Publikationsreihe des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC)
NIC-Serie Band 5

John von Neumann-Institut für Computing (NIC)

Reinhold Lövenich

Elektron–Elektron–Wechselwirkung in Halbleitern

Von hochkorrelierten kohärenten Anfangszuständen zu inkohärentem Transport

Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades am Fachbereich Physik der Universität Dortmund

NIC-Serie Band 5

ISBN 3-00-006329-3

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme
Ein Titeldatensatz für diese Publikation ist bei
Der Deutschen Bibliothek erhältlich.

Herausgeber:	NIC-Direktorium
Vertrieb:	NIC-Sekretariat Forschungszentrum Jülich 52425 Jülich Deutschland
	Internet: www.fz-juelich.de/nic
Druck:	Graphische Betriebe, Forschungszentrum Jülich
Umschlag:	Graphische Betriebe, Forschungszentrum Jülich

NIC-Serie Band 5
ISBN 3-00-006329-3

Elektron–Elektron–Wechselwirkung in Halbleitern

Von hochkorrelierten kohärenten Anfangszuständen zu inkohärentem Transport

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung Physik der Universität Dortmund

vorgelegt von
Diplom–Physiker

Reinhold Lövenich

aus Jülich

John von Neumann–Institut für Computing
Forschungszentrum Jülich
1999

Hauptberichter:	Prof. Dr. W. Schäfer
Mitberichter:	Prof. Dr. W. Weber
Tag der Einreichung:	31.08.1999
Tag der mündlichen Prüfung:	15.10.1999

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Nichtgleichgewichts–Greensche–Funktionen **7**

2.1 Zeitentwicklung im Nichtgleichgewicht 8

2.2 Definition der Einteilchen–Greenschen–Funktionen 12

2.3 Bewegungsgleichungen der Einteilchen–Greenschen–Funktionen 15

2.4 Abgeschirmte Wechselwirkung, Polarisation und Vertex–Funktion . . 18

2.5 LO–Phonon–Streuung 19

3 Greensche Funktionen und kohärentes Entkopplungsschema **21**

3.1 Greensche Funktionen und Dichtematrizen 23

3.2 Abbruch der Hierarchie 29

3.3 Bewegungsgleichungen der relevanten Korrelationsfunktionen 31

4 Biexzitonen **35**

4.1 Das Vierwellen–Mischen 36

4.2 Bewegungsgleichungen 38

4.3 Eigenfunktions–Entwicklung 41

4.3.1 Antisymmetrisierung der Entwicklung 41

4.3.2 Relevante Eigenfunktionen 43

4.3.3 Entwickelte Bewegungsgleichungen 46

4.4 Modellierung und numerische Implementierung 48

4.5 Ergebnisse 52

4.5.1 Abhängigkeit von der Anregungsdichte 52

4.5.2 Abhängigkeit vom Magnetfeld 55
4.5.3 Spektren inklusive der Exziton–Exziton–Wechselwirkung . . . 58
4.5.4 Frequenzspektren 59
4.5.5 Zeitaufgelöstes Vierwellen–Mischen 61

5 Elektronischer Transport in Halbleiter–Heterostrukturen 65
5.1 Motivation und Experiment 66
5.2 Weyl–Transformation und Gradienten–Entwicklung 68
5.3 Das elementare Modell 71
5.3.1 Randbedingungen und Diskretisierung 72
5.3.2 Grundsätzliche Ergebnisse 77
5.3.3 Konvergenz bezüglich numerischer Parameter 81
5.4 LO–Phonon–Streuung 86
5.5 Entwicklung im Hochtemperatur–Limes 88
5.6 Selbstkonsistenz 91
5.6.1 Selbstkonsistenz der Randbedingungen 92
5.6.2 Selbstkonsistenz des Potentials 94
5.7 Bewegungsgleichungen und Ergebnisse 96
5.7.1 Bewegungsgleichung der Entwicklungskoeffizienten 96
5.7.2 Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnungen 97
5.7.3 Ergebnisse der Elektron–Phonon–Kopplung 101

6 Zusammenfassung und Ausblick 105

A Ableitung der Einteilchen–Selbstenergie 109

B Bloch–Elektron im Magnetfeld 113

C Verallgemeinerte Heitler–London–Entwicklung 115

D Matrixelemente der Biexziton- und Polarisationsgleichungen 117

E Hebung einer integrablen Singularität 121

F Formale Summation der Gradientenentwicklung 125

G Matrixelemente der Elektron–Phonon–Streuung **127**

Abbildungsverzeichnis **131**

Literaturverzeichnis **133**

Danksagung **143**

Lebenslauf **145**

Kapitel 1

Einleitung

Die moderne Halbleiterphysik ist gekennzeichnet durch eine Reduktion der Längenskalen der Bauelemente und der Zeitskalen von Anregungsprozessen, wobei dabei vor allem optische Anregungen relevant sind. Mit zunehmender Miniaturisierung sollen die Speicherkapazität der Bauelemente erhöht und die Schaltzeiten verkürzt werden, was zu größerer Rechenleistung von Computern führt.

Weiterentwicklungen der Lithographie–Technik haben niederdimensionale Halbleiterstrukturen im Nanometerbereich ermöglicht, deren Längenskalen damit unterhalb der Kohärenzlänge zweier Streupartner, d. h. der mittleren freien Weglänge zwischen zwei inelastischen Stößen, liegt. Die Entwicklung von ultrakurzen optischen Pulsen [108] ermöglicht die Anregung von Ladungsträgern in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen im Piko- und Femtosekundenbereich. Im Unterschied zu den viel langsameren elektrischen Anregungen wird dabei eine kohärente Anregung der Ladungsträger erreicht, weil sich die Kohärenz des Lichtfeldes auf das Ladungsträgersystem überträgt. Auf diesen Zeitskalen sind die Phasenbeziehungen der Streupartner noch relevant und können experimentell beobachtet werden [90].

Zunehmend kommt man damit in Bereiche, in denen Quanteneffekte wichtig werden. Dies geschieht automatisch, wenn die Längenskalen der Halbleiterstrukturen in Bereiche der Orts–Impuls–Unschärfe oder die optischen Anregungszeiten in den Bereich der Energie–Zeit–Unschärfe der entsprechenden Ladungsträger vordringen. Das ist in der heutigen Halbleiterphysik genau der Fall.

Grundvoraussetzung für die Funktion aller elektronischen Halbleiterbauelemente ist die Bewegung von Ladungsträgern unter dem Einfluß bzw. nach einer externen Anregung. Zusammen mit den Gitterbausteinen des Kristallgitters stellen sie ein quantenmechanisches Vielteilchensystem im Nichtgleichgewicht dar, dessen Dynamik durch *Streuprozesse* bestimmt ist. Zwei wesentliche Streuprozesse können anhand der beteiligten Partner unterschieden werden: Die Coulomb–Streuung der

Ladungsträger untereinander sowie die Streuung der Ladungsträger mit den quantisierten Anregungen der Gitterbausteine, d. h. die Elektron–Phonon–Streuung. Die Rolle der Coulomb–Wechselwirkung ist zweifach: Zum einen bewirkt sie die Ausbildung von Korrelationen auf einer kurzen Zeitskala und bedingt so die *kohärente* Dynamik des Systems. Zum anderen bewirkt sie die Relaxation des Systems in einen Quasigleichgewichtszustand. Für die Zerstörung der Kohärenz und den Übergang zur *inkohärenten* Dynamik ist die Elektron–Phonon–Streuung verantwortlich.

Während die Coulomb–Streuung auf sehr kurzen Zeitskalen für die *kohärente* Dynamik relevant ist, ist es die Elektron–Phonon–Streuung vor allem auf längeren Zeitskalen für die *inkohärente* Dynamik.

Die Miniaturisierung der Halbleiter verändert aber nicht nur die elektronischen Zustände, sondern auch deren Streuprozesse, da der geänderte Potentialverlauf in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen natürlich auch die Wechselwirkungspotentiale verändert. Die Streupotentiale sind dementsprechend ebenfalls dimensionsreduziert und verschieden vom ursprünglichen Volumenmaterial, was wiederum die auftretenden Quanteneffekte entscheidend beeinflußt. Die Untersuchung solcher Streuprozesse ist daher von zentraler Bedeutung für das physikalische Verständnis des Ladungstransportes in niederdimensionalen Halbleitern und ist eines der Hauptanliegen der vorliegenden Arbeit.

Je nach Einschränkungsgrad der Bewegung der Ladungsträger spricht man von einem zweidimensionalen Elektronengas (2DEG), einem Quantendraht (1DEG) bzw. einem Quantenpunkt. Der Quantenpunkt repräsentiert dann einen nahezu idealen nulldimensionalen Quantentopf im Sinne der Quantenmechanik, in dem die Elektronenzustände völlig diskretisiert sind [128]. Durch Anlegen eines Magnetfeldes lassen sich dann noch die Spinentartungen der Elektronenzustände aufheben und Landau–Bänder [68] erzeugen. Dadurch wurde es möglich, bekannte Quanteneffekte wie das Tunneln von Elektronen durch eine Barriere [17, 28] detailliert zu studieren aber auch neue Quanteneffekte zu entdecken. Bekanntestes Beispiel dafür ist der Quanten–Hall–Effekt, bei dem die Strom–Spannungs–Kennlinie charakteristische Stufen aufweist [118]. Beide Effekte haben zu direkten Anwendungen geführt, wie der resonanten Tunneldiode [59, 123] oder des Einzelelektron–Tunneltransistors [37, 66]. Quanten–Hall–Proben werden als Eichnormal für den elektrischen Widerstand verwendet [117], weil sie eine sehr genaue Beziehung zwischen Strom und Spannung vermitteln. Die beiden letztgenannten Anwendungen haben weitreichende Perspektiven für die physikalische Forschung [42]: Ein hochpräziser Einzelelektron–Tunneltransistor kann als frequenzgesteuerte Stromquelle dienen und würde es erlauben, die Stromeinheit Ampere nicht mehr wie bisher über die Masseneinheit Kilogramm, sondern über die Elementarladung e zu definieren. Da der Josephson-Effekt [39, 53] die Spannung und die Frequenz über Elementarkonstanten miteinander verknüpft [19] und als Eichnormal für die Spannung dient, könnten dann der Josephson–Effekt und der Quanten–Hall–Effekt auf ihre Universalität, d. h. auf eine Beschreibung ausschließlich durch Elementarkonstanten getestet werden [42]. Damit wird es auch möglich, die Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/2\varepsilon_0 hc$ genauer zu bestimmen. Entsprechende Vorschläge gibt es bereits [127]. Die Resultate würden zum Test der Quantenelektrodynamik (QED) dienen [115].

Obwohl die Genauigkeit vergleichbarer Messungen schon beeindruckend ist[1], ist sie für einen Einzelelektronen-Transistor noch nicht ausreichend. Dem im Wege stehen vor allem durch Coulomb–Blockade–Streuungen verursachte Tunnelprozesse [6, 5], die die Präzision der Messung begrenzen [65, 40, 44]. Ein besseres Verständnis von Streuprozessen in dimensionsreduzierten Coulomb–Systemen, zu dem die vorliegende Arbeit einen Beitrag leisten will, ist deshalb auch hier von entscheidender Bedeutung.

Es sei angemerkt, daß in den letzten Jahren auch eine Reihe anderer Quanteneffekte im Transport in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen gefunden wurden, bei denen Streuprozesse keine große Rolle spielen bzw. den jeweiligen Effekt zerstören. Als Beispiele seien genannt:

(i) universelle Leitfähigkeitsfluktuationen [70, 2, 30] wo die statistische, aber für eine vorgegebene Probe feste Anordnung von Streuzentren zu charakteristischen Fluktuationen der Leitfähigkeit von der Größenordnung $2e^2/h$ führt, die reproduzierbar sind, solange die Streuzentren nicht z. B. durch Erwärmung modifiziert werden;

(ii) die schwache Lokalisierung [15, 4], die zu einem anomalen Verlauf des Magnetowiderstands führt und durch Interferenz zweier durch Zeitumkehr ineinander überführbarer Pfade zustande kommt;

(iii) der Aharonov–Bohm–Effekt in ungeordneten Materialien [3, 109], der die Abhängigkeit der Phase vom Vektorpotential zeigt.

