretisch durch Diagonalisierung
von
$$\hbar\Omega_{Y_x}^{x'}$$
 und $\hbar\Omega_{\bar{N}x\bar{x}}^{x'\bar{x}'}$ als Standardverfahren [Wal] bestimmt werden kann. Es
stellt sich allerdings heraus, dass aufgrund der Größe dieses sehr einfachen Glei-
chungssystems ein anderer Weg eingeschlagen werden muss.

2.6 Analytische Lösung von y_x

Wie im letzten Abschnitt erwähnt, haben die Differentialgleichungen (2.47) eine sehr einfache Struktur, es handelt sich um lineare Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Durch Diagonalisierung der Streumatrizen kann die Lösung explizit bestimmt werden.

Handelt es sich bei den Gleichungen (2.47) um ein gekoppeltes System von Differentialgleichungen, so besteht doch die Kopplung nur in eine Richtung. Die y_x gehen als Quelle in die Gleichung für die $\bar{n}_{x\bar{x}}$ ein, die Entwicklung der y_x ist aber unabhängig von der der $\bar{n}_{x\bar{x}}$. Aus physikalischen Sicht ist das verständlich, handelt es sich doch bei der Größe $y_x^*y_{\bar{x}}$ um eine kohärente Exzitonendichte, die durch Wechselwirkung mit den Phononen zerfällt und dabei die Dichte inkohärenter Exzitonen $\bar{n}_{x\bar{x}}$ aufbaut.

Gleichung (2.47a) für den exzitonischen Übergang y_x weist eine weitere Besonderheit auf. Siantidis zeigt in [Si1], dass die Streumatrix $\hbar\Omega_{Y_x}^{x'}$ im wesentlichen Diagonalstruktur hat. Werden die geringen Beiträge der Nichtdiagonalelemente vernachlässigt, so kann die Lösung dieser Gleichung für bestimmte Formen von Laserpulsen \vec{E}_x analytisch angegeben werden. Es soll hier festgelegt werden, der Laserpuls habe die Form

$$\vec{E}_x \equiv \vec{\mathcal{E}}_x \left(\frac{1}{\Delta_t \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2\Delta_t^2}} \right) \left(e^{-i\omega_L t} + e^{i\omega_L t} \right), \qquad (2.48)$$

es handle sich um einen Puls der Länge Δ_t und Frequenz ω_L mit einer zeitlich gaußförmigen Einhüllenden. Der Frequenzanteil $e^{i\omega_L t}$ wird im Sinne der *rota*ting wave approximation als nichtresonanter Anteil vernachlässigt. Wie in [Wal] beschrieben, kann mit dem Verfahren der Variation der Konstanten mit der Anfangsbedingung $y_x \xrightarrow{t \to -\infty} 0$ die Lösung nun mit den Abkürzungen

$$\gamma_x \equiv \frac{i}{\hbar} \hbar \Omega_Y^x_x \qquad \Omega_x \equiv i(\omega_L - \omega_x) + \gamma_x \tag{2.49}$$

explizit angegeben werden:

$$y_x(t) = \frac{i}{\hbar} \vec{\mathcal{E}}_x \vec{M}_{eh}^D e^{-(i\omega_x + \gamma_x)t} e^{\frac{(\Omega_x \Delta_t)^2}{2}} \frac{1}{2} \left\{ \text{Errf}\left(\frac{t}{\sqrt{2}\Delta_t} + \frac{\Omega_x \Delta_t}{\sqrt{2}}\right) + 1 \right\}$$
(2.50)

Man erkennt hier leicht die Wirkung der wichtigsten Beiträge. Der Faktor $e^{-(i\omega_x - \gamma_x)t}$ beschreibt Oszillationen und den exponentiellen Zerfall, $\frac{1}{2}(\operatorname{Errf}(\frac{t}{\sqrt{2}\Delta_t} + \frac{\Omega_x \Delta_t}{\sqrt{2}}) + 1)$ beschreibt die Erzeugung durch den Laser, der Faktor nimmt für $t \to -\infty$ den Wert Null, für $t \to \infty$ den Wert Eins an.

2.7 Transformation auf *Boltzmann*form

2.7.1 Struktur der Gleichung, Fall homogener Anregung

Wie schon in Abschnitt 2.36 angesprochen, hat die die Dynamik bestimmende Bewegungsgleichung (2.47b) eine äußerst einfache Struktur: Es handelt sich (nach Diskretisierung im Impulsraum) um eine gewöhnliche Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten. Dennoch ist es nicht möglich, die Gleichung in dieser Form zu lösen, da der Aufwand den durch die zur Verfügung stehenden Rechner vorgegebenen Rahmen sprengt.

Nach Transformation auf die Form einer Boltzmanngleichung ist es möglich, sehr wirkungsvolle Algorithmen zu verwenden und diese Probleme zu umgehen. In diesem Abschnitt wird der Grenzfall homogener Anregung dargelegt, im nächsten diese Transformationen und durchgeführte Näherungen erläutert. In Abschnitt 1.8 wird die, sich zur numerischen Lösung anbietende, "Ensemble-Monte-Carlo"-Methode eingeführt.

Deutung der Entwicklungskoeffizienten

Eingeführt wurden die $\bar{n}_{x\bar{x}}$ als Entwicklungskoeffizienten der inkohärenten Exzitondichte \bar{N}_{14}^{23} bezüglich der Eigenbasis von $\hbar\Omega_{Y_1}^2$. Nach Durchführung der Markovnäherung in dieser Basis hat man sich auf Exzitonen als relevante Quasiteilchen festgelegt, Gleichung (2.47b) definiert die Dynamik der Dichtematrix $\bar{n}_{x\bar{x}}$ im Exzitonbild.

Die Indizes $x, \bar{x} = (\nu, K), (\bar{\nu}, \bar{K})$ bezeichnen Bindungszustand und Impuls der beteiligten Exzitonzustände. Die folgende Definition fasst die Impulse zu Relativ- und Schwerpunktsimpulsen zusammen, deren Bedeutung durch die *Wigner*transformation (1.59) klar wird²¹:

²¹Trotz gleicher Benennung sind die Größen r und R nicht mit denen aus (2.15c) identisch.

Definition 7. Relativ- und Schwerpuntskoordinaten zu $\bar{n}_{x\bar{x}}$

Impulse:
$$K^+ \equiv \frac{1}{2}(\bar{K} + K)$$
 (2.51a)
 $K^- \equiv \bar{K} - K$

$$Ort: \qquad R \equiv \frac{1}{2}(R_{\bar{K}} + R_K) \tag{2.51b}$$

Die Koordinaten $R_{\bar{K}}$ und R_{K} bezeichnen die über Fouriertransformation mit den entsprechenden Impulsen verknüpften Orte. Wie in 1.7 gezeigt, hängt der Relativimpuls mit dem Schwerpunktort zusammen.

Vereinfachung im Fall homogener Anregung

In dem Fall, dass eine räumlich homogene Anregung erfolgt, muss die gemäß (1.59) transformierte Exzitonverteilung $\bar{n}_{\nu\bar{\nu}}(R, K^+)$ vom Schwerpunktsort R unabhängig sein, was explizit leicht nachzuvollziehen ist: Für ein räumlich homogenes Lichtfeld gilt $\vec{E}(K) = \vec{E} \,\delta(K)$ und damit laut (2.50)

Fur ein raumlich homogenes Lichtfeld gilt $E(K) = E \,\delta(K)$ und damit laut (2.50) $y_x = y_\nu \delta(K)$. Aufgrund der speziellen Struktur der Streumatrizen²² $\hbar \Omega_{\bar{N}x\bar{x}}^{x'\bar{x}'}$ gilt so für die Exzitonendichte $\bar{n}_{x\bar{x}} = \bar{n}_{\nu\bar{\nu}}(\bar{K}) \,\delta(K^-)$.

Ist weiterhin das eingestrahlte Lichtfeld zeitlich langsam veränderlich²³, so wird der exzitonische Übergang energetisch scharf angeregt²⁴ und die kohärente Exzitonendichte als Quelle ist diagonal in den Zuständen ν . Werden nun Nebendiagonalelemente nicht durch Streuung nachträglich erzeugt, wird die Dynamik vollständig durch die exzitonischen Besetzungszahlen $\bar{n}_x \equiv \bar{n}_{xx}$ bestimmt und es ergibt sich aus (2.47b) der Zusammenhang [Ax3]:

$$\hbar\partial_t \bar{n}_x = \sum_{x'} \left\{ R_{xx'} (\bar{n}_{x'} + y_{x'}^* y_{x'}) - R_{x'x} \bar{n}_x + y_x^* y_x) \right\} + 2\Im \left(\hbar\Omega_{Y_x}^x \right) y_x^* y_{\bar{x}} . \quad (2.52)$$

Die Streuraten $R_{xx'}$ sind definiert als

$$R_{xx'} = -2\Im(\Gamma_{x'xxx'}) . \qquad (2.53)$$

Sie erfüllen die Eigenschaften (1.46) der in 1.6.2 eingeführten Streumatrizen R und übernehmen deren Rolle in der noch herzuleitenden Transportgleichung.

Es ist also deutlich geworden, dass der Relativimpuls Information über die räumliche Verteilung der Exzitonen enthält. Im nächsten Abschnitt wird die Beschränkung auf homogene Anregung aufgegeben.

²²Zur expliziten Berechnung der Streumatrizen siehe [Si1]. Es gilt $\Gamma_{xx'\bar{x}\bar{x}'} \propto \delta((\bar{K}'-K')-(\bar{K}-K)).$

 $^{^{23}\}mathrm{Als}$ fast konstant wird die Einhüllende \vec{E} angenommen.

²⁴Bei der analytischen Lösung (2.50) entspricht das dem Grenzfall $\Delta_t \to \infty$.

2.7.2 Inhomogene Anregung, K-Wignertransformation

Bei Anregung mit einem inhomogenen Lichtfeld gilt $\vec{E}(K) \neq \vec{E} \,\delta(K)$, die erzeugte Exzitonverteilung $\bar{n}_{x\bar{x}}$ wird nicht mehr diagonal in K, \bar{K} sein. Der Laser soll ein räumliches Gaußprofil einer Breite der Größenordnung eines Mikrometers haben, einer Ausdehnung, die groß gegenüber der typischen Exzitonausdehnung von 1 a_{Bohr} ist.

Es wird also E(K) nur für mit typischen Schwerpunktimpulsen verglichen kleinen Impulsen von Null verschieden sein, was entsprechend auch für die erzeugte Exzitonendichte gilt. Im Folgenden wird die Annahme gemacht, die Streumatrizen $\hbar \Omega_{Y_{x'}}^{x}$ und $\hbar \Omega_{\bar{N}x\bar{x}}^{x'\bar{x}'}$ seien so langsam von den Impulsen abhängig, dass ihre Abhängigkeit von den K^- im angeregten Bereich vernachlässigbar ist. Dieser Annahme entspricht nach Wignertransformation die Unabhängigkeit der Streuung vom Schwerpunktsort. Weiter wird hier die in 2.6 besprochene Diagonalität der $\hbar \Omega_{Y_{x'}}^{x}$ benutzt.