(iv) ballistischer, also streufreier Transport [48], der in Proben, deren Dimensionierung weit unterhalb der Streulänge der Elektronen liegt, und bei tiefen Temperaturen beobachtet wird.

Vom Standpunkt der Anwendbarkeit von Bauelementen auch der modernen Halbleitertechnik müssen aber einfachere Strukturen bei endlichen Temperaturen betrachtet werden, so daß Quanteneffekte, bei denen Streuprozesse auftreten, für praktische Anwendungen wesentlich wichtiger sind. Gerade deshalb ist ein besseres Verständnis der Wirkung von Streuprozessen in Vielteilchensystemen in niederdimensionalen Halbleitern so wichtig. Dies gilt vor allem auch für ein quantitatives Verständnis.

[1] In Systemen mit einer supraleitenden Insel und normalleitenden Zuleitungen konnte der Unterschied der Grundzustandsenergien bei gerader und ungerader Elektronenzahl auf der supraleitenden Insel beobachtet werden [27]. Obwohl etwa 10^9 Elektronen auf der Insel vorhanden sind, ist meßbar, ob *jedes* Elektron einen Partner zur Kopplung zum Cooperpaar findet oder nicht.

In Transport–Experimenten, die auf einer externen Spannungsanregung basieren, liegt die Anregungszeit in der Regel weit über der Kohärenzzeit der Ladungsträger, so daß Phasenbeziehungen zwischen den Streupartnern von Anfang an nicht relevant sind. Das Vielteilchensystem durchläuft dort eine rein *inkohärente Dynamik*. Im Gegensatz dazu durchläuft das Vielteilchensystem nach einer ultrakurzen optischen Anregung zunächst das Stadium einer *kohärenten Dynamik*. Das bedeutet, daß die Phasenbeziehungen zwischen den Ladungsträgern noch existent sind. Zeitaufgelöste Experimente zeigen dann sogenannte *Quantenschwebungen*, d. h. Schwebungen der Polarisation der angeregten Übergänge im System. Die Frequenz der Quanten–Schwebungen ist umgekehrt proportional zur Energie des Übergangs, was bei einer resonanten Anregung die Energie eines Quasiteilchens bedeutet. Die zeitaufgelöste Spektroskopie der Polarisationsdynamik erlaubt daher, die Anregungen von Quasiteilchen, aber auch wechselwirkungsinduzierte Vielteilcheneffekte zu messen, weil die Schwebungsfrequenzen sehr sensitiv auf Energieverschiebungen der jeweiligen Übergänge reagieren. Besonders interessant in Halbleitern ist dabei die Nähe der Bandkante, weil die dort liegenden exzitonischen Anregungen große optische Nichtlinearitäten erzeugen, die im Experiment auch ausgenutzt werden. Auf diese Weise konnte z. B. der Optische Stark–Effekt in Halbleitern gemessen werden, bei dem sich eine wechselwirkungsinduzierte Blau-Verschiebung der Exzitonenenergien ergibt [87, 62]. Ebenso konnten Biexzitonen spektroskopiert werden [85, 91, 78, 89, 33, 23]. Die verwendeten zeitaufgelösten Techniken sind dabei verschieden und reichen von einfachen Pump–Probe–Techniken [120, 52] über zeitaufgelöste Lumineszenzmessungen [112] bis hin zu aufwendigeren Vierwellen–Misch–Experimenten [74]. Weitere Aspekte der Polarisationsdynamik in Halbleitern, die bisher erfolgreich mit zeitaufgelöster kohärenter optischer Spektroskopie untersucht wurden, sind z. B.:

(i) die Phasenrelaxation freier Ladungsträger [14] und von Exzitonen [84, 106, 105, 64, 72],

(ii) Ladungsoszillationen in Doppelquantentopf–Strukturen [73, 71, 95] und Übergittern [29, 121],

(iii) Vielteilcheneffekte [74, 124, 56, 57] sowie

(iv) die Emission kohärenter elektromagnetischer Strahlung im THz–Bereich [95, 121, 92].

Exzitonen und Biexzitonen sind Korrelationen zwischen Elektronen und Löchern in Halbleitern, wobei Exzitonen Zweiteilchen–Korrelationen und Biexzitonen Vierteilchen–Korrelationen entsprechen. Die zeitaufgelöste Spektroskopie ist also auch immer eine Spektroskopie der jeweiligen Korrelationsdynamik im System, die sich durch Streuprozesse, die die Korrelationen nach und nach zerstören, von einer kohärenten hin zu einer inkohärenten Dynamik entwickelt.

Besonders interessant und herausfordernd für die Theorie ist die Übergangsphase zwischen kohärenter und inkohärenter Dynamik, die zusätzlich noch sehr von der jeweiligen Anregungsdichte des Experimentes abhängt. Bei sehr hohen Anregungsdichten wird die Coulomb–Wechselwirkung durch inkohärent gewordene elektronische Dichten abgeschirmt und Korrelationseffekte werden sehr schnell zerstört. Bei niedrigen Anregungsdichten verläuft das Aussterben der Korrelationen entsprechend langsamer. Korrelationseffekte sind also insbesondere bei niedrigen Anregungsdichten sehr wichtig. In beiden Fällen jedoch führen Streuprozesse zu einer fortschreitenden Dephasierung und einer Entwicklung hin zu rein inkohärenter Dynamik. Letztere entspricht dann, wie bereits erwähnt, der Nichtgleichgewichts–Dynamik, die in einem spannungsgetriebenen Transport–Experiment von Anfang an abläuft.

Aus theoretischer Sicht unbefriedigend war bisher, daß die beiden Situationen durch verschiedene theoretische Konzepte beschrieben wurden. Für die Beschreibung von Transportphänomenen hat sich die Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen als sehr geeignet erwiesen, da man sich dort auf Einteilchen–Eigenschaften der Dynamik beschränken kann. Diese Theorie kann auch auf optische Experimente erfolgreich angewendet werden, vor allem bei der Beschreibung von Prozessen hoher Dichten oder einer Anregung hoch im Leitungsband des Halbleiters, wonach die Elektronen sehr schnell in eine inkohärente Verteilung relaxieren.

Für die Beschreibung der hochkorrelierten Dynamik bei niedrigen Anregungsdichten hat sich jedoch die Theorie der Dichtematrizen, sei es im Impuls- oder Ortsraum, als erfolgreich erwiesen. Diese ist aber bisher nicht in der Lage, den Übergang zu inkohärenter Dynamik und die dabei wichtigen Abschirmungseffekte angemessen zu beschreiben.

In der vorliegenden Arbeit werden der Zusammenhang der Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen und der Dichtematrixtheorie für den Fall kohärenter optischer Anregungen diskutiert und Ansätze für eine einheitliche Theorie auf der Grundlage der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen gegeben. Der Dichtematrix–Formalismus wird auf das Vierteilchen–Problem in einem Halbleiter im starken Magnetfeld angewandt und das Problem wird erstmals vollständig gelöst. Vergleiche zu entsprechenden Vierwellen–Misch–Experimenten erlauben die Interpretation von Signaturen und Abfallszeiten, wie sie in bisherigen Rechnungen basierend auf den Halbleiter–Bloch–Gleichungen und damit der Hartree–Fock–Näherung nicht möglich sind. Es wird gezeigt, daß erst eine detaillierte Behandlung der Coulomb–Wechselwirkung unter Einschluß von Vierteilchen–Korrelationen eine schlüssige Interpretation der Experimente erlaubt.

Eine einheitliche Theorie zur Beschreibung der Hoch- und Niederdichteanregung eines Halbleiters in der Greensfunktions–Formulierung beschreibt auch den Übergang der kohärenten zur inkohärenten Dynamik. Die inkohärente Dynamik von Transportphänomenen in Halbleiterheterostrukturen stellt den zweiten Schwerpunkt dieser Arbeit dar. Im Hinblick auf die Interpretation von Transportexperimenten ist die Elektron–Phonon–Wechselwirkung von größerer Bedeutung, wird aber häufig nur in einfachen Modellen berücksichtigt [25, 35, 36, 20].

Bisherige Rechnungen zum Transport in Heterostrukturen basieren auf der stationären Quanten–Boltzmann–Gleichung für die Elektronenverteilung, weil man sich im Experiment meist nur für eine Strom–Spannungs–Kennlinie interessiert, für die die zeitliche Entwicklung des Transportprozesses irrelevant ist. Im einfachsten Fall kann man die stationäre Boltzmann–Gleichung sogar durch Matrixinversion lösen [34, 35]. Nimmt man das induzierte Potential und insbesondere die Elektron–Phonon–Wechselwirkung hinzu, ist ein solches Vorgehen nicht mehr möglich. Außerdem erhöht die Hinzunahme der Elektron–Phonon–Wechselwirkung die Dimensionalität des Problems, was zu numerischen Problemen führt.

Wie in der vorliegenden Arbeit gezeigt wird, ist es deshalb besser, die ursprüngliche nichtstationäre Boltzmann–Gleichung in der Zeitebene zu behandeln und den stationären Endzustand durch Aufintegration dieser Gleichung zu bestimmen. Es wird gezeigt, daß basierend auf diesem Verfahren auch die Elektron–Phonon–Streuung berücksichtigt werden kann. Dazu ist es notwendig, die elektronische Verteilungsfunktion bezüglich der Radialkoordinate bei Erfüllung der Randbedingungen in ein günstiges Funktionensystem zu entwickeln, das mit sehr wenigen Entwicklungskoeffizienten auskommt. Ein solches Funktionensystem wird in der vorliegenden Arbeit angegeben. Entsprechende Rechnungen werden für eine resonante Tunneldiode durchgeführt.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen: In Kapitel 2 wird eine Einführung in die Theorie Greenscher Funktionen für das Nichtgleichgewicht gegeben. Kapitel 3 enthält eine vergleichende Diskussion der Dichtematrix–Methode im Impulsraum mit der Greens–Funktions–Theorie unter dem Aspekt einer einheitlichen Theorie für die Beschreibung des Übergangs von kohärenter zu inkohärenter Nichtgleichgewichts–Dynamik in korrelierten Vielteilchensystemen. In Kapitel 4 wird die in den Kapiteln 2 und 3 entwickelte Theorie auf das Vierteilchen–Problem in einem Halbleiter im starken Magnetfeld angewandt. Es werden Bewegungsgleichungen für exzitonische und biexzitonische Korrelationen bei voller Berücksichtigung der Coulomb–Wechselwirkung abgeleitet und numerisch gelöst. Die Resultate werden anhand von neuesten Experimenten und früheren Rechnungen auf Basis der Halbleiter–Bloch–Gleichungen erläutert und interpretiert. In Kapitel 5 wird die Theorie für den inkohärenten Transport in einer resonanten Tunneldiode basierend auf der Greens–Funktions–Theorie in der Zeitebene entwickelt. Die Elektron–Phonon–Streuung wird in die Theorie eingebaut, wofür das Vorhandensein eines geeigneten Funktionensystems zur Entwicklung in der Radialkoordinate der Verteilungsfunktion als essentiell erkannt wird. Ein solches System wird dort angegeben. Die nichtlinearen zeitabhängigen Gleichungen werden gelöst und mit stationären Rechnungen verglichen. Kapitel 6 enthält eine zusammenfassende Darstellung der Resultate dieser Arbeit sowie einen Ausblick auf Probleme, die in naher Zukunft mit Hilfe der hier vorgelegten Resultate angegangen und gelöst werden können.

Kapitel 2

Nichtgleichgewichts–Greensche–Funktionen

Für die quantenmechanische Behandlung von Vielteilchensystemen im Nichtgleichgewicht gibt es verschiedene theoretische Zugänge: Nichtgleichgewichts–Greensche–Funktionen [54, 55, 26, 24, 101], kinetische Gleichungen, die auf der Dichtematrix–Darstellung im Ortsraum basieren [110, 11, 111, 129, 8, 9], die Dichtematrix–Methode im Impulsraum [104, 11, 122, 98] sowie Projektionstechniken [88, 130, 94, 41].