Die Bewegungsgleichung (2.47b) wird gemäß der in (1.59) definierten Wignertransformation von den Indizes $x\bar{x} = (\nu, K)(\bar{\nu}, \bar{K})$ auf die Größen $(\nu, \bar{\nu}; K^+, R)$ transformiert und der Einfachheit halber eine transformierte kohärente Exzitondichte definiert:

$$y^* y_{\nu\bar{\nu}}(K^+, R) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dq \ y^*_{\nu, K^+ - \frac{q}{2}} \ y_{\bar{\nu}, K^+ + \frac{q}{2}} \ e^{iqR}$$

Man erhält

$$i\hbar\partial_t \bar{n}_{\nu\bar{\nu}}(K^+, R) = \left\{ -2i \, \frac{\hbar^2}{2M} K^+ \, \partial_R \, + \, \frac{\hbar^2}{2\mu} (\bar{\nu}^2 - \nu^2) \right\} \bar{n}_{\nu\bar{\nu}}(K^+, R)$$
(2.54a)

$$+ \sum_{\nu'\bar{\nu}'K^{+'}} \hbar \Omega_{\bar{N}\nu\bar{\nu}K^{+}}^{\nu'\bar{\nu}'K^{+'}} \Big\{ \bar{n}_{\nu'\bar{\nu}'}(K^{+'},R) + y^* y_{\nu'\bar{\nu}'}(K^{+'},R) \Big\}$$
(2.54b)

$$- \left\{ \hbar \Omega_{Y\bar{\nu}K^{+}}^{\bar{\nu}K^{+}} + \hbar \Omega_{Y\nuK^{+}}^{\nu K^{+}} \right\} y^{*} y_{\nu\bar{\nu}}(K^{+}, R) . \qquad (2.54c)$$

2.7.3 ν -Wignertransformation

Durch Fouriertransformation bezüglich des Relativimpulses konnte die Bewegungsgleichung für $\bar{n}_{x\bar{x}}$ entscheidend vereinfacht werden (2.54). Es ist dennoch nicht möglich, die Bewegungsgleichung in dieser Form zu lösen. In [Si1] wurde der Weg eingeschlagen, homogene Anregung zu betrachten, bei der $\bar{n}_{x\bar{x}}$ als diagonal in den Zuständen angenommen werden kann. Steht allerdings, wie in dieser Arbeit, das Wechselspiel von energetischer Relaxation und Transport im Vordergrund, so ist diese Annahme nicht sinnvoll. Durch Wignertransformation bezüglich der Zustände ν kann allerdings dieses Problem gelöst werden.



Abbildung 2.1: Die Linearkombinationen der entarteten geraden und ungeraden Zustände (links) sind Zustände mit endlichem Impulserwartungswert (rechts).

Exzitonisches Spektrum und Kohärenzen

Die Diagonalisierung des Operators $\hbar\Omega_{Y_1}^2$ gemäß 2.4 liefert die Exiton-Wellenfunktionen und das zum Operator gehörige Spektrum, das einen diskreten Anteil gebundener Zustände und einen kontinuierlichen Anteil ungebundener Zustände enthält. Im *kontinuierlichen* Teil des Spektrums gibt es zu jedem Eigenwert jeweils eine gerade und eine unerade Eigenfunktion²⁵.

Zur Vorbereitung der folgenden Transformation sollen diese entarteten Zustände neu kombiniert werden (Abb. 2.1).

Aus zwei entarteten Zuständen $\varphi_{\nu}(k)$ und $\varphi_{\bar{\nu}}(k)$ werden Funktionen

$$\tilde{\varphi}_{+|\nu|}(k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \big\{ \varphi_{\nu}(k) + \varphi_{\bar{\nu}}(k) \big\} \quad \tilde{\varphi}_{-|\nu|}(k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \big\{ \varphi_{\nu}(k) - \varphi_{\bar{\nu}}(k) \big\}$$
(2.55)

konstruiert. Da die ursprünglichen Funktionen gerade bzw ungerade sind, haben die neuen Funktionen die Eigenschaft, jeweils auf eine Seite konzentriert zu sein (Abb. 2.1). Außerdem gilt

$$\tilde{\varphi}_{+|\nu|}(k) = \pm \tilde{\varphi}_{-|\nu|}(-k) \; .$$

Diese Umsortierung bietet nun folgenden Vorteil: Die in den Eigenenergien $E^{\nu} \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu}\nu^2$ vorkommenden Indizes ν können im transformierten, kontinuierlichen Teil des Spektrums als innerer Impuls gedeutet werden. Es handelt sich also bei den entarteten Zuständen um solche, in denen sich Elektron und Loch aufeinander zu oder voneinander weg bewegen. Wie man in Abb.

2.1 erkennt, haben die Impulserwartungswerte $(\langle p \rangle \propto \langle k \rangle)$

$$\langle k \rangle_{+|\nu|} \equiv \int k |\tilde{\varphi}_{+|\nu|}(k)|^2 dk = -\langle k \rangle_{-|\nu|}$$

 $^{^{25}\}mathrm{Die}$ Entartung wird durch die periodische Fortsetzung zur Diskretisierung (2.4.1) aufgehoben. Bei den verwendeten Diskretisierungen allerdings unterscheiden sich die Eigenenergien kaum.

endliche Werte. Gerade und ungerade Zustände dagegen sind als stehende Wellen zu interpretieren.

Die neue Indexmenge $\{\nu\}$ zur Bezeichnung der Wellenfunktionen beinhaltet also Indizes zur Nummerierung des diskreten Anteils und solche zur Nummerierung des kontinuierlichen Anteils, wobei immer positive ν Funktionen bezeichnen, die zu positiven Impulsen gehören, negative solche negativer Impulse bezeichnen.

Behandlung des diskreten Spektrums

Die inkohärente Exzitondichte $\bar{n}_{\nu\bar{\nu}}(K^+, R)$ beinhaltet Informationen über Besetzungen ($\nu = \bar{\nu}$), wie sie im Fall homogener Anregung wichtig sind, sowie Nicht-Diagonalterme ($\nu \neq \bar{\nu}$), die Phasenbeziehungen beschreiben. Insbesondere beschreiben Nebendiagonalen im kontinuierlichen Teil des Spektrums die räumliche Trennung von Elektronen und Löchern.

Da energetisch recht scharf angeregt werden soll und Streuprozesse Kohärenzen eher ab- als aufbauen, soll angenommen werden, für gebundene Zustände, also für den diskreten Anteil des Spektrums, seien nur Besetzungen wichtig. Es ist also anzusetzen, für Indizes ν oder $\bar{\nu}$ diskreter Zustände gelte $\bar{n}_{\nu\bar{\nu}} = \bar{n}_{\nu\bar{\nu}} \, \delta_{\nu,\bar{\nu}}$. Vernachlässigt werden hier nur Phasenbeziehungen zwischen gebundenen und ungebundenen oder zwei gebundenen Zuständen. Die für den Transport wichtigen Kohärenzen im kontinuierlichen Teil des Spektrums werden weiterhin berücksichtigt.

Transformation des kontinuierlichen Anteils

Da also im kontinuierlichen Anteil des Spektrums die Indizes ν als Impulse zum Abstand von Elektronen und Löchern identifiziert werden können, wird es sinnvoll, wie schon für Exzitonimpulse eine Wignertransformation durchzuführen. Der über Fouriertransformation mit dem inneren Relativimpuls verknüpfte Ort r bezeichnet dann den Abstand von Elektronen und Löchern in ungebundenen Zuständen. Es sei entsprechend definiert:

Definition 8. Innere Relativ- und Schwerpuntskoordinaten zu $\bar{n}_{x\bar{x}}$

Impulse:
$$\nu^+ \equiv \frac{1}{2}(\bar{\nu} + \nu)$$
 (2.56a)
 $\nu^- \equiv \bar{\nu} - \nu$

$$Ort: \quad r \stackrel{\mathcal{F}}{\rightleftharpoons} \nu^{-} \tag{2.56b}$$

Nach Wignertransformation bezüglich des relativen inneren Impulses ν^- erhält man aus (2.54) die Differentialgleichung

$$i\hbar\partial_{t}\bar{n}_{\nu^{+},K^{+}}(R,r) = \left\{ -2i\frac{\hbar^{2}}{2M}K^{+}\partial_{R} - 2i\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nu^{+}\partial_{r} \right\}\bar{n}_{\nu^{+}K^{+}}(R,r)$$
(2.57a)
$$+ \mathcal{W}\left[\int_{\nu'\bar{\nu}'K^{+}}^{\infty} \hbar\Omega_{\bar{N}\nu\bar{\nu}K^{+}}^{\nu'\bar{\nu}'K^{+}'} \left\{ \bar{n}_{\nu'\bar{\nu}'}(K^{+}',R) + y^{*}y_{\nu'\bar{\nu}'}(K^{+}',R) \right\} - \left\{ \hbar\Omega_{Y\bar{\nu}K^{+}}^{\bar{\nu}K^{+}} + \hbar\Omega_{Y\nuK^{+}}^{\nu K^{+}} \right\} y^{*}y_{\nu\bar{\nu}}(K^{+},R) \right],$$
(2.57b)

wobei die Wignertransformation \mathcal{W} definiert ist als

$$\mathcal{W}[f_{\nu\bar{\nu}}] \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu^{-} f_{\nu^{+} - \frac{\nu^{-}}{2}, \nu^{+} + \frac{\nu^{-}}{2}} e^{i\nu^{-}r} = f_{\nu^{+}}(r) . \qquad (2.58)$$

Zur Vereinfachung der Nomenklatur wird hier jeweils vorausgesetzt, dass die Transformation nur für die ungebundenen Zustände gelte, der innere Ort r ist für gebundene Zustände ν^+ ohne Bedeutung.

Gleichung (2.57) macht deutlich, dass wie schon bei Wignertransformation bezüglich K^- der Term freier Propagation in die für Boltzmanngleichungen typische Form eines Transportterms übergeht. Betrachtet man den Grenzfall verschwindender Streuung, also nur den Anteil (2.57a), so ist die analytische Lösung gegeben durch

$$\bar{n}_{\nu^+K^+}(r,R,t) = \bar{n}_{\nu^+K^+}(R_0 - 2K^+ \frac{\hbar^2}{2M}t \ , \ r_0 - 2\nu^+ \frac{\hbar^2}{2\mu}t) \ .$$

Innere und äußere Orte entwickeln sich gemäß der vorgegebenen Impulse (Abb. 2.1).

Wichtig wird der innere Ort r bei z.B bei der Berechnung der Elektronenoder Lochdichte mit Hilfe der Spurrelation (1.37, 2.7.4). Nicht-Diagonalemelente von $\bar{n}_{\nu\bar{\nu}}$ können im Kontinuum nicht vernachlässigt werden, da die zugehörigen Zustände nicht gebunden, also nicht normierbar sind. Wie von ebenen Wellen bekannt, sind kohärente Überlagerungen notwendig, um zum Beispiel bei der Berechnung von Elektronendichten Wellenpakete mit endlicher Ortsausdehnung zusammenzusetzen (siehe 2.62). Zu erwartende Effekte, wie die Trennung von schnellen Elektronen und langsamen Löchern bei Abwesenheit von Streuung, sind nur bei Berücksichtigung dieser Kohärenzen, also mit der oben beschriebenen Transformation zu erklären (siehe Abschnitt 3.3).

Ortsabhängigkeit der Streuung

Die in (2.57b) formal durchgeführte Transformation des Streuterms lässt sich nicht ohne großen Aufwand analytisch vereinfachen. Eine numerische Transformation kommt bei den zur Verfügung stehenden Resourcen nicht in Frage. In dieser Arbeit soll deshalb gemäß 2.7.2 die Ortsabhängigkeit der Streuung vernachlässigt werden.

Zusammenspiel der Orte r und R

In 2.7.2 wurde die Unabhängigkeit der Streuung vom Schwerpunktsort R begründet. In ersten Abschätzungen konnte nachgewiesen werden, dass nach Transformation bezüglich ν^- und K^- der Streuterm in komplizierter Weise von einer *Kombination* der Orte r und R abhängt. Eine Vernachlässigung *nur einer* Ortsabhängigkeit wird nicht sinnvoll sein.

Ein anschauliches, stark vereinfachtes Modell lässt ein Verständnis zu: Im Grenzfall einer homogenen Verteilung bezüglich r und R befinden sich für alle Orte in einer gewissen Umgebung gleich viele Elektronen wie Löcher. Die Streuung mit Phononen sollte unabhängig von den Orten sein.