Die beiden erstgenannten Methoden sind eng miteinander verwandt. So stimmt z. B. die Einteilchen–Dichtematrix überein mit der gleichzeitigen Greenschen Funktion $G^{<}$ (in Kadanoff–Baym–Schreibweise [54]) oder G^{+-} (in Keldysh–Schreibweise [55]). Beide Formalismen arbeiten mit der Zeitentwicklung der Operatoren und führen im allgemeinen auf ein System von unendlich vielen gekoppelten Differentialgleichungen, für das geeignete Näherungen gefunden werden müssen, um sich auf eine endliche Zahl von Erwartungswerten beschränken zu können und ein geschlossenes System von Gleichungen zu erhalten.

Eine Standardnäherung, die unter anderem diese notwendigen Forderungen erfüllt, ist die Hartree–Fock–Näherung, bei der man sich durch geeignete Faktorisierungen auf Zweiteilchen–Dichtematrizen bzw. Zweiteilchen–Greensche–Funktionen zurückziehen kann. Es handelt sich um eine sogenannte Näherung des gemittelten Feldes *(Mean–Field–Approximation)*, d. h. kompliziertere Erwartungswerte werden durch Produkte einfacher Erwartungswerte und Dichten ersetzt, höhere Korrelationen werden dadurch vernachlässigt.

Will man über eine solche Näherung hinausgehen, können verschiedene Methoden auch verschiedene Ergebnisse liefern. Mehr noch können im Verlaufe der Herleitung nötige Näherungen in den verschiedenen Methoden unterschiedliche Auswirkungen haben. Dabei hängt es nicht nur vom Problem, sondern auch von persönlichen Vorlieben ab, welche Methode bevorzugt wird.

Die Dichtematrix–Methode hat sich als besonders geeignet und erfolgreich bei der Behandlung kohärenter Systeme erwiesen, denn in diesen Systemen kann die entstehende Hierarchie von kinetischen Gleichungen systematisch abgebrochen und entkoppelt werden. Das Abbruchschema wird jedoch fragwürdig, wenn inkohärente Besetzungen von Elektronen und Löchern bedeutsam werden. Trotzdem kann man die Dichtematrix–Methode anwenden, um Approximationsschemata jenseits der Hartree–Fock–Näherung zu entwickeln. Um das Gleichungssystem zu schließen, z. B. auf der Ebene von Einteilchen–Funktionen, müssen die Quellen von Korrelationen höherer Ordnung jedoch durch Einteilchen–Eigenschaften ausgedrückt werden. Dies geschieht häufig willkürlich oder durch ein *a–priori*–Wissen über das erwartete Ergebnis. Auch wenn es möglich ist, systematische Approximations–Schemata innerhalb des Dichtematrix–Formalismus zu entwickeln, gibt es andere Methoden, dieses Problem anzugehen.

Eine geeignetere Methode liefert die Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen. Im Gegensatz zum Gleichgewicht oder zum Fall verschwindender Temperaturen genügt hier nicht eine einzige Greensche Funktion, sondern es wird eine Matrix bestehend aus vier Funktionen benötigt, von denen allerdings nicht alle unabhängig voneinander sind. Der wesentliche Unterschied zum Dichtematrix–Formalismus besteht in der Zweizeitigkeit der entstehenden Korrelationsfunktionen. Diese ergibt sich zwangsläufig, wenn anstelle von Systemen von Gleichungen jeweils eine geschlossene Gleichung eingeführt wird. Die Durchführung der Theorie in einer Zweizeit–Formulierung scheint zwar zunächst kompliziert, erlaubt jedoch die Entwicklung konsistenter Approximations–Schemata, die auf die systematische Trennung von Ein-, Zwei-, ... n-Teilchen Eigenschaften zurückgeführt werden können. Ein weiterer Vorteil dieser Methode besteht in ihrer Nähe zur Theorie der Greenschen Funktionen im Gleichgewicht, insbesondere der Existenz einer Dyson–Gleichung, und damit verbunden der Anwendbarkeit graphischer Techniken.

Die Theorie Greenscher Funktionen und insbesondere ihre Anwendung auf Nichtgleichgewichtssituationen wurde durch mehrere Autoren entwickelt und schon häufiger zusammenfassend dargestellt [101, 55, 24, 102]. Im Folgenden soll eine kompakte Einführung in die Theorie der Nichtgleichgewichts–Greensche–Funktionen gegeben werden, die angelehnt ist an die Theorie für den Gleichgewichtsfall. Wir beginnen unsere Überlegungen mit der Betrachtung eines quantenmechanischen Erwartungswertes unter der Einwirkung einer externen Störung.

2.1 Zeitentwicklung im Nichtgleichgewicht

In dieser Arbeit werden wir dynamische Phänomene betrachten, also Systeme, die sich weitab von ihrem Gleichgewichtszustand befinden. Dies hat auch Auswirkungen auf die theoretische Beschreibung. Gleichgewichtszustände sind Gegenstand der

Thermodynamik. Diese liefert allein aus statistischen Prinzipien Aussagen über die Besetzung von Zuständen des Systems. Das wesentliche Ergebnis einer mikroskopischen Theorie des Systems ist daher die Beschreibung der möglichen Zustände des Systems.

Anders ist die Situation im Nichtgleichgewicht. Die Besetzung von Zuständen des Systems kann hier nicht aus statistischen Prinzipien abgeleitet werden. Vielmehr ist sie abhängig von der externen Anregung und den Wechselwirkungen im System. Es entwickelt sich also eine komplexe Dynamik eines Vielteilchensystems.

Wie wir in diesem Kapitel noch zeigen werden, ist es im Gleichgewicht ausreichend, das System durch eine einzige Greensche Funktion zu beschreiben. Im Nichtgleichgewicht wird diese Funktion nicht nur zeitabhängig. Vielmehr muß man mehrere Greensche Funktionen einführen, um das System beschreiben zu können.

Bevor wir aber zu den Greenschen Funktionen kommen, betrachten wir zunächst den Erwartungswert eines beliebigen Operators $\hat{O}$ für ein System unter dem Einfluß des Hamilton–Operators $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ext}}(t)$. Hier soll $\hat{H}_0$ alle internen Wechselwirkungen des Systems beschreiben und zeitunabhängig sein. Die externe Störung des Systems wird durch $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$ beschrieben. Dabei stellen wir uns vor, daß die Störung zum Zeitpunkt t_0 eingeschaltet wird. Für den Erwartungswert gilt

$$\langle \Psi(t)|\hat{O}|\Psi(t)\rangle \;=\; \langle \Psi_0|S^{\dagger}(t,t_0)\,\bar{O}(t)\,S(t,t_0)\,|\Psi_0\rangle\,, \tag{2.1}$$

wobei wir $|\Psi_0\rangle = |\Psi(t_0)\rangle$ als Anfangsbedingung gesetzt haben. $S(t,t_0)$ ist der *Zeitentwicklungsoperator* von t_0 nach t im Wechselwirkungs–Bild. Er erfüllt eine Integralgleichung, die sich äquivalent auch in eine der *Schrödinger–Gleichung* entsprechende Differentialgleichung umschreiben läßt:

$$S(t,t_0) \;= 1 - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} dt'\,\bar{H}_{\text{ext}}(t')\,S(t',t_0) \tag{2.2}$$

Diese Integralgleichung läßt sich formal lösen, indem man sie in sich iteriert und die entstehende Reihe aufsummiert. Es ergibt sich

$$S(t,t_0) \;= T_+\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} dt'\,\bar{H}_{\text{ext}}(t')\Big]\,. \tag{2.3}$$

Hier beschreibt T_+ den positiven Zeitordnungsoperator, dessen Wirkung darin besteht, Produkte von zeitabhängigen Operatoren so zu ordnen, daß die Zeitargumente von rechts nach links ansteigen. Um den Erwartungswert in (2.1) berechnen zu können, wird auch der adjungierte Operator $S^{\dagger}(t,t_0) = S(t_0,t)$ benötigt. Die Ableitung des Ausdrucks für den adjungierten Operator erfolgt völlig analog. Da

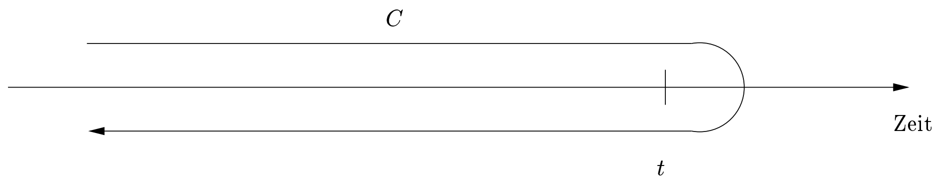


Abbildung 2.1: Zeitkontur C der Greenschen Funktion

aber t und t_0 vertauscht sind, wird nun die negative Zeitordnung benötigt, also der Operator T_-, der Produkte von Operatoren mit von links nach rechts ansteigenden Zeitargumenten ordnet.

$$S(t_0,t) \; = T_- \; \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \bar{H}_{\text{ext}}(t')\right] . \tag{2.4}$$

Das Auftreten von positiver wie negativer Zeitordnung im Erwartungswert hat wichtige Konsequenzen. Um das einzusehen, nehmen wir einmal an, daß $S(t,t_0)$ nicht die Zeitentwicklung unter der Wirkung einer äußeren Störung $\bar{H}_{\text{ext}}(t)$ beschreibt, sondern eine interne Wechselwirkung, die adiabatisch eingeschaltet wird. In diesem Fall ist die Wirkung von $S(t,t_0)$ auf den Grundzustand wieder proportional zum Grundzustand und es kann keine Beimischung angeregter Zustände auftreten, da es sich ja um eine interne Wechselwirkung handelt. Damit erhalten wir aus Gleichung (2.1):

$$\begin{aligned}\langle\Psi_0|S(t_0,t)\;\bar{O}(t)\,S(t,t_0)\,|\Psi_0\rangle &= \langle\Psi_0|S(t_0,t)\,|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\bar{O}(t)\,S(t,t_0)\,|\Psi_0\rangle \\ &= \langle S(t_0,t)\,\rangle\langle\bar{O}(t)\,S(t,t_0)\,\rangle \\ &= \frac{\langle\bar{O}(t)\,S(t,t_0)\,\rangle}{\langle S(t,t_0)\,\rangle} . \end{aligned} \tag{2.5}$$

Den letzten Schritt kann man einsehen, wenn man den Identitätsoperator als Spezialfall einsetzt. Um die Notation kompakt zu halten, haben wir die Erwartungswerte $\langle\Psi_0|\ldots|\Psi_0\rangle$ durch $\langle\ldots\rangle$ ersetzt. Im Gleichgewicht benötigt man somit zur Berechnung des Erwartungswertes einer Observabeln nur die positive Zeitordnung. Die Faktorisierung (2.5) ist aber nicht mehr möglich, wenn aufgrund einer zeitabhängigen äußeren Störung auch angeregte Zustände ins Spiel kommen. Im Nichtgleichgewicht muß daher auch die negative Zeitordnung berücksichtigt werden.

Formal ist es am einfachsten, wenn es nur *eine* Zeitordnung gibt, die entlang einer *Zeitkontur* C verläuft. Diese Zeitkontur erstreckt sich von t_0 nach t in positiver Zeitrichtung und dann wieder zurück nach t_0. Außerdem können wir die Identität $S(t,\infty)\,S(\infty,t) \;=\; 1$ benutzen und $t_0 \;=\; -\infty$ setzen, so daß sich die Zeitkontur von $-\infty$ nach ∞ und wieder zurück nach $-\infty$ erstreckt. Damit können wir den Erwartungswert in folgender Form schreiben:

$$\begin{aligned}\langle\bar{O}(t)\rangle &= \langle S(-\infty,t)\ \bar{O}(t)\, S(t,-\infty)\,\rangle \\ &= \langle S(-\infty,t)\ S(t,\infty)\ S(\infty,t)\ \bar{O}(t)\, S(t,-\infty)\,\rangle \\ &= \langle S(-\infty,\infty)\ \big[T_+\, S(\infty,-\infty)\ \bar{O}(t)\big]\rangle \\ &= \langle T_\mathrm{c}\, S^\dagger(\infty,-\infty)\, S(\infty,-\infty)\ \bar{O}(t)\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Die Zeitordnung entlang der Kontur C ist in Bild 2.1 dargestellt. Wie der ursprüngliche Erwartungswert beschreibt sie genau die Zeitentwicklung des Systems von $-\infty$ nach t unter der Einwirkung der äußeren Störung und die Entwicklung von t zurück nach $-\infty$. Nehmen wir einmal an, wir könnten zwischen der Störung $\bar{H}^+_\mathrm{ext}(t)$, unter der sich das System vorwärts in der Zeit entwickelt und $\bar{H}^-_\mathrm{ext}(t)$, unter der es sich zurück entwickelt, unterscheiden. Das bedeutet, wir könnten zwischen der Störung auf dem oberen und dem unteren Zweig der Kontur C unterscheiden. Diese Annahme legt die folgenden Definitionen nahe [26]:

$$S_+ = S_+(\infty,-\infty) = T_+\ \exp\big[-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\ \bar{H}^+_\mathrm{ext}(t')\big] \tag{2.7}$$

und

$$S^\dagger_- = S_-(-\infty,\infty) = T_-\ \exp\big[\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\ \bar{H}^-_\mathrm{ext}(t')\big]\,. \tag{2.8}$$

Entsprechend gibt es dann zwei Arten von Erwartungswerten, je nachdem ob das Zeitargument auf dem oberen Zweig der Kontur (t_+) oder auf dem unteren Zeig (t_-) liegt. Da jedoch jetzt $S^\dagger_- S_+ \neq 1$ gilt, müssen wir die Erwartungswerte normieren.

$$\langle\bar{O}(t_+)\rangle = \frac{\langle T_\mathrm{c}\, S^\dagger_-\ S_+\, \bar{O}(t_+)\rangle}{\langle S^\dagger_-\ S_+\rangle} = \frac{\langle S^\dagger_-\ \big[T_+\, S_+\, \bar{O}(t)\big]\rangle}{\langle S^\dagger_-\ S_+\rangle} \tag{2.9}$$

$$\langle\bar{O}(t_-)\rangle = \frac{\langle T_\mathrm{c}\, S^\dagger_-\ S_+\, \bar{O}(t_-)\rangle}{\langle S^\dagger_-\ S_+\rangle} = \frac{\langle\,\big[T_-\ S^\dagger_-\ \bar{O}(t)\big] S_+\,\rangle}{\langle S^\dagger_-\ S_+\rangle} \tag{2.10}$$

Physikalisch ist eine solche Unterscheidung völlig sinnlos, denn es gibt nur eine äußere Störung $\bar{H}_\mathrm{ext}(t)$. Daher müssen wir in allen Endergebnissen $\bar{H}^+_\mathrm{ext}(t) = \bar{H}^-_\mathrm{ext}(t)$ und entsprechend $S_+ = S_-$ setzen. Mathematisch ist das jedoch ein sehr nützlicher Trick, der es erlaubt, Bewegungsgleichungen in einer sehr kompakten Form abzuleiten.

2.2 Definition der Einteilchen–Greenschen–Funktionen

Einteilchen–Greensche–Funktionen werden als verallgemeinerte Dichtematrizen für den Fall von zwei Zeitargumenten definiert. Die Definitionen werden durch die Definitionen der Erwartungswerte (2.9) und (2.10) aus dem vorigen Abschnitt nahegelegt. Da jedoch zwei Arten von Zeitargumenten unterschieden werden, gibt es für einen zweizeitigen Erwartungswert offenbar vier mögliche Definitionen. Bei der Notation werden wir uns an diejenige in [101, 16] halten. Wenn beide Zeitargumente auf dem oberen Zweig der Zeitkontur liegen, definieren wir

$$\begin{aligned} G^{++}(12) &= -\frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle T_{\rm c}\,\hat{\psi}(1+)\,\hat{\psi}^\dagger(2+)\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle S_-^\dagger\,[T_+\,S_+\,\bar{\psi}(1)\,\bar{\psi}^\dagger(2)]\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle}\,. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Hier haben wir die Abkürzung $1 = \{\mathbf{r}_1, t_1, \sigma_1\}$ benutzt. Die Zeitordnung bedingt bei Fermioperatoren auch einen Vorzeichenwechsel aufgrund ihrer Eigenschaft der Antikommutativität, also

$$T_+\,\bar{\psi}(1)\,\bar{\psi}^\dagger(2) = \theta(t_1 - t_2)\,\bar{\psi}(1)\,\bar{\psi}^\dagger(2) - \theta(t_2 - t_1)\,\bar{\psi}^\dagger(2)\,\bar{\psi}(1)\,. \tag{2.12}$$

Im Grenzwert $\bar{H}^+_{\rm ext}(t) = \bar{H}^-_{\rm ext}(t)$ entspricht (2.11) formal gerade der üblichen Definition einer zeitgeordneten Einteilchen–Greenschen–Funktion bei Temperatur 0 K [32]. Wegen der äußeren Störung ist jedoch keine Faktorisierung wie in (2.5) möglich und so müssen auch andere Greensche Funktionen betrachtet werden.

$$\begin{aligned} G^{+-}(12) &= \frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle T_{\rm c}\,\hat{\psi}(1+)\,\hat{\psi}^\dagger(2-)\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle [T_-\,S_-^\dagger\,\bar{\psi}^\dagger(2)]\,[T_+\,S_+\,\bar{\psi}(1)]\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\begin{aligned} G^{-+}(12) &= -\frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle T_{\rm c}\,\hat{\psi}(1-)\,\hat{\psi}^\dagger(2+)\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle [T_-\,S_-^\dagger\,\bar{\psi}(1)]\,[T_+\,S_+\,\bar{\psi}^\dagger(2)]\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \end{aligned} \tag{2.14}$$

$$\begin{aligned} G^{--}(12) &= \frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle T_{\rm c}\,\hat{\psi}(1-)\,\hat{\psi}^\dagger(2-)\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \\ &= \frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle [T_-\,S_-^\dagger\,\bar{\psi}(1)\,\bar{\psi}^\dagger(2)]\,S_+\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle} \end{aligned} \tag{2.15}$$

Im Heisenberg–Bild lassen sich die vier Greenschen Funktionen (2.11) und (2.13) bis (2.15) in der kompakten Form

$$G(\bar{1}\bar{2}) = -\frac{ib_2}{\hbar} \frac{\langle T_c \, \hat{\psi}(\bar{1}) \, \hat{\psi}^\dagger(\bar{2}) \rangle}{\langle S_-^\dagger \, S_+ \rangle} \,, \tag{2.16}$$

wobei der Zweigindex $b = \pm$ in die Definition des Arguments entsprechend $\bar{1} = \{\mathbf{r}_1, t_1, \sigma_1, b_1\}$ eingeschlossen wurde.

Um einen Eindruck von der Bedeutung der Greenschen Funktionen zu bekommen, betrachten wir zunächst den einfachen Fall ohne äußere Störung, also im Gleichgewicht. Dann gilt $S_-^\dagger = S_+ = 1$. Wir betrachten dazu G^{+-} und entwickeln die Feldoperatoren durch einen vollständigen Satz von Einteilchen–Zuständen:

$$G^{+-}(12) = \sum_{jj'} \varphi_j(\mathbf{r}_1\sigma_1) \, \varphi_{j'}(\mathbf{r}_2\sigma_2) \, G^{+-}_{jj'}(t_1 t_2) \,, \tag{2.17}$$

mit

$$\begin{aligned} G^{+-}_{jj'}(t_1 t_2) &= -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{c}^\dagger_{j'}(t_2) \, \hat{c}_j(t_1) \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_n \langle \Phi_0^{(N)} | \hat{c}^\dagger_{j'}(t_2) | \Phi_n^{(N-1)} \rangle \langle \Phi_n^{(N-1)} | \hat{c}_j(t_1) | \Phi_0^{(N)} \rangle \,, \end{aligned} \tag{2.18}$$

wobei ein vollständiger Satz von $(N-1)$-Teilchen–Zuständen eingeschoben wurde, die Eigenzustände des Hamilton–Operators $\hat{H}_0$ sind. Mit Hilfe dieser Eigenschaft sowie

$$\hat{c}_j(t_1) = e^{-iH_0 t_1/\hbar} \hat{c}_j \, e^{iH_0 t_1/\hbar} \tag{2.19}$$

erhält man insgesamt

$$\begin{aligned} G^{+-}(12) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{jj'n} \varphi_j(\mathbf{r}_1\sigma_1) \, \varphi_{j'}(\mathbf{r}_2\sigma_2) \\ &\times \; e^{i(E_n^{(N-1)} - E_0^{(N)})(t_2 - t_1)/\hbar} \langle \Phi_0^{(N)} | \hat{c}^\dagger_{j'} | \Phi_n^{(N-1)} \rangle \langle \Phi_n^{(N-1)} | \hat{c}_j | \Phi_0^{(N)} \rangle \,. \end{aligned} \tag{2.20}$$

Nehmen wir die Quasiteilchennäherung an, dann ist der N-Teilchen–Grundzustand gerade derjenige, bei dem die N untersten Einteilchen–Zustände voll besetzt sind. $E_n^{(N-1)}$ hingegen bezeichnet die Energie des Zustandes, in dem alle Zustände bis N besetzt sind mit Ausnahme des n-ten. Somit ist $E_n^{(N-1)} - E_0^{(N)} = E_n$, also gerade die Einteilchen–Energie des besetzten n-ten Zustandes. In dieser Näherung erhalten wir aus (2.20) also

$$G^{+-}(12) = -\frac{i}{\hbar} \sum_j \varphi_j(\mathbf{r}_1\sigma_1) \, \varphi_j(\mathbf{r}_2\sigma_2) \, e^{iE_j(t_2 - t_1)/\hbar} \, n_j \,. \tag{2.21}$$

Entsprechend ist G^{-+} gegeben durch

$$G^{-+}(12) = \frac{i}{\hbar} \sum_j \varphi_j(\mathbf{r}_1\sigma_1)\, \varphi_j(\mathbf{r}_2\sigma_2)\, e^{iE_j(t_2-t_1)/\hbar}\, (1-n_j)\,. \tag{2.22}$$

Damit sehen wir, daß G^{+-} und G^{-+} gerade die Eigenschaften besetzter bzw. unbesetzter Zustände beschreiben. Diese Eigenschaft bleibt bestehen, wenn äußere Störungen zugelassen werden und erlauben es deshalb, die Eigenfunktions–Darstellung mit Verteilungsfunktionen und Übergangsamplituden in Verbindung zu bringen. Die Kenntnis von G^{+-} und G^{-+} sind bereits ausreichend um die beiden anderen Typen von Greenschen Funktionen zu bestimmen. Wie man aus den Definitionen entnehmen kann, sind die vier Greenschen Funktionen nämlich nicht unabhängig, sondern es gilt:

$$\begin{aligned} G^{++}(12) + G^{+-}(12) &= G^{--}(12) + G^{-+}(12) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\,\theta(t_1-t_2)\langle\hat\psi(1)\,\hat\psi^\dagger(2) + \hat\psi^\dagger(2)\,\hat\psi(1)\rangle \\ &= \theta(t_1-t_2)\big[G^{+-}(12) + G^{-+}(12)\big] \equiv G^{\mathrm{r}}(12)\,, \end{aligned} \tag{2.23}$$

wodurch die *retardierte* Greensche Funktion definiert wird. Die *avancierte* Greensche Funktion ergibt sich aus

$$\begin{aligned} G^{++}(12) - G^{-+}(12) &= G^{--}(12) - G^{+-}(12) \\ &= \frac{i}{\hbar}\,\theta(t_2-t_1)\langle\hat\psi(1)\,\hat\psi^\dagger(2) + \hat\psi^\dagger(2)\,\hat\psi(1)\rangle \\ &= -\theta(t_2-t_1)\big[G^{+-}(12) + G^{-+}(12)\big] \equiv G^{\mathrm{a}}(12)\,. \end{aligned} \tag{2.24}$$

Da in (2.23) und (2.24) Summen von G^{+-} und G^{-+} auftreten, hebt sich die Information über die Besetzung der Zustände heraus. Folglich enthalten die avancierten und retardierten Greenschen Funktionen nur noch Informationen über das Einteilchenspektrum. Im Gleichgewicht wäre diese Information auch ausreichend, um das System vollständig zu charakterisieren, denn die Besetzung der Zustände würde sich aus der Quantenstatistik ergeben. Im Nichtgleichgewicht ist diese Information jedoch nicht ausreichend; hier ist es vielmehr nötig, kinetische Gleichungen für die Greenschen Funktionen aufzustellen und zu lösen und daraus die vollständige Information über Einteilchen–Verteilungen und Übergangsamplituden zu gewinnen.