Stellt man sich allerdings eine Verteilung vor, in der die Schwerpunktverteilung scharf ist und Elektronen und Löcher weit voneinander getrennt sind, so sollte keine Phononstreuung in enggebundene Bindungszustände möglich sein, da in einer kleinen Umgebung zu Elektronen keine Löcher zu finden sind. Tests haben gezeigt, dass innere und Schwerpunktorte durchaus die gleiche Größenordnung haben können und nur in Kombination sinnvoll sind.

Schwerpunkts- und innerer Ort werden also bei der Streuung eine gleichberechtigte Rolle spielen. Bei örtlich langsam veränderlichen Verteilungen ist die Vernachlässigung dieser Abhängigkeiten aber eine gute Näherung.

Vernachlässigung der Ortsabhängigkeit

Die Vernachlässigung der Ortsabhängigkeit des Streuterms (2.57b) kann gut begründet werden. Bei Anregung mit nicht zu kurzen Laserpulsen wird eine exzitonische Besetzung energetisch scharf erzeugt. Das heisst $\nu^- \ll \nu^+$. Nimmt man an, der Streuterm sei in den $\nu \bar{\nu}$ langsam veränderlich, so ist nach Transformation die Ortsunabhängigkeit in guter Näherung gegeben.

Es ergibt sich die Bewegungsgleichung

$$\hbar\partial_t \bar{n}_{x^+}(R,r) = \left\{ -2 \frac{\hbar^2}{2M} K^+ \partial_R - 2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \nu^+ \partial_r \right\} \bar{n}_{x^+}(R,r)$$
(2.59a)

$$+ \sum_{x'} \left\{ R_{x+x'} \left(\bar{n}_{x'}(R,r) + y^* y_{x'}(R,r) \right) - R_{x'x^+} \left(\bar{n}_{x+}(r,R) + y^* y_{x^+}(R,r) \right) \right\}$$
(2.59b)

$$-2\Im(\hbar\Omega_{Y_{x^{+}}}^{x^{+}})y^{*}y_{x^{+}}(R,r). \qquad (2.59c)$$

2.7.4 Elektron- und Lochdichte

Dichten vor ν -Transformation

Über die Spurrelation (1.37) sind durch die Exzitondichte $(Y_1^{2*}Y_4^3 \text{ und } \bar{N}_{14}^{23})$ auch Elektron- (C_{12}) und Lochdichte (D^{12}) festgelegt. Mit den Entwicklungskoeffizien-

ten $n_{x\bar{x}} \equiv y_x^* y_{\bar{x}} + \bar{n}_{x\bar{x}}$ ergibt sich

$$C_{12} = \sum_{x\bar{x}} n_{x\bar{x}} T_{12}^{x\bar{x}} \quad \text{mit} \quad T_{12}^{x\bar{x}} \equiv \int d\vec{R} \ \Psi_{\vec{R}1}^{x*} \Psi_{\vec{R}2}^{\bar{x}} \ . \tag{2.60}$$

Die Abhängigkeit der Verteilung vom Ort senkrecht zur Drahtrichtung ist durch die unterste Drahtmode gegeben und nicht weiter interessant. Sie wird zum Faktor $\alpha \equiv u_{01}^e(\vec{R}_{\perp 1})u_{01}^h(\vec{R}_{\perp 2})$ zusammengefasst. Für Orte und Impulse in Drahtrichtung erhält man²⁶ als Impulsverteilung [Si1]

$$C(K) = \frac{\alpha\sqrt{2\pi}}{2} \sum_{\nu\bar{\nu}} \int d\tilde{K} \int dR \ n_{\nu\bar{\nu}}(R,\tilde{K}) \Big\{ \varphi_{\nu}^*(K-\mu_e\tilde{K})\varphi_{\bar{\nu}}(K-\mu_e\tilde{K}) \Big\} , \quad (2.61)$$

als Ortsdichte²⁷

$$C(R) = \frac{\alpha}{\mu_h} \sum_{\nu\bar{\nu}} \int dK \int d\tilde{R} \ n_{\nu\bar{\nu}}(\tilde{R}, K) \left\{ \varphi_{\nu}^*(\frac{R-\tilde{R}}{\mu_h}) \varphi_{\bar{\nu}}(\frac{R-\tilde{R}}{\mu_h}) \right\} .$$
(2.62)

Gleichung (2.62) zeigt sofort, weshalb die in [Si1, Si2] vorgeschlagene Näherung, in der nur die Diagonale $\bar{n}_{\nu\nu}$ der Exzitondichte berücksichtigt wird, für die Berechnung der Elektronendichte im inhomogenen Fall nicht sinnvoll ist: Ungebundene Zustände φ_{ν} sind nicht normierbar, ohne Nichtdiagonalterme ist keine örtlich begrenzte Elektronendichte konstruierbar.

Dichten im Grenzfall großer Anregungsenergie

Im Grenzfall verschwindender Coulomb-Wechselwirkung in (2.11) sind Exziton-Wellenfunktionen ebene Wellen und die Zustandsdichte (2.26) ist konstant. Die ν -Wignertransformation (2.58) kann in diesem Fall analytisch ausgeführt werden. Da bei großen Eigenenergien die Coulomb-Wechselwirkung weniger wichtig ist, wird bei der Transformation von $T_{12}^{x\bar{x}}$ in (2.60) dieser Fall angesetzt. Aus der Exzitonendichte kann so die Elektronendichte leicht berechnet werden:

$$C(R) = \alpha \sqrt{2\pi} \int d\nu \rho(\nu) \int dK \int dr \ n_{\nu K}(\mu_h r - R, r) \ . \tag{2.63}$$

Der Vorteil dieser Approximation liegt darin, dass damit auch große innere Abstände r behandelt werden können. Die numerisch bestimmten Wellenfunktionen sind bei den verwendeten Diskretisierungen auf, in diesem Zusammenhang, zu kleinen Intervallen periodisch fortgesetzt.

²⁶Definiert werden weiterhin die Massenanteile von Elektron und Loch $\mu_h \equiv \frac{m_h}{m_e + m_h} \qquad \mu_e \equiv \frac{m_e}{m_e + m_h} \;.$

 $^{27}\mathrm{Es}$ handelt sich um die Diagonale der für Pump-Probe Signale wichtigen Dichtematrix $\mathrm{C}_{12}.$

KAPITEL 2. DAS MODELLSYSTEM

Kapitel 3

Numerische Ergebnisse

3.1 Überblick

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die örtlich und zeitlich aufgelöste Ladungsträgerdynamik nach optischer Anregung zu untersuchen. Bevor in diesem Kapitel Ergebnisse der Simulation präsentiert und mit experimentellen Messungen verglichen werden, soll Abschnitt 3.2 eine anschauliche Interpretation der Streuvorgänge und eine kurze Darstellung experimenteller Methoden liefern.

Bei der Wignertransformation in Abschnitt 2.7.3 wurde deutlich, dass eine Voraussetzung für die Unabhängigkeit der Streuung von Schwerpunkt- und Relativort eine vernachlässigbare Trennung von Elektronen und Löchern ist. In 3.3 wird diese Näherung eingehend untersucht.

Die Relaxation der Exzitonverteilung $\bar{n}_x(R, r)$ spielt die entscheidende Rolle in der Dynamik. In Abschnitt 3.4 wird die Relaxation im Hinblick auf die Besetzung von Exziton- und Impulszuständen untersucht.

Die Streuung an Phononen ist von deren Besetzungszahlen und damit auch von der Gittertemperatur abhängig. Über die Zustandsdichte des exzitonischen Spektrums ergibt sich zusätzlich eine starke Abhängigkeit der Streuvorgänge von der Frequenz des anregenden Lichtfelds. Beide Aspekte werden in Abschnitt 3.5 untersucht.

Im behandelten Modell wurden verschiedenartige Kopplungen berücksichtigt. Es zeigt sich, dass alle Mechanismen bei den untersuchten Anregungsbedingungen wichtig sind und sich auf komplexe Weise ergänzen. Abschnitt 3.6.

Die Erweiterung des Modells auf inhomogene Anregung macht es möglich, das Wechselspiel von Relaxation und Transport zu untersuchen. Abschnitt 3.7.

Zur Untersuchung der Antwort von Halbleitern auf optische Anregung gibt es verschiedene experimentelle Methoden (3.2.2). In 3.8 werden die unterschiedlichen Messgrößen verglichen. Charakteristische Unterschiede können aufgezeigt werden.



Schwerpunktimpuls

Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Dynamik. Es streuen lt. 2.5.1 Elektron-Loch-Paare (Exzitonen). Aufgetragen sind daher Exzitonzustände und Schwerpunktimpuls gegen die Gesamtenergie. Angedeutet sind die Zustandsdichte durch eine Parabel je Zustand ν , typische Energiestufen, die Anregung bei kleinen Impulsen und das Wechselspiel der verschiedenen Wechselwirkungen. Die Emission von optischen Phononen ist bei den Energien $E_{1s} + nE_{LO}$ und $E_{BK} + nE_{LO}$ sehr effizient.

3.2 Einführende Betrachtungen

3.2.1 Veranschaulichung des Modells

Bei der Diskussion der numerischen Lösung des Modells (2.59) ist es hilfreich, das folgende anschauliche Modell vor Augen zu haben. Berücksichtigt wurden verschiedenartige Wechselwirkungen, die Streuung mit optischen Phononen der Energie 36.4 meV, mit akustischen Phononen linearer Dispersion und schließlich elastische Streuungen an Grenzflächenrauhigkeiten (IR). In Abb 3.1 wurde versucht, die Verschiedenartigkeit der unterschiedlichen Kopplungen und deren Wechselspiel zu verdeutlichen.

Zustandsdichte und Anregungsenergie

Durch optische Anregung werden Exzitonen mit kleinen Impulsen erzeugt¹ und streuen dann. Die in Abb. 3.1 eingetragenen Parabeln deuten die Zustandsdichte (2.26) und die im Impuls quadratische kinetische Energie an², die erst durch Streuung aufgebaut wird.

Typische Energien sind durch die Zustandsdichte und starke Kopplung an optische Phononen gegeben. Die Zustandsdichte nahe der Bandkante ist besonders groß und die Streuung in den 1s-Zustand besonders effizient. Daher ist ein rascher Zerfall bei den eingetragenen Energien $E_{1s} + nE_{LO}$ und $E_{BK} + nE_{LO}$ zu erwarten.

Aufbau kinetischer Energie

Bei elastischer Streuung geben Exzitonen keine Energie ab, die innere Energie kann komplett in kinetische Energie umgewandelt werden. Bei Streuung mit optischen Phononen wird eine Überschussenergie bezüglich der typischen Energien $E_{1s} + nE_{LO}$ und $E_{BK} + nE_{LO}$ aufgrund des Energieerhalts bei Streuung (2.36) in kinetische Energie übergehen. Siehe hierzu Abb. 3.10.

Diese bezüglich des Gleichgewichts überschüssige kinetische Energie kann durch Emission von akustischen Phononen abgebaut werden. Wird resonant angeregt, so kann durch Absorption von Phononen Energie aufgenommen werden.

3.2.2 Experimentelle Methoden

Das in dieser Arbeit behandelte Modell beschreibt den Zusammenhang zwischen optischer Anregung, Dephasierung, energetischer Relaxation und Transport von Ladungsträgern in einem GaAs Quantendraht. Solche Kurzzeit-Transporteffekte in Heterostrukturen können seit 1992 experimentell untersucht werden [Yoo] und stoßen auch in letzter Zeit noch auf großes Interesse [Ax1, Gro, Vol, Zh1, Zh2, Zh3, Zh4, Neu, Gur, Bu1, Bu2].