Schließlich sollen an dieser Stelle noch einige andere in der Literatur häufig benutzte Definitionen von Greenschen Funktionen definiert werden. Anstelle der beiden Funktionen G^{+-} und G^{-+} werden auch die Bezeichnungen $G^<$ und $G^>$ benutzt, wobei gilt:

$$G^<(12) = -G^{+-}(12) \tag{2.25}$$

$$G^>(12) = G^{-+}(12)\,. \tag{2.26}$$

Hier handelt es sich also lediglich um Vorzeichen- und Namenskonventionen, wie auch bei den Definitionen der *zeitgeordneten* Greenschen Funktion G^t und der *anti-zeitgeordneten* Greenschen Funktion $G^{\bar{t}}$:

$$\begin{aligned} G^t(12) &= G^{++}(12) && (2.27)\\ G^{\bar{t}}(12) &= -G^{--}(12)\,. && (2.28) \end{aligned}$$

2.3 Bewegungsgleichungen der Einteilchen–Greenschen–Funktionen

Wir betrachten die Zeitentwicklung der Greenschen Funktionen unter dem Einfluß des folgenden Hamilton–Operators, der in Ortsraumdarstellung gegeben ist:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_\sigma \int d^3r\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}t\sigma)\Big[\hat{h}(\mathbf{r}) + \phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}t)\Big]\hat{\psi}(\mathbf{r}t\sigma) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r\, d^3r'\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}t\sigma)\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'t\sigma')\, v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}'t\sigma')\, \hat{\psi}(\mathbf{r}t\sigma)\,. \qquad (2.29) \end{aligned}$$

Zum Einteilchen–Hamilton–Operator

$$\hat{h}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\,\boldsymbol{\Delta} + U(\mathbf{r}), \qquad (2.30)$$

der den Anteil des Gitters oder anderer Strukturen im Halbleiter über das Potential $U(\mathbf{r})$ enthält, wurde ein zeitabhängiges externes Potential $\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}t)$ addiert. Darunter kann man sich z. B. eine Ankopplung der Elektronen an ein äußeres Lichtfeld in Dipolnäherung vorstellen.

Zunächst wollen wir die Herleitung der Bewegungsgleichungen allgemein halten, bevor wir auf die Ableitung der für den kohärenten Fall geeigneteren Gleichungen eingehen.

Aus der allgemeinen Definition der Greenschen Funktionen (2.16) lassen sich nun mit obigem Hamilton–Operator die Heisenberg–Bewegungsgleichungen ableiten:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}\, G(\bar{1}\bar{2}) &= -\frac{i}{\hbar}\, b_2\, \frac{\langle T_{\mathrm{c}}\big[\hat{H},\hat{\psi}(\bar{1})\big]\,\hat{\psi}^\dagger(\bar{2})\rangle}{\langle S_-^\dagger\, S_+\rangle} \\ &+ \delta_{b_1,b_2}\,\delta(t_1-t_2)\,\frac{\langle T_{\mathrm{c}}\big[\hat{\psi}(\bar{1})\,\hat{\psi}^\dagger(\bar{2}) + \hat{\psi}^\dagger(\bar{2})\,\hat{\psi}(\bar{1})\big]\rangle}{\langle S_-^\dagger\, S_+\rangle}\,. \qquad (2.31) \end{aligned}$$

Der zweite Beitrag stammt von der Ableitung der Stufenfunktionen, die in G^{++} bzw. G^{--} auftreten. Entsprechend der Antikommutationseigenschaft der Feldoperatoren kann dieser Beitrag zusammengefaßt werden zu

$$\delta(\bar{1}-\bar{2}) = \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\delta(t_1-t_2)\,\delta_{\sigma_1,\sigma_2}\,\delta_{b_1,b_2}\,. \tag{2.32}$$

Wertet man den Kommutator mit dem Hamilton–Operator aus und benutzt die beiden Abkürzungen

$$v(\bar{1}-\bar{2}) = v(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\delta(t_1-t_2)\,\delta_{b_1,b_2} \tag{2.33}$$

und

$$\int d\bar{1} = \sum_{b_1,\sigma_1}\int d^3r_1\,dt_1 \tag{2.34}$$

erhält man insgesamt

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_1}\,G(\bar{1}\bar{2}) &= \delta(\bar{1}-\bar{2}) + \left[\hat{h}(\bar{1})+\phi_{\text{ext}}(\bar{1})\right]G(\bar{1}\bar{2}) \\ &- \frac{i}{\hbar}\,b_2\int d\bar{3}\,v(\bar{1}^+-\bar{3})\,\frac{\langle T_c\,\hat{\psi}^\dagger(\bar{3}^+)\,\hat{\psi}(\bar{3})\,\hat{\psi}(\bar{1})\,\hat{\psi}^\dagger(\bar{2})\rangle}{\langle S_-^\dagger\,S_+\rangle}\,. \end{aligned} \tag{2.35}$$

Die Abkürzung $\bar{1}^+$ bedeutet, daß das Zeitargument durch $t_1 + b_1\delta$ ersetzt wird und der Grenzwert $\delta \to +0$ für positive δ durchgeführt wird. Dadurch wird sichergestellt, daß die Reihenfolge der Operatoren unter Einwirkung des Zeitordnungsoperators T_c richtig bleibt.

Der Erwartungswert der Zweiteilchen–Greenschen–Funktion in (2.35) läßt sich durch eine Variationsableitung der Einteilchen–Greenschen–Funktion ausdrücken, wie in Anhang A gezeigt wird. Mit deren Hilfe läßt sich die Einteilchen–Selbstenergie einführen als

$$\Sigma(\bar{1}\bar{2}) = -i\hbar b_1\int d\bar{3}\bar{4}\,v(\bar{1}^+-\bar{3})\,G(\bar{1}\bar{4})\,\frac{\delta G^{-1}(\bar{4}\bar{2})}{\delta\phi_{\text{ext}}(\bar{3})}\,. \tag{2.36}$$

Damit nimmt die Bewegungsgleichung (2.35) schließlich die folgende Form an:

$$\left[i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{h}(\bar{1}) - \phi_{\text{eff}}(\bar{1})\right]G(\bar{1}\bar{2}) - \int d\bar{3}\,\Sigma(\bar{1}\bar{3})\;G(\bar{3}\bar{2}) = \delta(\bar{1}-\bar{2})\,. \tag{2.37}$$

Das effektive Potential ϕ_{eff} setzt sich zusammen aus dem externen Potential und dem *Hartree–Potential*, also dem induzierten Potential aufgrund der Coulomb–Wechselwirkung, wie in (A.8) beschrieben.

Man kann aus Gleichung (2.37) eine äquivalente Integralgleichung ableiten, indem man mit der Lösung des Systems ohne Selbstenergie G_0 von links multipliziert und abintegriert. Man bezeichnet dies als die *Dyson–Gleichung* des Systems.

$$G(\bar{1}\bar{2}) = G_0(\bar{1}\bar{2}) + \int d\bar{3}\bar{4}\,G_0(\bar{1}\bar{3})\;\Sigma(\bar{3}\bar{4})\;G(\bar{4}\bar{2}) \tag{2.38}$$

Die Selbstenergie beschreibt die Renormalisierung der Einteilchenzustände aufgrund der Wechselwirkung mit dem umgebenden Vielteilchensystem. Natürlich liegt die Schwierigkeit nun gerade darin, geeignete Ausdrücke für die Selbstenergie gegebener Systeme zu finden. Lediglich für eher pathologische Modelle können exakte Ausdrücke abgeleitet werden. Ansonsten ist man auf gute Näherungen angewiesen. Diese hängen davon ab, welche Beiträge zur inversen Greenschen Funktion berücksichtigt werden. Durch Inversion der Bewegungsgleichung (2.37)

$$G^{-1}(\bar{1}\bar{2}) = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{h}(\bar{1}) - \phi_{\text{eff}}(\bar{1})\right] \delta(\bar{1}-\bar{2}) - \Sigma(\bar{1}\bar{2}) \tag{2.39}$$

erhält man z. B. den Beitrag niedrigster Ordnung zu

$$\frac{\delta G^{-1}(\bar{1}\bar{2})}{\delta \phi_{\text{ext}}(\bar{3})} = -\delta(\bar{1}-\bar{2})\,\delta(\bar{1}-\bar{3})\,. \tag{2.40}$$

Daraus ergibt sich der *statische Selbstenergie–Beitrag* zu

$$\Sigma^{\text{st}}(\bar{1}\bar{2}) = i\hbar b_1\, v(\bar{1}^+ - \bar{2})\, G(\bar{1}\bar{2})\,. \tag{2.41}$$

Aus der Definition (2.36) ist es einsichtig und leicht nachzurechnen, daß die Selbstenergien dieselben linearen Beziehungen erfüllen wie die Greenschen Funktionen:

$$\Sigma^{++}(12) + \Sigma^{+-}(12) = \Sigma^{--}(12) + \Sigma^{-+}(12) = \Sigma^{\text{r}}(12) \tag{2.42}$$

und

$$\Sigma^{++}(12) - \Sigma^{-+}(12) = \Sigma^{--}(12) - \Sigma^{+-}(12) = \Sigma^{\text{a}}(12)\,. \tag{2.43}$$

Die avancierte und retardierte Selbstenergie entsprechen aber nicht einfach den Summen von Σ^{+-} und Σ^{-+} multipliziert mit Stufenfunktionen. Wegen des obigen Hartree–Fock–Beitrages (2.41), der weder avanciert noch retardiert ist, gilt vielmehr:

$$\Sigma^{\text{r}}(12) = \Sigma^{\text{st}}(12) + \theta(t_1 - t_2)\left[\Sigma^{+-}(12) + \Sigma^{-+}(12)\right] \tag{2.44}$$

und

$$\Sigma^{\text{a}}(12) = \Sigma^{\text{st}}(12) + \theta(t_2 - t_1)\left[\Sigma^{+-}(12) + \Sigma^{-+}(12)\right]. \tag{2.45}$$

Hat man eine für das Problem ausreichende Näherung für die Selbstenergie gefunden, ist mit der Lösung der Bewegungsgleichung (2.37) die Dynamik des Systems bestimmt. Um aber Näherungsschemata zu finden, die über die beschriebene statische Näherung hinausgehen, muß ein komplexes System von Gleichungen abgeleitet werden, das einen systematische Untersuchung der Einteilchen–Selbstenergie ermöglicht. Dieses System wird im folgenden Abschnitt vorgestellt.