Zur Zeit ist die Herstellung von Quantendrähten, die in ihrer Qualität mit Quantenfilmen vergleichbar sind, nicht möglich. Zudem sind für technische Anwendungen Quantendrähte nicht von Bedeutung, so dass bei Experimenten zumeist Quantenfilme untersucht werden. Daher können die hier angestellten Vergleiche nur qualitativer Natur sein. Trotz typischer Unterschiede, die sich z.B. durch unterschiedliche Zustandsdichten der (quasi-) ein- und zweidimensionalen Systeme ergeben, kann eine sehr ähnliche Dynamik beobachtet werden.

Laut [Mei] spielen sich Relaxation und Thermalisierung auf einer Zeitskala von Piko- bis Mikrosekunden $(10^{-12} - 10^{-6} \text{ s})$ ab. Bei typischen Ladungsträgergeschwindigkeiten muss damit eine Ortsauflösung von rund $\frac{1}{10}\mu = 10^{-7}$ m erreicht

¹Wegen $c \gg v_{\text{Schall}}$ sind Impulse der Phononen sehr viel größer als die der Photonen.

²Eingezeichnet sind die der Diskretisierung in Abschnitt 2.4.1 entsprechenden Zustände. Im Kontinuum fallen jeweils zwei Zustände energetisch zusammen.



Der die Probe anregende Strahl wird in einem Objektiv kolliminiert und mit einer auf die Probe aufgebrachten "solid immersion" Linse weiter fokussiert. Das Lumineszenzsignal wird vom selben Objektiv gesammelt und in der Brennebene mit einer Lochblende örtlich begrenzt. Die Ortsauflösung erreicht 200 nm, die Zeitauflösung beträgt 5 ps.

Abbildung 3.2: Experimenteller Aufbau von Lumineszenzmessungen, H. Zhao (H. Kalt, Karlsruhe). Aus [Zh3].

werden. Orts- und zeitaufgelöste Experimente können als Lumineszenz- oder Pump-Probe Messungen realisiert werden. Auf diese Messtechniken soll näher eingegangen werden.

Lumineszenzmessungen

In den letzten Jahren wurden einige orts- und zeitaufgelöste Lumineszenzexperimente durchgeführt, insbesondere in Karlsruhe [Neu, Gur, Zh1, Zh2, Zh3, Zh4]. Abb. 3.2 zeigt schematisch den Aufbau solcher Messungen. Prinzipiell wird eine Probe mit kurzen Pulsen angeregt. Die nach optischer Rekombination von Exzitonen emittierte Lumineszenz wird in der Apparatur aufgefangen und auf eine Lochblende fokussiert. Durch Verschieben dieser Blende sind ortsabhängige Messungen bis zu einer Genauigkeit von 400 nm möglich.

Wie in [Si1, Ro1] gezeigt wird, bildet die inkohärente Exzitondichte \bar{n}_{xx} bei kleinen Schwerpunktimpulsen K die Quelle der Lumineszenz außerhalb der Richtung des anregenden Lichtfeldes.

Pump-Probe Messungen

In Pump-Probe Experimenten wird eine dünne Probe (der Dicke L) mit einem Pump-Puls angeregt. Ein Testpuls (Probepuls) fragt die Anregung des Halbleiters ab, der transmittierte Anteil wird gemessen. Der Testpuls kann, wie in Abb. 3.3 gezeigt, örtlich und zeitlich versetzt eingestrahlt werden. Im Allgemeinen wird die differentielle Absorption

$$-\Delta \alpha L \equiv \frac{|E_{\text{probe}}|^2_{\text{Pump an}} - |E_{\text{probe}}|^2_{\text{Pump aus}}}{|E_{\text{probe}}|^2_{\text{Pump aus}}}$$

gemessen [Vol], also der normierte Unterschied zwischen Transmission mit und ohne Pumpstrahl.



Abbildung 3.3: Schematische Darstellung von Pump-Probe Messungen, S. Grosse (J. Feldmann, München). Aus [Gro]. Die Probe wird mit einem Pump-Puls angeregt, der Testpuls kann zeitlich (τ) und örtlich (ξ) versetzt eingestrahlt werden. Goldstrukturen (,,nanoruler") erlauben es, die Verschiebung zu messen.

Zur Berechnung dieses Signals muss prinzipiell die Antwort des Systems in dritter Ordnung im elektrischen Feld berechnet werden. Unter bestimmten Bedingungen³ gilt allerdings [Sha, Kno]

$$\Delta \alpha(R) \approx \left[1 - C(R) - D(R) \right] \alpha_0 \, .$$

In dieser Arbeit werden Simulationsergebnisse insbesondere mit Pump-Probe Messungen aus [Ax1, Gro, Vol] verglichen.

3.3 Trennung von Elektronen und Löchern

3.3.1 Grenzfall freier Propagation

Die zeitliche Dynamik der Exzitondichte ohne Streuung, gegeben durch (2.59), ist die einer freien Bewegung. Wird eine Anfangsverteilung vorgegeben⁴, so ergibt sich das in Abb. 3.4 dargestellte Szenario: Exzitonen werden mit verschwindendem Schwerpunktimpuls erzeugt, die Schwerpunktverteilung bleibt also zeitlich konstant. Bei Anregung über der Bandkante trennen sich Elektronen und Löcher mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten vom Schwerpunkt, was zur Trennung der Ladungsträger führt.

3.3.2 Dynamik mit Streuung

Im Grenzfall kleiner Streuung wird, wie im letzten Abschnitt deutlich wurde, die in 2.7.3 diskutierte Näherung der Ortsunabhängigkeit der Streuung nicht gut sein. Elektronen und Löcher streuen trotz räumlicher Trennung in Zustände enger Bindung.

 $^{^{3}\}mathrm{Der}$ Zusammenhang gilt insbesondere außerhalb von Exziton-Resonanzen.

⁴Ohne Streuung fällt auch die Quelle in (2.59) weg.



Abbildung 3.4: Dichten gegen Zeit und Ort bei verschwindender Streuung, analytisches Resultat. Links (C) die Elektronendichte, rechts (C-D) die Differenz von Elektronen- und Lochdichte. Die schweren Löcher bewegen sich langsamer als die leichten Elektronen. Anregung 10 meV über BK.

Die Stärke der Streuung variiert mit Temperatur und Anregungsenergie. Die Abbildungen 3.5 und 3.6 zeigen in der linken Spalte die Elektronendichte, in der rechten die Differenz zwischen Loch- und Elektronendichte.

Bewegung der Elektronen

Die Relativgeschwindigkeit zwischen Elektronen und Löchern ist größer als die der Schwerpunktbewegung, wie in beiden Abbildungen (3.5, 3.6) ist zu erkennen ist: Bevor sich die Verteilung stark verbreitert, trennt sich von ihr ein Teil der Elektronen. Die Geschwindigkeit entspricht der Anregungsenergie.

Bei einer Anregung von 30 meV (10 K) ist zu erkennen, dass sich ein räumlich scharf begrenzter Teil der Elektronen schnell, ein anderer, weniger gut lokalisierter Teil, langsam von der Verteilung wegbewegt. Offenbar wurde der langsamere Teil durch einen Streuprozess erzeugt.

Trennung von Elektronen und Löchern

Der Vergleich von Abb. 3.5 und 3.6 zeigt eine bei steigenden Temperaturen schwächer ausgeprägte Trennung der Ladungsträger. Exzitonen mit großen inneren Impulsen streuen recht schnell in gebundene Zustände.

Deutlicher noch ist die Abhängigkeit von der Anregungsenergie. Wird in Bereichen kleiner Lebensdauern angeregt, können sich Elektronen und Löcher kaum trennen, sie streuen schnell in gebundene Paarzustände.



Abbildung 3.5: Elektronendichte (links) und Differenz von Loch- und Elektronendichte (rechts) gegen Ort und Zeit. 10 K.


Abbildung 3.6: Elektronendichte (links) und Differenz von Loch- und Elektronendichte (rechte) gegen Ort und Zeit. 60 K.

Generell ist folgendes zu beobachten: Der innere Abstand von Elektronen und Löchern eines kleinen Teils der Exzitonen wächst schnell. Abgesehen davon ist aber der Unterschied zwischen Elektron- und Lochdichte nicht groß.

3.4 Relaxation ins Gleichgewicht

3.4.1 Besetzungen und kinetische Energie

Der phononische Anteil der Ratengleichung (2.59) erfüllt die Eigenschaft (1.46)

$$R(\nu, k, \nu', k') = e^{\frac{\epsilon(\nu', k') - \epsilon(\nu, k)}{k_B T}} R(\nu', k', \nu, k)$$

einer detaillierten Bilanz, was zur Folge hat, dass die Streuung unabhängig von Anfangsbedingungen zu einer Relaxation ins thermodynamische Gleichgewicht



führt. Die Simulation des hier beschriebenen Modells kann klären, in welchem Zeitrahmen ein solcher Gleichgewichtszustand erreicht wird.

Schon die Größenordnung der Streuraten lässt erste Abschätzungen der typischen Zeitenskalen zu, das komplizierte Zusammenspiel der verschiedenen Wech-



selwirkungen führt aber zu einem komplexen Bild.

Abbildung 3.7 zeigt die Matrixelemente $\hbar \Omega_{Y_x}^x$, also die Zerfallsraten des exzitonischen Übergangs y_x aus (2.47a). Deutlich zu erkennen ist ein starker Anstieg der Streuraten für Zustände, bei denen die Emission von optischen Phononen möglich wird, wie es das anschauliche Modell in 3.2.1 nahelegt.

Zu sehen in Abb. 3.8 ist die Entwicklung der mittleren kinetischen Energie, der Gesamtbesetzung des Zustands 1s und der von (1s, $K \leq \Delta_K$) zu $\bar{n}_{\nu K}(r, R)$ bei verschiedenen Temperaturen und unterschiedlichen Anregungsbedingungen. Deutlich ist, dass auch bei einer Temperatur von 60 K die Besetzung der Zustände nach 1000ps weit vom Gleichgewicht entfernt ist: Sie ist deutlich abhängig von der Anfangsbesetzung. Die mittlere kinetische Energie dagegen -insbesondere bei hohen Temperaturen- konvergiert im Vergleich schnell gegen thermische Werte $\frac{1}{2}k_BT$.

3.4.2 Abweichung von thermischer Verteilung

Die Impulsverteilung, also die Größe

$$\bar{n}(K) \equiv \int dr \int dR \sum_{\nu} \bar{n}_{\nu K}(R, r) , \qquad (3.1)$$

konvergiert gegen die thermische Verteilung $\bar{n}(E^K) \propto e^{-E^K}$. Abbildung 3.9 und 3.10 zeigen die Abweichung von $\bar{n}(K)$ von der thermischen Verteilung. Zwei Dinge sind offensichtlich:



Abbildung 3.10: Abweichung der inkohärenten Exzitondichte $\bar{n}(K)$ (3.1) von thermischer Besetzung aufgetragen gegen Schwerpunktimpuls (sign $(K)E^{K}$ in meV) und Zeit. 10 K (links) und 60 K (rechts). Die Anregung bei 30 meV= $E_{1s}+E_{LO}+13.6$ meV (oben), 40 meV= $E_{BK}+E_{LO}+3.6$ meV (unten) über der Bandkante.

- Die in 3.2.1 diskutierten Überschussenergien bestimmen zu kleinen Zeiten die Verteilung.
- Nach rund 200ps sind die Abweichungen von thermischer Besetzung klein, hohe Temperaturen beschleunigen die Relaxation.

Offenbar verläuft die Relaxation von Besetzungen der Exzitonzustände langsamer als die der Schwerpunktimpulse. Wenn auch die Impulsverteilung der thermischen schon nach rund 200ps gut entspricht, befindet sich das System noch nicht im Gleichgewicht. Für die weitere Diskussion heißt das, dass diffusiver Transport (1.41), ein Merkmal thermischer Geschwindigkeitsverteilung, keine hinreichende Bedingung für das Gleichgewicht der Verteilung \bar{n}_x sein kann.