2.4 Abgeschirmte Wechselwirkung, Polarisation und Vertex–Funktion

Da die Einteilchen–Selbstenergie (2.36) auch den Einfluß der Coulomb–Wechselwirkung auf die Einteilchen–Eigenschaften des Systems beschreibt, liegt es nahe zu versuchen, die Selbstenergie nach dieser Wechselwirkung zu entwickeln. Allerdings ist die nackte Coulomb–Wechselwirkung für eine solche Entwicklung nicht gut geeignet, da sie sehr langreichweitig ist. Daher ist es vorteilhaft, die sogenannte *abgeschirmte Wechselwirkung* w einzuführen. Dies kann einfach erreicht werden, indem man auf (2.36) die Kettenregel für Funktionalableitungen anwendet. Damit nimmt diese Gleichung die Form an:

$$\Sigma(\bar{1}\bar{2}) = -i\hbar b_1 \int d\bar{3}\bar{4}\, w(\bar{3}\bar{1}^+)\; G(\bar{1}\bar{4})\, \frac{\delta G^{-1}(\bar{4}\bar{2})}{\delta \phi_{\text{eff}}(\bar{3})}\;. \tag{2.46}$$

Damit ist die abgeschirmte Wechselwirkung definiert als

$$w(\bar{1}\bar{2}) = \int d\bar{3}\, v(\bar{2}-\bar{3})\, \frac{\delta \phi_{\text{eff}}(\bar{1})}{\delta \phi_{\text{ext}}(\bar{3})}\;. \tag{2.47}$$

Die Abschirmung wird dabei durch die dielektrische Funktion ϵ beschrieben:

$$\epsilon^{-1}(\bar{1}\bar{2}) = \frac{\delta \phi_{\text{eff}}(\bar{1})}{\delta \phi_{\text{ext}}(\bar{2})}\;. \tag{2.48}$$

Benutzt man die Definition des effektiven Potentials (A.8) und nochmals die Kettenregel, so erhält man für das abgeschirmte Coulomb–Potential:

$$w(\bar{1}\bar{2}) = v(\bar{1}-\bar{2}) + \int d\bar{3}\bar{4}\, v(\bar{1}-\bar{3})\, P(\bar{3}\bar{4})\, w(\bar{4}\bar{2})\,. \tag{2.49}$$

Hier wurde die *Polarisationsfunktion* P gemäß

$$P(\bar{1}\bar{2}) = -i\hbar b_1 \frac{\delta G(\bar{1}\bar{1}^+)}{\delta \phi_{\text{eff}}(\bar{2})} = i\hbar b_1 \int d\bar{3}\bar{4}\, G(\bar{1}\bar{3})\, \frac{\delta G^{-1}(\bar{3}\bar{4})}{\delta \phi_{\text{eff}}(\bar{2})}\; G(\bar{4}\bar{1}) \tag{2.50}$$

eingeführt. Dabei wurde wiederum von der Beziehung (A.10) Gebrauch gemacht und die *Vertex–Funktion* Γ in die Gleichung eingeführt, die bereits in die Gleichung (2.46) für die Selbstenergie einging:

$$\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) = \frac{\delta G^{-1}(\bar{1}\bar{2})}{\delta \phi_{\text{eff}}(\bar{3})}\;. \tag{2.51}$$

Ausgehend von (2.39) kann eine Bestimmungsgleichung für die Vertex–Funktion abgeleitet werden, wodurch das Funktionensystem der verschiedenen in diesem Kapitel eingeführten Größen abgeschlossen wird.

$$\begin{aligned}\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) &= -\delta(\bar{1}-\bar{2})\,\delta(\bar{1}-\bar{3}) - \frac{\delta\Sigma(\bar{1}\bar{2})}{\delta\phi_{\text{eff}}(\bar{3})} \\ &= -\delta(\bar{1}-\bar{2})\,\delta(\bar{1}-\bar{3}) - \int d\bar{4}\bar{5}\,\frac{\delta\Sigma(\bar{1}\bar{2})}{\delta G(\bar{4}\bar{5})}\,\frac{\delta G(\bar{4}\bar{5})}{\delta\phi_{\text{eff}}(\bar{3})} \\ &= -\delta(\bar{1}-\bar{2})\,\delta(\bar{1}-\bar{3}) - \int d\bar{4}\bar{5}\bar{6}\bar{7}\,\frac{\delta\Sigma(\bar{1}\bar{2})}{\delta G(\bar{4}\bar{5})}\,G(\bar{4}\bar{6})\,G(\bar{7}\bar{5})\,\Gamma(\bar{6}\bar{7}\bar{3}) \quad (2.52)\end{aligned}$$

Ausgehend von dem nun vorliegenden Funktionensystem aus Greenscher Funktion G, Selbstenergie Σ, abgeschirmter Wechselwirkung w, Polarisation P und Vertex–Funktion Γ können nun systematisch Näherungen für die Selbstenergie entwickelt werden. Dies werden wir zunächst jedoch nicht tun. Allerdings kommen wir im Kapitel 5 nochmals auf die hier abgeleiteten Formeln zurück.

Führt man die abgeschirmte Wechselwirkung in (2.46) nicht ein, sondern behält die nackte Coulomb–Wechselwirkung bei, so kann man sich bei der Beschreibung des Systems auf einzeitige Funktionen beschränken. Nach (2.34) ist die Coulomb–Wechselwirkung statisch, was bedeutet, daß in (2.36) bzw. in (A.7) keine Zeitintegrationen auftauchen. Da also über keine inneren Zeitargumente integriert wird, kann man die äußeren Zeitargumente in den Greenschen Funktionen sofort gleich wählen und behält ein geschlossenes Gleichungssystem.

Für den Fall kohärenter Systeme erweist es sich jedoch als sinnvoll, die Einteilchen–Selbstenergie nach (2.36) nicht einzuführen, sondern die Variationsableitungen der Greenschen Funktionen explizit zu behandeln. Dies wird im folgenden Kapitel geschehen.

2.5 LO–Phonon–Streuung

Es soll hier nicht im Detail auf die Theorie der Elektron–Phonon–Streuung eingegangen werden. Diese ist in verschiedenen Lehrbüchern und Übersichtsartikeln dargestellt [47, 82, 102]. Vielmehr sollen nur die wesentlichen Ergebnisse präsentiert und der grobe Gang der Ableitung skizziert werden.

Läßt man bei der Ableitung der Bewegungsgleichungen der Greenschen Funktionen Auslenkungen des Gitters zu, dann ergibt sich auch ein phononischer Beitrag zur Selbstenergie [13, 47, 97]. Man erhält ihn, indem man die abgeschirmte Wechselwirkung (2.47) durch eine effektive abgeschirmte Wechselwirkung ersetzt

$$w_{\text{eff}}(\bar{1}\bar{2}) = w(\bar{1}\bar{2}) + \int d\bar{3}\bar{4}\,w(\bar{1}\bar{3})D(\bar{3}\bar{4})\,w(\bar{4}\bar{2})\,, \quad (2.53)$$

wobei D die Korrelationsfunktion der Gitterbausteine (z. B. Ionenrümpfe) ist. Diese kann auf die Phonon–Greensche–Funktion reduziert werden. Nimmt man weiterhin an, daß nur Einphonon–Prozesse zur Elektron–Phonon–Streuung beitragen, so läßt sich zeigen, daß sich die Selbstenergien schreiben lassen als:

$$\Sigma^{+-}_{\mathrm{ph}}(\bar{1}\bar{2}) = i\hbar\, G^{+-}(12)\, D^{-+}(21) \tag{2.54}$$
$$\Sigma^{-+}_{\mathrm{ph}}(\bar{1}\bar{2}) = -i\hbar\, G^{-+}(12)\, D^{+-}(21)\ . \tag{2.55}$$

Wir werden uns auf die Streuung mit LO–Phononen konzentrieren. Die Dispersion $\omega_{\mathbf{k}}$ dieser Phononen ist meist sehr flach, so daß sie hier völlig vernachlässigt werden soll, und man stattdessen eine konstante Frequenz ω_0 verwendet. Weiterhin sollen die Phononen stets im thermischen Gleichgewicht bleiben. Die Besetzungszahl der Phononenmoden ist damit auch $\mathbf{k}$-unabhängig. Im langwelligen Limes sind die Phonon–Greenschen–Funktionen im Fourierraum dann gegeben durch:

$$D^{+-}_{\mathrm{LO}}(\mathbf{k},\omega) = 2\pi i\hbar\, M^2_{\mathbf{k}} \left[(N_0+1)\,\delta(\omega+\omega_0) + N_0\,\delta(\omega-\omega_0)\right], \tag{2.56}$$
$$D^{-+}_{\mathrm{LO}}(\mathbf{k},\omega) = -2\pi i\hbar\, M^2_{\mathbf{k}} \left[(N_0+1)\,\delta(\omega-\omega_0) + N_0\,\delta(\omega+\omega_0)\right], \tag{2.57}$$

Dabei ist $M^2_{\mathbf{k}}$ das Matrixelement der *Fröhlich–Kopplung* [82]:

$$M^2_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\,\hbar\omega_0 \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon(0)}\right)\frac{1}{|\mathbf{k}|^2} = \frac{\alpha}{|\mathbf{k}|^2}. \tag{2.58}$$

Setzt man nun (2.56) und (2.57) in die Gleichungen (2.54) und (2.55) ein, für die bezüglich der Relativkoordinaten eine Fouriertransformation ausgeführt wurde, so erhält man die folgenden Ausdrücke:

$$\begin{aligned}\Sigma^{+-}_{\mathrm{LO}}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,t) &= \hbar^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, M^2_{\mathbf{k}'} \left[(N_0+1)\, G^{+-}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R};\omega+\omega_0,t)\right.\\ &\qquad \left. + N_0\, G^{+-}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R};\omega-\omega_0,t)\right], \end{aligned}\tag{2.59}$$
$$\begin{aligned}\Sigma^{-+}_{\mathrm{LO}}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,t) &= \hbar^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, M^2_{\mathbf{k}'} \left[(N_0+1)\, G^{-+}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R};\omega-\omega_0,t)\right.\\ &\qquad \left. + N_0\, G^{-+}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R};\omega+\omega_0,t)\right]. \end{aligned}\tag{2.60}$$

Für inhomogene Systeme bleibt eine Abhängigkeit von der Schwerpunktskoordinate $\mathbf{R}$ bestehen.

In der Quasiteilchennäherung nach Gleichung (2.21) läßt sich die Struktur der Greenschen Funktion in der Frequenzebene stark vereinfachen. Solange die Elektronendichten nicht sehr hoch sind, ist die Effektivmassennäherung angemessen (vgl. S. 71). Man erhält dann:

$$i\hbar\, G^{+-}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,t) = f(\mathbf{k},\mathbf{R},t)\,\delta(\omega-\varepsilon_{\mathbf{k}}) \tag{2.61}$$
$$-i\hbar\, G^{-+}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,t) = [1-f(\mathbf{k},\mathbf{R},t)]\,\delta(\omega-\varepsilon_{\mathbf{k}}) \tag{2.62}$$

Bei den Untersuchungen zum elektronischen Transport in Kapitel 5 werden wir diese Darstellungen der Greenschen Funktionen und der Phonon–Selbstenergien noch detaillierter diskutieren und ausführlich Gebrauch von ihnen machen.

Kapitel 3

Greensche Funktionen und kohärentes Entkopplungsschema

Die im vorigen Kapitel dargestellte Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen wird im Bereich der Halbleiterphysik bei der Beschreibung von Systemen mit hohen Anregungsdichten sehr erfolgreich angewendet. Dazu muß die Elektron–Elektron–Wechselwirkung besonders sorgfältig berücksichtigt werden. Im Bereich der Ultrakurzzeit–Experimente hat sich dabei der sogenannte Echtzeit–Formalismus als geeignet erwiesen, besonders die inkohärente Dynamik des Systems angemessen zu beschreiben [45, 100, 18].

Ein anderer, der Greensfunktions–Theorie in Bezug auf Nichtgleichgewichts–Vielteilchen–Dynamik komplementärer Formalismus ist die *Dichtematrix–Methode*. Sie arbeitet vor allem sehr gut im kohärenten Regime der Vielteilchen–Dynamik. Diese Situation, wie sie speziell für die folgenden Untersuchungen wichtig ist, läßt sich kurz so beschreiben: Ein intrinsischer Halbleiter wird durch einen kurzen Laserpuls angeregt. Die Frequenz des kohärenten Lichtes ist dabei so gewählt, daß die Energie nur wenig über der Halbleiterbandkante liegt, und die Intensität reicht nur zur Anregung geringer Ladungsträgerdichten. Aus diesem Grunde wird die Dynamik der Ladungsträger im wesentlichen durch Elektron–Loch–Korrelationen bestimmt. Dabei sind insbesondere gebundene Zustände von einem Elektron und einem Loch zu nennen, sogenannte *Exzitonen*. Es hat sich aber gezeigt, daß auch höhere Korrelationen berücksichtigt werden müssen, um Ultrakurzzeit–Experimente in diesen Systemen qualitativ richtig zu beschreiben. Das sind vor allem Vier–Teilchen–Korrelationen oder gleichlautend *biexzitonische* Zustände. Ein gebundenes *Biexziton* ist ein Zustand aus zwei Elektronen und zwei Löchern und weist Analogien zum gebundenen Wasserstoffmolekül auf.