Die Interpretation der Vorgänge nach dem Schema in Abb. 3.1 stimmt mit den Aussagen der Simulation überein. Die vorhergesagten Überschussenergien sind in Abb. 3.10 und Abb. 3.9 eindeutig wiederzufinden. Die Matrix der Zerfallswahrscheinlichkeiten $\hbar\Omega_{Y_x}^x$ in Abb. 3.7 belegt insbesondere die große Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von $E^{\nu} + E^K \approx E_{BK} + E_{LO}$ zur Bandkante.

3.5 Äußere Bedingungen

3.5.1 Anregungsenergie und Transportlänge

Zusammenhängend mit dem von der Anregungsenergie abhängigen transienten Überschuss an Schwerpunktimpuls ist auch die Geschwindigkeit des Transports von Exzitonen in typischer Weise von der Frequenz des eingestrahlten Lichtfeldes abhängig.

Dargestellt in Abb. 3.11 ist die Wurzel des mittleren Ortsquadrats $\sqrt{\langle R^2 \rangle}$ der exzitonischen Besetzung nach 50 ps in Abhängigkeit von der Frequenz des Lasers. Die bereits in 3.2.1 und im letzten Abschnitt vorhergesagten Energiestufen sind in diesem Diagramm wiederzufinden. Bei Anregung nahe der Energiestufen dominiert eine effiziente Streuung mit optischen Phononen in Zustände kleiner Schwerpunktimpulse. Der Transport geht daher langsam vor sich.

Mittels örtlich aufgelöster Lumineszenzmessung (3.2.2) ist es möglich, diese typischen Energien im Transport nachzuweisen. In Abb. 3.12 aufgetragen ist die gemessene Transportlänge gegen die Anregungsenergie. Die im Experiment bei Messungen an Quantenfilmen gefundenen typischen Energien sind ganze LO-Energien über dem Grundzustand: In Quantenfilmen hat die Zustandsdichte, anders als bei Quantendrähten, an der Bandkante keine besonders großen Werte.



Es gibt keine effiziente Streuung mit optischen Phononen auf Energien nahe der Bandkante.

Ganz offensichtlich gibt die Simulation die Resultate des Experiments sehr gut wieder. Ein quantitativer Vergleich ist aufgrund der durch die verschiedene Dimensionalität schon zu erwartenden Unterschiede nicht möglich. Der in Abb. 3.12 zu erkennende starke Unterschied der Messergebnisse für verschiedene Proben zeigt, dass ein genauer Vergleich zudem eine bessere Kontrolle des Wachstumprozesses erfordert.

3.5.2 Temperatur und Expansionsrate

Uber die Streuung an Gitterschwingungen geht die Temperatur in die Dynamik der Exzitonverteilung ein. Das Phononbad hat thermische Besetzung, große Temperaturen lassen also starke Streuung erwarten (siehe Abb. 3.13).

Im thermischen Gleichgewicht hat die Exzitonverteilung \bar{n}_x die Temperatur



Abbildung 3.15: Exzitondichte $n_x(R, r)$. Die mittlere kinetische Schwerpunktenergie (oben links) bei großen Zeiten ist im Gegensatz zur Expansionsrate (unten links) proportional zu T. Die Diffusionskonstante $D^* \equiv \sum_{\nu} D_{\nu}$ (unten rechts) gibt das gut wieder. Grund: Die Zerfallsrate auf dem 1s-Zustand γ_{1sK} (2.49) (oben rechts) ist nicht konstant. Resonante Anregung.

des Gitters, so dass gilt $E_{\rm kin} = \frac{1}{2}k_BT$. Gemäß der Einsteinrelation (1.41) ist damit auch die Expansionsrate $\frac{d}{dt}\langle R^2 \rangle$ proportional zur Temperatur.

Die Einsteinrelation wird aus der Bewegungsgleichung in 1.6.2 hergeleitet, wobei unter anderem eine konstante Relaxationszeit vorausgesetzt werden muss (1.53). Die in Abb. 3.14 dargestellten Messergebnisse zeigen, dass die Proportionalität von Temperatur und Expansionsrate nicht gegeben ist⁵. Geht man davon aus, dass das System zu großen Zeiten dem thermischen Gleichgewicht nahe ist, so kann folglich die Zerfallsrate nicht konstant sein.

Die Simulation bestätigt diese Vermutung, wie Abb. 3.15 zeigt. Die mittlere kinetische Schwerpunktenergie konvergiert, wie behauptet, bei großen Zeiten gegen den Wert $\frac{1}{2}k_BT$. Die Expansionsraten dagegen zeigen eine deutliche Abweichung von der Proportionalität zur Temperatur (unterschiedliche Abstände der Kurven bei großen Zeiten). Die Diffusionskonstante $\sum_{\nu} D_{\nu}$ weist ein entsprechendes Verhalten auf.

Der Schluss aus den Betrachtungen liegt nahe: Die Diffusionskonstante (1.53) gibt die Expansionsrate im Gegensatz zur kinetischen Energie gut wieder. Offensichtlich ist die Impulsverteilung in guter Näherung thermisch, die Annahme einer konstanten Zerfallsrate allerdings ist nicht gegeben. Der Vergleich der Voraussagen des Modells mit den Messungen zeigt eine gute Übereinstimmung.

3.6 Zusammenspiel der Streumechanismen

3.6.1 Optische und akustische Phononen

Die große Rolle der optischen Phononen im Streuprozess wurde bei der Diskussion der Abhängigkeit der Dynamik von der Anregungsenergie im letzten Abschnitt deutlich. Es entspricht der gängigen Annahme [Zh4], dass bei Anregung im Kontinuum optische Phononen für die Streuung in den 1s-Zustand verantwortlich sind und akustische Phononen dann für eine Relaxation der Impulsverteilung sorgen.

Abbildung 3.16 zeigt für eine Anregungsenergie von 30 meV, also gerade zwischen den Energiestufen $E_{1s}+E_{LO}$ und $E_{BK}+E_{LO}$, genau dieses Szenario. Gezeigt ist die Impulsverteilung der inkohärenten Exzitonverteilung, wobei jeweils einzelne Kopplungen unterdrückt sind. Ohne optische Phononen verläuft der Zerfall der Polarisation langsam, erzeugt werden exzitonische Besetzungen insbesondere bei kleinen Impulsen. Gibt es keine Kopplung an akustische Phononen, läuft nach wie vor der Zerfall der kohärenten Exzitondichte schnell, die Impulsverteilung allerdings relaxiert kaum.

Die in Abb. 3.17 dargestellten Szenarien machen deutlich, dass gerade nahe der Bandkante die Dynamik nicht in dieses Schema passen muss. Ist zwar auch

 $^{^5\}mathrm{Bei}$ Zeiten von 40-50 p
s haben die zu verschiedenen Temperaturen gehörenden Kurven etwa gleiche Abstände, die Temperatur
stufen sind aber nicht gleichmäßig gewählt.



Abbildung 3.16: Impulsverteilung $\bar{n}(K)$ gegen Impuls (sign $(K)E^K$) und Zeit, sowie relative Besetzung des 1s-Zustands. Ohne optische Phononen (oben links) langsame Erzeugung inkohärenter Exzitonen. Ohne akustische Phononen (oben rechts) Erzeugung, aber keine Relaxation zu thermischer Impulsverteilung. Ohne piezoelektrische Kopplung (unten links) kaum Änderung gegenüber voller Wechselwirkung (vgl. Abb. 3.10). Die Relative Besetzung des Grundzustands (unten rechts) ist ohne LO klein. 50 K.

knapp unter der Schwelle $E_{1s} + E_{LO}$ (bei 10 meV) die Kopplung an optische Phononen zum überwiegenden Teil an der Streuung in den 1s-Zustand verantwortlich, so beeinflussen doch auch akustische Phononen die Dynamik stark: Ohne akustische Phononen ist die Besetzung des Grundzustands höher als mit. Offensichtlich sorgen akustische Phononen für eine Streuung in angeregte Zustände.

Durch elastische Streuung scheinen schnelle Exzitonen aus dem Grundzustand in angeregte Zustände kleiner Schwerpunktimpulse überzugehen: Eine Unterdrückung dieser Wechselwirkung führt zu höherer Besetzung des 1s-Zustands bei größerer mittlerer kinetischer Energie.



Abbildung 3.17: Inkohärente Exzitonverteilung \bar{n}_x . Besetzung des 1s-Zustands (links) und mittlere kinetische Energie (rechts). Anregung 10 meV (oben) und 20 meV (unten) über der Bandkante.

Oberhalb von $E_{1s} + E_{LO}$ ergibt sich das alte Bild der Rollenverteilung: Ohne optische Phononen gibt es kaum Streuung auf das 1s-Exziton, ohne akustische Phononen bleibt die mittlere kinetische Energie praktisch konstant.

3.6.2 Piezoelektrische Kopplung, Deformationspotential

Streuung im 1s-Zustand

Für die Relaxation der Impulsverteilung im 1s-Zustand ist die Kopplung über das Deformationspotential wichtig, die piezoelektrische Kopplung hat kaum Einfluss. Abb. 3.16 zeigt bei einer großen 1s-Besetzung ohne akustische Phononen keine Impulsrelaxation. Ist nur die piezoelektrische Kopplung unterdrückt, verläuft die Relaxation praktisch unverändert (vgl. Abb. 3.10).

Streuung nahe der Bandkante

Für Besetzungen von Zuständen nahe der Bandkante wird piezoelektrische Kopplung allerdings wichtig. Bei einer Anregung mit 10 meV (Abb. 3.17) dominiert



Abbildung 3.18: Impulsverteilung $\bar{n}(K)$ gegen Impuls (sign $(K)E^K$) und Zeit. Mit allen Kopplungen (oben links), ohne akustische Phononen (oben rechts), ohne Deformationspotential (unten links) und ohne piezoelektrische Kopplung. Beide Kopplungsmechanismen an akustische Phononen führen ähnlich schnell zur Impulsrelaxation. Die durch elastische Streuung erzeugte Besetzung bei (1s, K \approx 20 meV) wird allerdings nur durch Deformationspotentialstreuung effizient abgebaut.

zu kurzen Zeiten die piezoelektrische Kopplung die Entwicklung der kinetischen Energie. Die mittlere Besetzung des 1s-Zustands allerdings wird von beiden Kopplungsarten an akustische Phononen gleichermaßen beeinflusst. Wird nur jeweils ein Mechanismus unterdrückt, so unterscheidet sich die Dynamik stark von der ohne akustische Phononen. Beide Streumechanismen scheinen sich zu ergänzen.

Das in Abb. 3.18 gezeigte Szenario einer Anregung 40 meV über der Bandkante ist geprägt von schneller LO-Streuung zur Bandkante und anschließender langsamer Relaxation. Hier spielen alle Kopplungen eine wichtige Rolle. Elastische Streuung führt zu einer Besetzung des Zustands (1s, K \approx 20 meV), die durch Kopplung an das Deformationspotential relaxiert. Die Besetzung anderer



Abbildung 3.19:

Aus [Ax1]. Pump-Probe Messung, GaAs Quantenfilm, 50 K. (J. Feldmann). Zeitliche Entwicklung der Expansionsrate nach resonanter Anregung, knapp unter und über der Bandkante. Bei Anregung im Kontinuum bildet sich ein transienter Impulsüberschuss.

Zustände allerdings streut etwa gleich stark sowohl durch piezoelektrische Kopplung als auch durch Einfluss des Deformationspotentials.

Ein weiterer bemerkenswerter Aspekt ist in Abb. 3.17 zu sehen. Wird bei 10 meV angeregt, ist ohne Deformationspotential- oder piezoelektrische Kopplung die relative Besetzung des 1s-Zustands klein und steigt monoton. Werden aber beide Mechanismen unterdrückt, so ist die Besetzung anfangs sehr groß und sinkt mit der Zeit. Offensichtlich führt Streuung mit akustischen Phononen zur Besetzung von Zuständen im Kontinuum. Ohne den durch sie induzierten Abbau kinetischer Energie bleibt die Rückstreuung vom 1s-Zustand ins Kontinuum möglich. Die Besetzung des 1s-Zustands sinkt mit der mittleren kinetischen Energie.

3.7 Transport und Relaxation

3.7.1 Anomaler Transport durch Streuung

Die Streuung der bei verschwindend kleinen Schwerpunktimpulsen erzeugten Elektron-Loch Paare⁶ führt zu einem Aufbau von kinetischer Energie und damit zur Expansion des Ensembles.

In Abb. 3.19 ist die in einem Pump-Probe Experiment gemessene Expansionsrate aufgetragen. Bezeichnend ist ein monotoner Anstieg der Expansionsrate bis auf einen Gleichgewichtswert, wenn unterhalb der Bandkante angeregt wird. Eine Anregung oberhalb der Bandkante erlaubt Übergänge zu besonders großen Impulsen. Bei elastischer Streuung z.B. kann ein Übergang

 $(E^{\nu} = E_0, E^K = 0) \to (E^{\nu} = 0, E^K = E_0)$ stattfinden.

In einer direkten Umsetzung des phämenologischen Modells, wie es in 3.2.1 diskutiert wird, konnten die Abb. 3.19 zugrunde liegenden Messergebnisse gut verstanden werden. Auch das in dieser Arbeit behandelte mikroskopische Modell

⁶Vgl. 3.4.2 und [Ax1, Gro].

kin.

ergibt

Relaxa-

verlaufen

sich.

an



Abbildung 3.20: Exzitondichte n_x . Mittlere kinetische Energie und Expansionsrate.



Abbildung 3.21: Expansionsrate bei 20 und 80 K für verschiedene Anregungsenergien.

sagt den transienten Überschuss an Schwerpunktimpuls richtig voraus. In Abbildung 3.20 gezeigt sind Expansionsraten und mittlere kinetische Energie nach resonanter Anregung und Anregung im Kontinuum. In Abschnitt 3.4.2 sind Impulsverteilungen diskutiert.

Der Überschuss an kinetischer Energie hängt stark von der Anregungsenergie ab⁷, besonders groß wird er für Anregungsenergien, für die kein effizienter Zerfall

⁷Vgl. 3.5.1.





Abbildung 3.22: Exzitondichte n_x . Anregung bei 30 meV. Charakteristische Überschüsse der kinetischen Energie (oben links), der Diffusionskonstante $D^* \equiv \sum_{\nu} D_{\nu}$ (oben rechts) und der Expansionsrate (unten). Die Expansionsrate nimmt ihr Maximum weit nach D^* und der kinetischen Energie an.

durch Fröhlichstreuung (LO) möglich ist. In Abb. 3.21 aufgetragen sind bei 20 und 80 K die Expansionsraten für verschiedene Anregungsenergien. Interessant ist insbesondere, dass die Kurven sich schneiden. Für gewisse Anregungsenergien (z.B. 30 meV) ist der Überschuss besonders groß, die Relaxation ins Gleichgewicht verläuft aber vergleichsweise schnell.

3.7.2 Ballistischer und diffusiver Transport

Nichtdiffusives Transportverhalten

Der Transport von Elektron-Loch Paaren fällt nur in Grenzfällen unter die Definition von Diffusion, wie sie in 3.7 eingeführt wird. In Abschnitt 3.4 kann gezeigt werden, dass das Kriterium der kleinen Abweichung vom Gleichgewichtszustand in vielen Fällen nicht erfüllt ist. Insbesondere die Besetzung der Exzitonzustände befindet sich zu Zeiten bis 1000 ps nicht im Gleichgewicht.

Die Einsteingleichung, die voraussagt, die mittlere kinetische Energie sei proportional zur Expansionsrate, gilt in den meisten Fällen nicht. Der Grund dafür wird schon in Abschnitt 3.5.2 erläutert. Ein direkter Vergleich dieser Größen in Abb. 3.22 zeigt das noch einmal deutlich.

Die kinetische Energie weist zu Zeiten bis rund 20 ps, gerade bei kleinen Temperaturen, besonders hohe Werte auf. Bei großen Zeiten konvergiert sie gegen



Abbildung 3.23: Inkoh. Exzitondichte \bar{n}_x . Mittlere kinetische Energie gegen Ort und Zeit. Eine dunkle Färbung entspricht großen Werten. Anregung 20 meV. Bei 10 K (links) liegt ballistischer Transport vor mit schnellen Teilchen außen, bei 80 K (rechts) ein gleichverteilter Impuls als Anzeichen von Diffusion.

den thermischen Gleichgewichtswert, der mit der Temperatur ansteigt. Es kommt also bzgl. der Temperatur zu einer Umkehr der Reihenfolge.

Die Entwicklung der Expansionsraten verläuft dazu ähnlich, allerdings erreicht die Expansion zu späteren Zeiten die höchste Geschwindigkeit. Der Anstieg zu kleinen Zeiten verläuft flacher. Bis 200 ps kehrt sich die Reihenfolge bzgl. der Temperatur nicht um.

Die Diffusionskonstante $D^* \equiv \sum_{\nu} D_{\nu}$ (1.53) hat einen zeitlichen Verlauf, der zu großen Zeiten dem der Expansionsrate recht nahe kommt. Insbesondere kommt es nicht, wie bei der kinetischen Energie, zu einer Umkehr der Temperaturfolge. Wie in 3.5.2 bei resonanter Anregung deutlich wurde, ist also die Näherung einer konstanten Relaxationszeit in (1.53) nicht gut. Eine bloße temperaturabhängige Vergrößerung der Streuraten um einen konstanten Faktor vermag das nicht zu erklären. Bei großen Zeiten ist aber offensichtlich die Abweichung von der thermischen Verteilung klein.

Die deutliche Abweichung des Verhaltens der drei für den Transport charakteristischen Größen bei kleinen Zeiten in den Abb. 3.20 und 3.22 zeigt eindeutig, dass der Transport nicht diffusiv ist. Der Transport ist nicht durch eine zeitlich veränderliche Diffusionskonstante $D^* = D^*(t)$ zu beschreiben, da die Maxima der Expansionsrate, der kinetischen Energie und der Diffusionskonstante nicht aufeinander fallen.

3.8. VERGLEICH DER MESSSIGNALE

Ballistischer Transport

Dominiert beim Transport die Streuung, so liegt laut der Definition in 1.6.1 Diffusion vor. Die mittlere Geschwindigkeit ist dominiert vom Phononbad und an allen Orten gleich. Im Gegensatz dazu werden sich im Grenzfall ballistischen Transports schnelle Teilchen von den langsamen trennen. Die mittlere Geschwindigkeit muss mit der Entfernung vom Ursprung steigen.

Abbildung 3.23 zeigt örtlich und zeitlich aufgelöst die mittlere kinetische Energie des Ensembles inkohärenter Exzitonen. Bei einer Temperatur von 10 K ist die für ballistischen Transport charakteristische Trennung von schnellen und langsamen Teilchen gegeben, bei 80 K ist für große Zeiten der Impuls homogen verteilt.

Mit den Gleichungen 1.43 und 1.53 wird sofort klar, weshalb beim Vergleich der kinetischen Energie und der Expansionsrate in Abb. 1.43 und 3.22 immer ein im Vergleich langsamerer Anstieg der Expansionsrate vorliegt.

Im Fall ballistischen Transports, d.h. ohne Streuung, ist die Breite quadratisch in der Zeit (1.43), das heißt die Expansionsrate steigt zeitlich linear. Im Gegensatz dazu ist im Fall von Diffusion, also im Grenzfall dominierender Streuung, die Expansionsrate konstant.

Außer im Grenzfall sehr starker Streuung, der in 3.4 ausgeschlossen werden konnte, muss daher zu kurzen Zeiten ein im Vergleich zur Entwicklung der Diffusionskonstante langsamer Anstieg der Expansionsrate erfolgen, wie er im vorigen Abschnitt in den Abbildungen 3.20 und 3.22 nachgewiesen wurde.

3.8 Vergleich der Messsignale

3.8.1 Verschiedenartigkeit der Signale

Im in dieser Arbeit verwendeten Modell ist die Ladungsträgerdynamik in der Exzitonbasis (siehe 2.4) untersucht worden, so dass die Exzitonverteilungen $\bar{n}_x(R, r)$ und $n_x(R, r)$ die zentralen Größen darstellen, aus denen alle anderen Größen abzuleiten sind. Insbesondere Elektron- und Lochdichten sind aus ihnen zu extrahieren (1.37).

In Abschnitt 3.2.2 sind Pump-Probe und Lumineszenzsignale als mögliche experimentelle Observablen eingeführt worden. Wie dort diskutiert wird, ist in guter Näherung die Lumineszenz durch die inkohärente Besetzung des 1s-Zustands bei verschwindendem Schwerpunktimpuls gegeben, das Pump-Probe Signal spiegelt in erster Näherung die Summe aus Elektron- und Lochdichte wieder⁸.

Ein Vergleich von experimentellen Messungen erfordert ein gutes Verständnis der unterschiedlichen Signale. Mit Hilfe des hier diskutierten Modells ist es möglich zu verstehen, wann eine Vergleichbarkeit der unterschiedlichen Observablen gegeben ist.

⁸Vgl. 3.2.2. Der Zusammenhang gilt nur unter bestimmten Bedingungen.







Abbildung 3.25: Mögliche Messsignale. 10 K, 30 meV.

Inkohärente Exzitondichte bei $(1s, K \leq \Delta_K)$ bzw. Lumineszenz (unten), Ladungsträgerdichte C(R)+D(R) bzw. Pump-Probe Signal (oben rechts). Man beachte den kleinen Anteil schneller Elektronen (Pfeil). Zum Vergleich: Die Exzitonverteilung $\bar{n}(R)$ (oben links).



3.8.2 Lumineszenz- und Pump-Probe Signal

Anregung im Kontinuum

200

Die Geschwindigkeit der Expansion des Lumineszenzsignals ist in Abb. 3.24 zusammen mit der Expansionsrate des gesamten Exzitonensembles dargestellt. Sowohl für eine Anregung mit der Energie 20 meV $\approx E_{1s} + E_{LO}$, als auch mit 30 meV wird ein qualitativer Unterschied im Verlauf der beiden Größen deutlich.

höhere Werte.

Ein direkter Vergleich von inkohärenter Exzitondichte

$$\bar{n}(R) \equiv \int dr \sum_{x} \bar{n}_{x}(R,r) ,$$

inkohärenter Besetzung des Zustands (1s, $K \leq \Delta_K$) und der Summe von Elektronund Lochdichte zeigt in Abbildung 3.24 und 3.25 charakteristische Unterschiede.

Besonders auffällig ist, dass die, die Lumineszenz bestimmende, Besetzung $\bar{n}_{1s,K\leq\Delta_K}(R)$ zu kleinen Zeiten langsamer expandiert als das Ensemble insgesamt. Läge diffusiver Transport vor, befände sich das System an allen Orten im Gleichgewicht, überall wäre der Anteil langsamer Exzitonen gleich hoch (siehe 3.7.2) und die Expansionsraten müssten identisch sein. Die folgende Erklärung liegt auf der Hand: Exzitonen in Zuständen großer Schwerpunktimpulse bewegen sich schnell, tragen aber nicht zum Lumineszenzsignal bei. Erst wenn diese in den Zustand $(1s, K \leq \Delta_K)$ relaxieren, tauchen sie in dessen Bilanz auf. Im Fall einer Anregung bei 30 meV führt das ab 90 ps sogar dazu, dass die strahlend rekombinierende Teilmenge schneller als die Gesamtheit expandiert, obwohl sie durch verschwindenden Schwerpunktimpuls ausgezeichnet ist.