Die Dichtematrix–Methode ist bei der Erklärung einer bestimmten Klasse von Experimenten deshalb so erfolgreich, weil sie es erlaubt, die Anzahl der zu betrachtenden Vielteilchen–Korrelationen zu beschränken, indem man sich auf Prozesse bis zu einer bestimmten Ordnung im anregenden Laserfeld zurückzieht. Solange dissipative Prozesse eine untergeordnete Rolle spielen, läßt sich die Anzahl der benötigten Vielteilchen–Korrelationen nochmals drastisch einschränken, indem man die dem Vielteilchen–System durch die externe Anregung aufgeprägte Kohärenz zu Faktorisierungen der Korrelationsfunktionen ausnutzt.

Beide Vielteilchenmethoden, der Greensfunktions–Formalismus und der Dichtematrix–Formalismus, ergänzen sich bei der Beschreibung der Nichtgleichgewichts–Dynamik in Halbleitern, denn sie beziehen sich auf völlig unterschiedliche Anregungsbedingungen. Im allgemeinen sind Rechnungen mit Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen auf die zweite Bornsche Näherung bei der Elektron–Elektron–Streuung beschränkt. Abgesehen von einzelnen Arbeiten ist wenig Quantitatives über Effekte höherer Ordnung in der Coulomb–Wechselwirkung innerhalb dieses Formalismusses bekannt. Der Grund hierfür ist, daß wie im vorigen Kapitel schon auf der Einteilchen–Ebene das Selbstenergie–Funktional eingeführt wird. Grundsätzlich enthält dieses Funktional auch alle Korrelationseffekte, jedoch erfordert ihre Berücksichtigung in der Praxis stark einschränkende Annahmen für die Wechselwirkung, so daß deren quantitative Berücksichtigung nahezu unmöglich ist. Schon eine realistische Behandlung der langreichweitigen Anteile der Coulomb–Wechselwirkung, die für die Bildung von Exzitonen und deren Streuung verantwortlich ist, ist auf einer quantenkinetischen Ebene derzeit nicht möglich. Daher lassen sich Rechnungen mit Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen nur auf Streuprozesse hoch im Leitungsband und bei ausreichend hohen Dichten anwenden, wo Korrelationen zwischen den Landungsträgern vernachlässigt werden können.

Im Gegensatz dazu startet eine Rechnung im Dichtematrix–Formalismus unter Anwendung des *kohärent kontrollierten Abbruchschemas* [8, 7] mit einem geschlossenen Satz von Bewegungsgleichungen für Korrelationsfunktionen. In der Praxis muß man sich allerdings auf die dritte Ordnung im Feld, d. h. auf die sogenannte $\chi^{(3)}$-Ebene beschränken, denn die Gleichungen werden mit zunehmender Ordnung rasch sehr kompliziert und natürlich hochdimensional. Effekte höherer Ordnung, die durch Ladungsträgerpopulationen bei hohen Anregungsdichten notwendigerweise entstehen, fehlen also in diesem Schema vollständig. Insbesondere können keine Abschirmungseffekte beschrieben werden, die der Aufsummation einer bestimmten unendlichen Klasse von Diagrammen in der Theorie Greenscher Funktionen entsprechen. Deshalb werden dissipative Prozesse oder Elektron–Elektron–Streuung nicht angemessen im Rahmen des kohärent kontrollierten Abbruchschemas beschrieben. Der grundlegende Mangel dieses Schemas ist es also, daß der Übergang von kohärent getriebenen Zuständen zu inkohärent relaxierten Verteilungsfunktionen nicht beschrieben werden kann.

Im folgenden soll der Zusammenhang zwischen den beiden bis hierher verbal skizzierten Formalismen anhand von Formeln genauer diskutiert werden. Außerdem werden wir die für die kohärente Dynamik wesentlichen Bewegungsgleichungen auf der Grundlage des Dichtematrix–Formalismus ableiten.

3.1 Greensche Funktionen und Dichtematrizen

In diesem Abschnitt soll die Problematik der Einführung der Einteilchen–Selbstenergie diskutiert werden. Dabei wird erläutert, warum die Behandlung kohärenter Phänomene im Rahmen einer Dichtematrix–Theorie vorteilhaft ist, solange die Anregungsdichten nicht zu hoch sind. Schließlich werden wir die Bewegungsgleichung der Übergangsamplitude aus derjenigen der Greenschen Funktion ableiten.

Die fundamentalen Größen zur Beschreibung der optischen Eigenschaften von Halbleitern sind der Interbandanteil der Greenschen Funktion G^{+-}_{eh} im Rahmen der Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen und die Übergangsamplitude P^{eh} im Dichtematrix–Formalismus. Die beiden Größen hängen eng zusammen:

$$-i\hbar G^{+-eh*}_{\mathbf{k}}(t,t) \;=P^{eh}_{\mathbf{k}}(t) = \langle \hat{e}^{\dagger}_{\mathbf{k}}(t)\, \hat{h}^{\dagger}_{-\mathbf{k}}(t)\rangle\,, \tag{3.1}$$

wobei die Funktionen in Blochfunktionen entwickelt wurden. Aus Gründen, die noch diskutiert werden, braucht man in optischen Experimenten nur die Abhängigkeit vom Relativimpuls $\mathbf{k}$ des Elektron–Loch–Paares zu betrachten.

Auch die Elektron- bzw. Lochdichte hängen mit der Einteilchen–Greenschen–Funktion zusammen:

$$f^{ee'}_{\mathbf{k}}(t) \;=\; i\hbar G^{+-\,ee'}_{\mathbf{k}}(t,t) \;=\; \langle \hat{e}^{\dagger}_{\mathbf{k}}(t)\, \hat{e}'_{\mathbf{k}}(t)\rangle \tag{3.2}$$

$$f^{hh'}_{\mathbf{k}}(t) \;=\; i\hbar G^{-+\,hh'}_{\mathbf{k}}(t,t) \;=\; \langle \hat{h}^{\dagger}_{-\mathbf{k}}(t)\, \hat{h}'_{-\mathbf{k}}(t)\rangle\,. \tag{3.3}$$

Im Gegensatz zu (2.61) und (2.62) betrachten wir jedoch nur homogene Systeme. Ausgangspunkt unserer Betrachtung ist die Bewegungsgleichung der Greenschen Funktion (2.37), wie sie im vorigen Kapitel abgeleitet wurde bzw. in der Darstellung aus (A.7), in der die Einteilchen–Selbstenergie noch nicht eingeführt wurde.

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_1}\,G(\bar{1}\bar{2}) = \delta(\bar{1}-\bar{2}) + \left[\hat{h}(\bar{1}) + \phi_{\text{eff}}(\bar{1})\right] G(\bar{1}\bar{2}) + i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}\,G(\bar{1}\bar{2})\bigg|_{\text{scatt}}\,. \tag{3.4}$$

Der Streuterm der Greenschen Funktion ist in den beiden Fällen gegeben durch:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,G(\bar{1}\bar{2})\bigg|_{\text{scatt}} &= i\hbar b_1 \int d\bar{3}\, v(\bar{1}^{+}-\bar{3})\,\frac{\delta G(\bar{1}\bar{2})}{\delta\phi_{\text{ext}}(\bar{3})} \\ &= \int d\bar{3}\,\Sigma(\bar{1}\bar{3})\,G(\bar{3}\bar{2})\,. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Nun entwickeln wir die kinetische Gleichung (3.4) in Blochfunktionen:

$$G(\bar{1}\bar{2}) = \sum_{nn'} \psi_n(1)\,\psi^*_{n'}(2)\,G_{nn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2)\;, \tag{3.6}$$

wobei der Index n hier sowohl das Band c/v also auch den Blochvektor $\mathbf{k}$ bezeichnet. Damit erhält man für die Beiträge der Greenschen Funktion:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G_{nn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2) &= \delta_{n,n'}\,\delta(\bar{t}_1 - \bar{t}_2) + h_n(\bar{t}_1)\,G_{nn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2) + \sum_m \mathbf{d}_{nm}\,\mathbf{E}\,G_{mn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2) \\ &\quad + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G_{nn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2)\bigg|_{\text{scatt}}, \end{aligned} \tag{3.7}$$

mit

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G_{nn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2)\bigg|_{\text{scatt}} &= i\hbar b_1 \sum_{mij} v_{nmij}\,\frac{\delta G_{mn'}(\bar{t}_1\bar{t}_2)}{\delta\phi^{\text{ext}}_{ij}(\bar{t}_1)} \\ &= \sum_m \int d\bar{t}_3\,\Sigma_{nm}(\bar{t}_1\bar{t}_3)\,G_{mn'}(\bar{t}_3\bar{t}_2)\;. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Die Blochfunktionen sind die Eigenfunktionen zum Einteilchen–Hamilton–Operator:

$$h(\mathbf{r}) = \hat{h}(\mathbf{r}) + \phi_{\text{Hartree}}(\mathbf{r})\,, \tag{3.9}$$

wobei ϕ_{Hartree} den in (A.8) definierten Hartree–Anteil des effektiven Potentials ϕ_{eff} beschreibt. Die Kopplung an das optische Feld ist in Dipolnäherung $\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}$ gegeben, die sich aus der ebenfalls üblichen $\mathbf{j}\cdot\mathbf{A}$-Kopplung durch eine Eichtransformation ergibt.

Da wir die Kopplung des Lichtfeldes in Dipolnäherung betrachten, kann man den Impulsübertrag des Photons auf das Elektron–Loch–Paar, das durch $G^{eh}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ beschrieben wird, vernachlässigen. Es brauchen also lediglich solche Anteile der Greenschen Funktionen betrachtet zu werden, deren Schwerpunktsimpuls $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ verschwindet. Das sind also gerade diejenigen mit $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$. Infolgedessen werden wir $G^{eh}_{\mathbf{k}}$ nur noch mit dem Relativimpuls $\mathbf{k}$ indizieren.

An dieser Stelle wollen wir auf die am Anfang dieses Kapitels diskutierte Problematik der Einführung der Einteilchen–Selbstenergie eingehen. Wir nehmen hier schon vorweg, daß wir im Verlauf der Diskussion eine Markoff–Näherung durchführen werden, die es letztlich erlaubt, nur einzeitige Funktionen zu betrachten. Der Streuterm (3.8) ist für den Interbandanteil der Greenschen Funktion dann gegeben durch:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t} G^{+-}_{cv}(t,t)\bigg|_{\text{scatt}} &= \sum_{a=c,v} \int_{-\infty}^{t} dt' \Big[\big[\Sigma^{+-}_{ca}(t,t')\,G^{-+}_{av}(t',t) - G^{+-}_{ca}(t,t')\,\Sigma^{-+}_{av}(t',t)\big] \\ &\quad + \big[(+-) \rightleftarrows (-+)\big]\Big]\,. \end{aligned} \tag{3.10}$$

In zweiter Bornscher Näherung werden nur solche Beiträge zur Selbstenergie berücksichtigt, die quadratisch in der Coulomb–Wechselwirkung sind. Bei statisch abgeschirmter Wechselwirkung $w(\mathbf{k})$ ergibt sich die Wechselwirkung dann zu [45]:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\mathbf{k}}^{+-cv}(t't) &= -\sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'ab}\Big[2w^2(\mathbf{q})\, G_{\mathbf{k+q}}^{+-cv}(tt')\, G_{\mathbf{q+k}'}^{-+ab}(tt')\, G_{\mathbf{k}'}^{+-ba}(tt') \\ &\qquad -w(\mathbf{q})\, w(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\, G_{\mathbf{k+q}}^{+-cv}(tt')\, G_{\mathbf{q+k}'}^{-+ab}(tt')\, G_{\mathbf{k}'}^{+-bv}(tt')\Big]\,. \end{aligned} \tag{3.11}$$

Eine allgemeine Auswertung der kinetischen Gleichung mit zweizeitigen Funktionen ist nur numerisch möglich. Eine weitere analytische Auswertung erfordert einen Ansatz für die Zeitabhängigkeit der Greenschen Funktion, der sich im folgenden an den Eigenschaften freier Teilchen orientiert.