Die Exzitonen, die nicht zum Lumineszenzsignal beitragen, werden "unsichtbar" genannt [Sno]. Bei Experimenten in Quantenfilmen konnte eine auf ihrer Existenz beruhende Muterbildung beobachtet werden [Bu1, Bu2]. In Abbildung $3.25 \ (\bar{n}(R))$ erkennt man sofort den Ausläufer schneller, unsichtbarer Exzitonen, der im Diagramm des Lumineszenzsignals fehlt.

In der das Pump-Probe Signal bestimmenden Ladungsträgerdichte, die in derselben Abbildung gezeigt ist, erkennt man einen weiteren Ausläufer. Ein kleiner Teil der Verteilung, durch einen Pfeil gekennzeichnet, trennt sich schon bei sehr kurzen Zeiten von der Verteilung. Es handelt sich um schnelle Elektronen, die sich von der Schwerpunktverteilung trennen. Abschnitt 3.3 behandelt diese Relativbewegung ausführlich.

Ein Messergebnis wird dieser kleine Teil schneller Ladungsträger kaum beeinflussen, da er sich schon nach kurzer Zeit von der Verteilung trennt.

Resonante Anregung

Für resonante Anregung (Abb. 3.26) ist kein Unterschied zwischen Gesamtensemble und Lumineszenzsignal (1s, $K \leq \Delta_K$) zu erkennen, da in diesem Fall der Transport in guter Näherung diffusiv ist (vgl. 3.5.2). Bei kurzen Zeiten ergibt sich ein Unterschied zur Summe der Ladungsträgerdichten, da dort auch der kohärente Teil der Exzitonbesetzung $y^*y_x(R, r)$ beiträgt. Insgesamt verläuft die Dynamik aller drei Größer vergleichbar.

Zusammenfassung und Ausblick

Ergebnisse

Auf den Ergebnissen zur Dynamik von Relaxation und Exzitonbildung bei homogener Anregung [Si1] aufbauend, konnte mit dem hier präsentierten Modell der komplexe Zusammenhang von Transport und Relaxation der Exzitonverteilung verstanden werden. Ein Vergleich mit experimentellen Arbeiten hat gezeigt, dass gemessene Vorgänge richtig vorhergesagt werden.

Die Erweiterung des Modells auf den allgemeinen Fall inhomogener Anregung wurde durch Einführung eines Relativabstands von Elektronen und Löchern und Durchführung einer verallgemeinerten Wignertransformation möglich. Es zeigte sich durch analytische und numerische Tests, dass bis auf wenige Ausnahmen die getroffenen Annahmen gut erfüllt waren.

Bei der Untersuchung der Relaxationsdynamik wurde deutlich, dass die Wahl der Paarbasis von entscheidender Bedeutung ist. In Modellen, die zwischen freien Ladungsträgern und gebundenen Exzitonen unterscheiden, können die nahe der Bandkante wichtigen Korrelationen und damit zusammenhängend die Zustandsdichte nicht richtig berücksichtigt werden. Da sowohl gebundene als auch ungebundene Paarzustände konsistent eingehen, sind neben der Thermalisierung der Impulsverteilung im Exziton-Grundzustand auch Dephasierung und energetische Relaxation im Modell enthalten.

Es stellte sich als wichtig heraus, alle Streumechanismen in der Dynamik zu berücksichtigen, da ihr Einfluss von gleicher Größenordnung ist. Es ergab sich ein komplexes Wechselspiel aller Wechselwirkungen in der Relaxation.

Erst durch die Erweiterung des Modells auf inhomogene Anregung konnte der wiederholt gemessene anomale Transport von Ladungsträgern in Kombination mit energetischer Relaxation verstanden werden. Insbesondere der Vergleich von kinetischer Schwerpunktenergie mit der Expansionsrate zeigte, dass der Transport nicht diffusiv ist. Der Vergleich verschiedener Observablen konnte zeigen, dass es signifikante Unterschiede zwischen den Messgrößen verschiedener experimenteller Methoden gibt.

Offene Fragen

Die Streuung ist im Grenzfall örtlich langsam veränderlicher Verteilungen unabhängig von Schwerpunkt- und Relativort. Nachdem erste Abschätzungen ergeben haben, dass die Streuung von einer Kombination aus beiden Parametern abhängt, stellt sich die Frage, wie die Dynamik einer engeren Verteilung durch diese Abhängigkeit beeinflusst wird.

Das Lumineszenzsignal wird in guter Näherung durch die Besetzung inkohärenter Exzitonen mit verschwindenden Schwerpunktimpulsen im 1s-Zustand wiedergegeben und kann daher im vorliegenden Modell leicht berechnet werden. Die Berechnung von Pump-Probe Signalen erfordert prinzipiell die Lösung der Dynamik bis zur dritten Ordnung im elektrischen Feld, weshalb eine diesbezügliche Erweiterung des Modells wünschenswert ist.

Da in Experimenten typischerweise Quantenfilme untersucht werden, in denen sich aufgrund verschiedener Dimensionalität die Ladungsträgerdynamik qualitativ von der in Quantendrähten unterscheidet, erlaubt erst ein auf Quantenfilme angepasstes Modell quantitative Vergleiche von theoretischen Vorhersagen und experimentellen Messungen.

Eine Modifikation des hier präsentierten Modells sollte keine prinzipiellen Schwierigkeiten bergen.

Anhang A

Parameter zur Simulationssoftware

In die numerische Lösung des in dieser Arbeit beschriebenen Modells geht eine Vielzahl von Parametern ein. Die Materialdaten wurden wie in [Si1] gewählt. Diese und alle weiteren zur Bedienung der entworfenen Software wichtigen Parameter sind in diesem Abschnitt zitiert, wie sie zur Erzeugung der präsentierten Ergebnisse gewählt wurden (folgende Seite).

Standardparameter

| eps0 | = | 8 | .85419e | e-12 | : | epsilon0 SI |
|-------------------|-------|---------|---------------------------------|------|-----------------------|--|
| eps00 | = | | 10 |).92 | : | epsilon unendlich SI |
| epsS | = | | 1 | 2.9 | : | Hintergrund-epsilon SI |
| hquer | = | 1 | .05457e | 9-34 | : | hquer SI |
| HBohrRadius | = | 5 | .29177e | e-11 | : | Bohrradius SI |
| D | = | | 5.646 | e-09 | : | Durchmesser QD SI |
| mO | = | 9 | .10939e | e-31 | : | Elektronenmasse SI |
| Ladung_e | = | 1 | .60218e | e-19 | : | Elektronenladung in C |
| kb | = | 1 | .380666 | e-23 | : | Boltzmannkonstante in J/K |
| Т | = | | | ** | : | Temperatur in K |
| Gap | = | | 1. | 519 | : | Gap in eV |
| me | = | | 0. | 063 | : | Elektronenmasse in mO Einheiten |
| mh | = | | 0. | 377 | : | Lochmasse in mO einheiten |
| vl | = | | 5 | 5330 | : | longitudinale Schallgeschw. m/s |
| vt | = | | 334 | 3.6 | : | transversale Schallgeschw. m/s |
| dichte | = | | 5 | 5370 | : | Dichte in kg/m ³ |
| DeEV | = | | | 7 | : | Deformationspotential Elektronen in eV |
| DhEV | = | | - | 3.5 | : | Deformationspotential Loecher in eV |
| hqOmegaLo | = | | 0.0 | 364 | : | Lo-Phonon Energie in eV |
| E14 | = | | C | 0.16 | : | Piezoelektrischer Koeffizient[C/m^2] |
| Ala | = | | 0.0857 | '143 | : | Piezo-Anisotropie. Vgl [Si1] |
| Ata | = | | 0.114 | 286 | : | Piezo-Anisotropie. Vgl [Si1] |
| sigmaIR | = | | 26 | e+07 | : | Streuung Interface-Roughness in eV/s |
| Мо | = | | 46 | e-10 | : | Dipolelement in e*m |
| DateiSteuer | = | **** Da | * Datei mit Steuerbefehlen **** | | | |
| kZahl | = | | | 300 | : | Anzahl Punkte Diskretisierung Eigenw. |
| max_kappa | = | | | 10 | : | k-Grenze DGL in [1/D] |
| IntEps | = | | 16 | e-05 | : | Abschirmung in Integral Vc |
| Emax | = | | | 100 | : | maximale Energie in meV |
| IntegrationsGenau | eit = | 1 | .e-5 | : | rel. Fehler Integrale | |
| maxFvw | = | | | 60 | : | k-Grenze in [1/D] fuer Fvw |
| eps | = | | 16 | e-11 | : | eps Null fuer Abfragen |
| DTLaser | = | | 26 | e-13 | : | zeitliche Breite Laserpuls in s |
| DXLaser | = | | 5e | e-07 | : | raemliche Breite Laserpuls in m |
| Zeitschritt | = | | 0.50 | e-13 | : | Schrittweite in s |
| kZahlSP | = | | | 61 | : | Anzahl Punkte fuer Schwerpunkt k |
| xZahl | = | | | 201 | : | Anzahl der Diskretisierung des SPortes |
| maxXSP | = | | 3 | 3000 | : | Breite der SPkt-Ortsdiskr. in [D] |
| xExzZahl | = | | | 501 | : | ExzitonWellenfunktionen Ortsdiskr. |
| maxTeilchenZahl | = | **** G | roesse | Test | ens | semble ***** |

Literaturverzeichnis

- [Abr] Pocketbook of Mathematical Functions M. Abramowitz und I.A. Stegun, Harri Deutsch 1984
- [And] Electronic properties of two-dimensional systems T. Ando, Rev. mod. Phys. 54, 2 (1982)
- [Ax1] Spatio-temporal dynamics of optical nonlinearities in semiconductor quantum wells V.M. Axt, T. Kuhn, K. Siantidis, S. Grosse, M. Koch, J. Feldmann, W. Stolz, Ultrafast Phenomena in Semiconductors III (Chair/Editor Kong Thon Tsen) Proceedings of SPIE 3624 (1999)
- [Ax2] Dynamische Dichtematrixtheorie kohärent erzeugter Korrelationen an der Halbleiterbandkante V.M. Axt, Dissertation, RWTH Aachen, 1994
- [Ax3] Nonlinear optics of semiconductor and molecular nanostructures; a common perspective V.M. Axt und S. Mukamel, Rev. mod. Phys. 70, 145 (1998)
- [Ax4] Coherent Description of Coulomb Scattering in Semiconductor Optics V.M. Axt, T. Kuhn und A. Stahl, phys. stat. sol. 234, 1, 386 (2002)
- [Bán] Excitons and biexcitons in semiconductor quantum wires L. Bányai, I. Galbraith, C. Ell, H. Haug, Phys. Rev. B 39, 11 (1987)
- [Bas] Wave machanics applied to semiconductor heterostructures G. Bastard, Hasted Press 1988
- [Bou] The Physics of Quantum Information D. Bouwmeester, A. Ekert und A. Zeilinger, Springer 2000
- [Bri] Disorder-Induced Dephasing of Excitons in Semiconductor Heterostructures D. Brinkmann, K. Bott, S.W. Koch und P. Thomas, phys. stat. sol. (b) 206, 493 (1998)
- [Bron] Taschenbuch der Mathematik I.N. Bronštein, K.A. Semendjaev, G. Musiol und H. Mühlig, Harri Deutsch 1997

- [Bu1] Macroscopically ordered state in an exciton system L.V. Butov, A.C. Gossard und D.S. Chemia, Nature, 418, 751 (2002)
- [Bu2] Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps L.V. Butov, C.W. Lai, A.L. Ivanov A.C. Gossard und D.S. Chemia, Nature, 417, 47 (2002)
- [Bu3] Anomalous transport and luminescence of indirect excitons in AlAs/GaAs coupled quantum wells as evidence for exciton condensation L.V. Butov und A. I. Filin, Phys. Rev. B 58, 1980 (1998)
- [Cep] Quantum Monte Carlo D. Ceperley und B. Alder, Science 231, 555 (1986)
- [Coh] Quantenmechanik Band I und II C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, de Gruyter, 2. Auflage 1999
- [Com] Monte Carlo Description of Exciton Dynamics in GaN F. Compagnone,
 G. Kokolakis, A. Di Carlo und P. Lugli, phys. stat. sol. (a) 1, 141 (2002)
- [Cro] Near-field imaging of one-dimensional excitons delocalized over mesoscopic distances A. Crottini, JL. Staehlo, B. Deveaud, X. Wang und M. Ogura, Phys. Rev. B 63, 121313(R) (2001)
- [Czy] Theoretische Festkörperphysik G. Czyscholl, Vieweg 2000
- [Dev] Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors J.T. Devreese, North-Holland 1972)
- [Egr] Excitons and plasmons in metals, semiconductors and insulators: A unified approach I.Egri, Physics Reports 119, 6 (1985)
- [Ein] Uber die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen A. Einstein, Ann. d. Phys. (Leipzig), 17.p. 549. (1905)
- [Fey] Lectures on physics Volume I, Chapter 43 R.P. Feynman, Addison-Wesley 6. Auflage 1964
- [Fic] Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie E. Fick, Akademische Verlagsgesellschaft 1968
- [Fou] Quantum Monte Carlo simulations of solids W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs und G. Rajagopal, Rev. Mod. Phys. 73, 33 (2001)
- [Goo] Surface roughness at the Si(100)-SiO₂ interface S.M. Goodnick, D.K. Ferry, Z. Liliental, D. Fathy und O.L. Krivanek, Phys. Rev. B 32, 12 (1985)

- [Gro] Relaxation Dynamics of Electron-Hole Pairs Studied by Spatiotemporal Pump and Probe Experiments S. Grosse, R. Arnold, G. von Pliessen, M. Koch, J. Feldmann, V.M. Axt, T. Kuhn, R. Rettig und W. Stolz, phys. stat. sol. (b) 204, 147 (1997)
- [Gur] Optical Characterisation of Semiconductor Microcavities by Spatially Resolved Imaging and Resonant Rayleigh Scattering M. Gurioli, F. Bogani, D.S.Wiersma, Ph. Roussignol, G. Cassabois, G. Khitrova und H. Gibbs, phys. stat. sol. (a) 190, 363 (2002)
- [Hak] Quantenfeldtheorie des Festkörpers H. Haken, B.G. Teubner 1993
- [Ha1] Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors H. Haug und S. Koch, World Scientific 1990
- [Ha2] Statistische Physik, Gleichgewichtstheorie und Kinetik H. Haug, Vieweg 1997
- [Her] Elektron-Phonon-Quantenkinetik in homogenen und inhomogenen Systemen M. Herbst Dissertation, WWU Münster, 2000
- [Ja1] The Monte Carlo method for semiconductor device simulation C. Jacoboni und P. Lugli, Springer 1989
- [Ja2] The Monte Carlo method for the solution of charge transport with application to covalent materials C. Jacoboni und L. Reggiani, Rev. Mov. Phys. 55, 3 (1983)
- [Kit] *Einführung in die Festkörperphysik* Ch. Kittel, Oldenbourg 12. Auflage 1999
- [Kno] Femtosecond Excitation of Nonthermal Carrier Populations in GaAs Quantum Wells W.H. Knox, C. Hirlimann, D.A.B. Miller, J. Shah, D.S.Chemla und C.V. Shank, Phys. Rev. Lett.56,011 (1986)
- [Krü] Einfluss anharmonischer Phonon-Phonon-Wechselwirkung auf die lineare Polarisation in Halbleiter-Quantenpunkten A. Krügel, Diplomarbeit, WWU Münster, 2003
- [Kru] *Phononinduzierte Dekohärenz in Quantenpunkten* B. Krummheuer, Diplomarbeit, WWU Münster, 2002
- [Ku1] Statistische Physik I T. Kuhn, Vorlesung zum SS 2000
- [Ku2] Statistische Physik II T.Kuhn, Skriptum zur Vorlesung

- [Ku3] Ladungsträgerdynamik von Halbleitersystemen fern vom Gleichgewicht: Elektronisches Rauschen und kohärente Prozesse T. Kuhn, Habilitationsschrift Universität Stuttgart 1994
- [Ku4] Monte Carlo simulation of untrafast processes in photoexcited semiconductors: Coherent and incoherent dynamics T. Kuhn und F. Rossi, Phys. Rev. B 46, 12 (1992)
- [Lan] Physics of Group IV Elements ans III-IV Compounds Landolt Börnstein, Springer 1982
- [Loh] Elektron-Phonon-Quantenkinetik jenseits der Zweiten Bornschen N\u00e4herung H. Lohmeyer, Diplomarbeit, WWU M\u00fcnster 2003
- [Mah] Many-Particle Physics G.D. Mahan, Plenum Press, 2nd edition 1990
- [Mei] Optodynamik T. Meier und S. Koch, Physik Journal 1, 41 (2002)
- [Neu] Combining a scanning near-field optical microscope with a picosecond streak camera: Statistical analysis of exciton kinetics in GaAs single-quantum wells U. Neuberth, L. Walther, G. von Freymann, B. Dal Don, H. Kalt, M. Wegener, G. Khitrova und H. M. Gibbs, Appl. Phys. Lett. 80, 3340 (2002)
- [Nit] Highly uniform and high optical quality In_{0.22}Ga_{0.78}/GaAs quantum wires grown on (221)A GaAs substrate by molecular beam epitaxy T. Nitta, Y. Ohno, S. Shimonura und S. Hiyamizu, J. Vac. Sci. Technol. B 19(5) (2001)
- [Nol] Grundkurs Theoretische Physik Teil 1-7 W. Nolting, Vieweg 4. Auflage 1997
- [Pen] Theory of interface roughness scattering in quantum wells U. Penner, H. Rücker und I.N. Yassievich, Semicond. Sci. Technol. 13, 709 (1998)
- [Rae] Quantenphysik: Illusion oder Realität? A. Rae, Reclam 1996
- [Reit] Pseudomorphe InGaAs/Ga(Al)As Heterostrukturen: Wachstum und Charakterisierung J. Reithmaier, Dissertation, TU München 1990
- [Ro1] Theory of ultrafast phenomena in photoexcited semiconductors F. Rossi und T. Kuhn, Rev. mod. Phys. 74, 895 (2002)
- [Ro2] Weighted Monte Carlo approach to electron transport in semiconductors
 F. Rossi, P. Poli und C. Jacoboni, Sem. Sci. Tech. 7, 1017 (1992)
- [Sel] Coupled free-carrier and exciton relaxation in optically excited semiconductors P. E. Selbmann, M. Gulia, F. Rossi und E. Molinari, Phys. Rev. B 54, 7 (1996)

- [Sha] Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures J. Shah, Springer Solid-State Sciences 115, 1996
- [Shu] Electron-Phonon Interaction for Interband Transitions in Germanium R.T. Shuey, Phys. Rev 139, 5A (1965)
- [Si1] Exzitonbildungs- und Relaxationsdynamik nach optischer Anregung an der Halbleiterbandkante K. Siantidis, Dissertation, WWU Münster 2002
- [Si2] Dynamics of exciton formation for near band-gap excitations K. Siantidis, V.M. Axt und T. Kuhn, Phys. Rev. B 65, 035303 (2001)
- [Sno] Long-range transport in excitonic dark states in coupled quantum wells D. Snoke, S. Denev, Y. Liu, L. Pfeiffer und K. West, Nature, 418, 754 (2002)
- [Spa] Monte-Carlo-Simulationen im Risikomanagement f
 ür derivative Finanzinstrumente Dr. Klaus Spanderen, Allgemeines Physikalisches Kolloquium WWU M
 ünster (WS 2002/2003)
- [St1] Quantentheorie Stingl, Skriptum SS 1998, WWU Münster
- [St2] Statistische Physik Stingl, Skriptum WS 1997/98 WWU Münster
- [Tak] Monte Carlo simulations of the spatial transport of excitons in a quantum well structure Y. Takahashi, Phys. Rev. B 53, 11 (1996)
- [Thr] Interplay between coherent and incoherent scattering in quantum well secondary emission A. Thränhardt, S. Kuchenburg, A. Knorr, P. Thomas und S.W. Koch Phys. Rev. B 62, 24 (2000)
- [Tra] Gitterdynamische Untersuchung des ferroelektrischen Phasenübergangs in Perowskiten T. Trautmann, Diplomarbeit, WWU Münster 2002
- [Uml] Exzitonthermalisierung und optische Verstärkung in Heterostrukturen auf Basis des II-VI-Halbleiters Zinkselenid M. Umlauff, Dissertation, TH Karlsruhe, 1997
- [Vog] Gerthsen Physik H. Vogel, Springer 19. Auflage 1995
- [Vol] Ortsaufgelöste ultraschnelle Ladungsträgerdynamik in Halbleiterquantenfilmen M. Vollmer, Dissertation, Philipps-Universität Marburg 1999
- [Vur] Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys I. Vurgaftman, Appl. Phys. Rev.89, 11 (2001)
- [Wag] Stochastic models and Monte Carlo algorithms for Boltzmann type equations W. Wagner, preprint 831 ISSN 0946-8633, WIAS-Berlin (2003)

- [Wal] Gewöhnliche Differentialgleichungen W. Walter, Springer 1996
- [Wig] On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium E. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932)
- [Wu] Growth of Au-catalyzed ordered GaAs nanowire arrays by molecular-beam epitaxy Z.H. Wu, X. Y. Mei, D. Kim, M. Blumin und H.E. Ruda, Appl. Phys. Lett. 81, 27 (2002)
- [Yoo] In-plane transport of photoexcited carriers in GaAs quantum wells H. W. Yoon, D. R. Wake und J. P. Wolfe, Phys. Rev. B 46, 13461 (1992)
- [Zh1] Hot exciton transport in ZnSe quantum wells Hui Zhao, Sebastian Moehl, Sven Wachter und Heinz Kalt, Appl. Phys. Lett. 80, 1391 (2002)
- [Zh2] Energy relaxation during hot-exciton transport in quatum wells: Direct observation by spatially resolved phonon-sideband spectroscopy Hui Zhao, Sebastian Moehl und Heinz Kalt, Appl. Phys. Lett. 81, 2794 (2002)
- [Zh3] Spatio-temporal dynamics of quantum-well excitations Hui Zhao, B. Dal Don, S. Moehl und H. Kalt, Phys. Rev. B 67, 035306 (2003)
- [Zh4] Hot exciton transport in ZnSe quantum wells Hui Zhao, S. Moehl und H. Kalt, phys. stat. sol. (b) 229, 577 (2002)
- [Zh5] Coherence Length of Excitons in a Semiconductor Quantum Well Hui Zhao, S. Moehl und H. Kalt, Phys. Rev. Lett.89, 9 (2002)
- [Zim] Theory of Dephasing in Semiconductor Optics R. Zimmermann, phys. stat. sol. (b) 173, 129 (1992)

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Alle Stellen, die anderen Werken dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, habe ich in jedem Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht.

Münster, den 1. Juni 2003

Danksagung

Ohne die gute Betreuung in der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Kuhn wäre es mir niemals möglich gewesen, diese Arbeit zu realisieren. Deshalb möchte ich mich vor allem bei Herrn Prof. Dr. Kuhn und Herrn Dr. Axt für die gute Betreuung und die interessante Themenstellung bedanken.

Die gesamte Arbeitsgruppe sorgte für ein sehr angenehmes Arbeitsklima und trug so, wie auch durch große Hilfsbereitschaft, sehr zu meiner Diplomarbeit bei.

Kathrin Duwe und Annette Krügel gilt mein besonderer Dank dafür, viel Mühe in die Korrektur meiner Arbeit investiert zu haben.