$$G_{\mathbf{k}}^{cv}(tt') = e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c}t-\varepsilon_{\mathbf{k}}^{v}t')} g_{\mathbf{k}}^{cv}(tt')\,. \tag{3.12}$$

Für $g_{\mathbf{k}}^{cv}(tt') \to g_{\mathbf{k}}^{cv}(t't')$ entspricht dies dem verallgemeinerten Kadanoff–Baym–Ansatz [75] in Quasiteilchen–Näherung, der maximale Retardierung in die Streuterme einführt. $g_{\mathbf{k}}^{cv}(tt') \to g_{\mathbf{k}}^{cv}(tt)$ führt auf die Markoff–Näherung. Diesen Ansatz werden wir bei dieser Diskussion verfolgen. Benutzt man (3.12) in (3.11), so erhält man einen expliziten Ausdruck für (3.10). Da jetzt nur noch einzeitige Funktionen auftreten, benutzen wir die kompaktere Notation nach (3.1) bis (3.3) und führen das Elektron–Loch–Bild ein:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P_{\mathbf{k}}^{eh}\Big|_{\text{scatt}} &= -\Bigg\{\sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}',a=eh} 2\,w^2(\mathbf{q})\Big\{ \\ &\quad \Big[g(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{a}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}}^{a}+\varepsilon_{\mathbf{q+k}'}^{e}-\varepsilon_{\mathbf{k}'}^{e})\,\big[P_{\mathbf{k}}^{eh}(1-f_{\mathbf{k+q}}^{a})f_{\mathbf{q+k}'}^{e}(1-f_{\mathbf{k}'}^{e})\big] \\ &\quad +\big[f \rightleftarrows (1-f)\big] - P_{\mathbf{k}}^{eh}P_{\mathbf{q+k}'}^{eh}P_{\mathbf{k}'}^{eh*}\Big] - \Big[\mathbf{k} \rightleftarrows (\mathbf{k}+\mathbf{q})\Big]\Big\} \\ &\quad - \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} w(\mathbf{q})\,w(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\Big\{ \\ &\quad \Big[g(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}}^{e}+\varepsilon_{\mathbf{q+k}'}^{e}-\varepsilon_{\mathbf{k}'}^{e})\,\big[P_{\mathbf{k}}^{eh}(1-f_{\mathbf{k+q}}^{e})f_{\mathbf{q+k}'}^{e}(1-f_{\mathbf{k}'}^{e})\big] \\ &\quad +\big[f \rightleftarrows (1-f)\big] - P_{\mathbf{k}}^{eh}P_{\mathbf{q+k}'}^{eh}P_{\mathbf{k}'}^{eh*}\Big] - \Big[\mathbf{k} \rightleftarrows (\mathbf{k}+\mathbf{q}), \mathbf{k}' \rightleftarrows (\mathbf{k}'+\mathbf{q})\Big] \\ &\quad +g(\varepsilon_{\mathbf{k+q}}^{h}-\varepsilon_{\mathbf{k}}^{h}+\varepsilon_{\mathbf{q+k}'}^{h}-\varepsilon_{\mathbf{k}'}^{h})\;\cdot \\ &\qquad \cdot\Big[\big((1-f_{\mathbf{k}}^{h})(f_{\mathbf{k+q}}^{h}P_{\mathbf{q+k}'}^{eh}-P_{\mathbf{k+q}}^{eh}f_{\mathbf{q+k}'}^{e})(1-f_{\mathbf{k}'}^{e})\big) + \big(f \rightleftarrows (1-f)\big)\Big] \\ &\quad +g(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{h}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}}^{h}-\varepsilon_{\mathbf{q+k}'}^{e}+\varepsilon_{\mathbf{k}'}^{e})\,P_{\mathbf{k}}^{eh}\big(P_{\mathbf{k+q}}^{eh*}-P_{\mathbf{q+k}'}^{eh*}\big)P_{\mathbf{k}'}^{eh}\Big\} \\ &\quad - \Big\{e \rightleftarrows h\Big\}\,. \end{aligned} \tag{3.13}$$

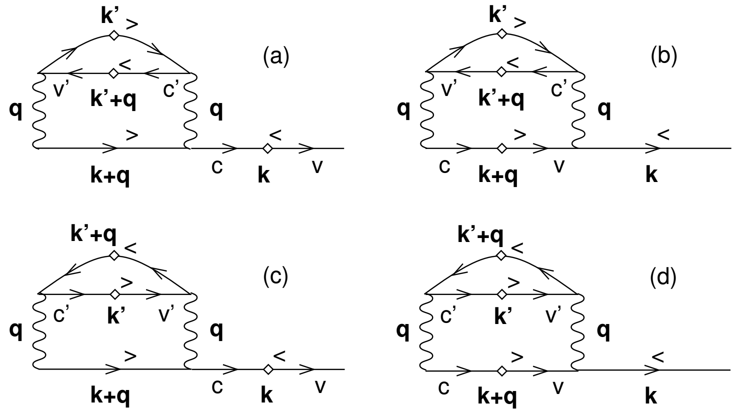


Abbildung 3.1: RPA–Beiträge zur Elektron–Elektron–Wechselwirkung

Dabei ist $g(\varepsilon)$ gegeben durch

$$g(\varepsilon) = P\frac{1}{\varepsilon} + i\delta(\varepsilon)\,.$$

Offensichtlich wird das Dephasing durch zwei Typen von Termen bestimmt. Zum einen durch Beiträge der Art $\propto Pf$, die auch dann beitragen, wenn die Einteilchenverteilungen durch Streuprozesse inkohärent geworden sind. Zum anderen die sogenannten Polarisationsstreuterme $\propto PPP^*$, die nur beitragen, solange die Anregung noch hinreichend kohärent ist. Grundsätzlich kann eine Näherung wie (3.13) nur gerechtfertigt werden, wenn die Anregung hinreichend hoch im Band erfolgt und die Coulomb–Korrelationen keine wichtige Rolle spielen. Zwar enthält P^{eh} beispielsweise im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Gleichungen exzitonische Korrelationen, für Anregungen in der Nähe der Bandkante ist jedoch eine Faktorisierung wie (3.12) mit freien Einteilchen–Energien nicht mehr gerechtfertigt. Sofern die Coulomb–Wechselwirkung zwischen den Exzitonen wesentlich wird, versagt auch die zweite Bornsche Näherung zwangsläufig. Dies läßt sich am einfachsten diagrammatisch überblicken. Abbildung 3.1 zeigt RPA–Beiträge zum Wechselwirkungs–Term (3.10), und zwar diejenigen, die zur Wechselwirkung zwischen Exzitonen beitragen und proportional zu PP sind.

Die Diagramme stellen einen $\chi^{(3)}$–Prozess in niedrigster Ordnung der Coulomb–Wechselwirkung dar. Wie Beiträge höherer Ordnung aussehen, ist offensichtlich und in Abbildung 3.2 illustriert. Eine korrekte Behandlung der Wechselwirkung zwischen den Exzitonen, die wie wir noch sehen werden, zur Entstehung von Bindungszuständen, den Biexzitonen, führen kann, verlangt die Aufsummation dieser Wechselwirkungsdiagramme bis zur unendlichen Ordnung in der Coulomb–Wechselwirkung. Diese Summation ist auch für die anderen Fragmente in Abbildung 3.1 durchzuführen und ebenso für die Fragmente der zugehörigen Austauschterme. Ins-

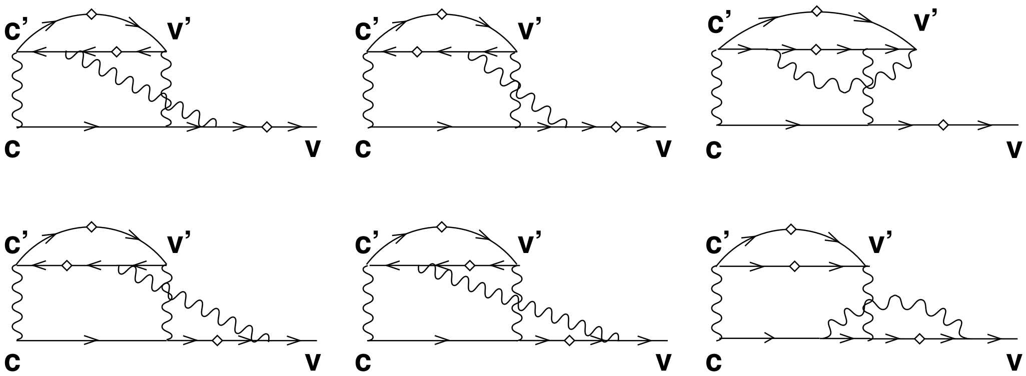


Abbildung 3.2: Diagramme der Exziton–Exziton–Wechselwirkung in dritter Ordnung der Coulombwechselwirkung zu Abbildung 3.1(a)

besondere bei den letzten beiden Diagrammen (a) und (c) in Abbildung 3.1 wird deutlich, daß die Aufsummation der Coulomb–Wechselwirkung hier zu Beiträgen führt, die durch eine Faktorisierung, wie sie die Einführung der Selbstenergie in (3.5) darstellt, schwerlich berücksichtigt werden können.

Natürlich ist diese Aufsummation, ganz ähnlich wie die T-Matrix–Approximation [54], einer Integralgleichung äquivalent, die die biexzitonische Korrelation beschreibt. Eine Ableitung dieser Integralgleichung, insbesondere im Formalismus der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen ist recht aufwendig [96] und wird in dieser Arbeit nicht durchgeführt. Es sei jedoch betont, daß die Verallgemeinerung von (3.13) um biexzitonische Korrelationen den Vorteil hat, sowohl den kohärenten als auch den inkohärenten Grenzfall korrekt zu beschreiben. Eine solche Theorie stellt in allgemeiner Ordnung in der Dichte und damit der Anregungsenergie ein sinnvolles Approximationsschema zwischen den beiden Grenzfällen dar. Allerdings liefert die Berücksichtigung der diskutierten Diagramme für die Polarisations–Streuung noch nicht den vollständigen Quellterm für die biexzitonische Korrelation, wie der Vergleich mit Dichtematrix–Resultaten in zweiter Bornscher Näherung zeigt. Wir kommen darauf in Abschnitt 3.3 zurück.

Im folgenden wollen wir uns auf den kohärenten Grenzfall konzentrieren, der im Rahmen des Dichtematrix–Formalismus wesentlich einfacher behandelt werden kann. Dazu kehren wir zu (3.7) zurück, behalten für die Streuterme in (3.8) aber die Variationsableitung bei. Ziel ist es nun, die Bewegungsgleichung für die Übergangsamplitude nach (3.1) abzuleiten.

Für den Interbandanteil der Greenschen Funktion liest sich die Bewegungsgleichung (3.7) wie folgt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G^{eh}_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2) &= h^e_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1)\, G^{eh}_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2) + \sum_c \mathbf{d}^{ec}_{\mathbf{k}}\, \mathbf{E}\, G^{ch}_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2) \\ &+ i\hbar b_1 \sum_{c\mathbf{q}\mathbf{k}'} v^{eecc}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \frac{\delta G^{eh}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2)}{\delta \phi^{\mathrm{ext}\,cc}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}(\bar{t}_1)} \,. \end{aligned} \tag{3.14}$$

In der Coulomb–Wechselwirkung wurden nur die angegebenen Diagonalelemente v^{eecc} berücksichtigt, so daß keine Interband–Coulomb–Vertizes auftreten.

Die zu (3.14) hermitesch konjugierte Gleichung lautet:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} G^{eh}_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2) &= h^h_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1)\, G^{eh}_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2) + \sum_c \mathbf{d}^{ch}_{\mathbf{k}}\, \mathbf{E}\, G^{ec}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(\bar{t}_1\bar{t}_2) \\ &+ i\hbar b_1 \sum_{c\mathbf{q}\mathbf{k}'} v^{eecc}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \frac{\delta G^{eh}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\bar{t}_1\bar{t}_2)}{\delta \phi^{\mathrm{ext}\,cc}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}'}(\bar{t}_1)} \,. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Man erkennt an den beiden Gleichungen (3.14) und (3.15) wiederum die schon im Kapitel 2.4 bemerkte Tatsache, daß man sich auf einzeitige Greensche Funktionen beschränken kann, sofern keine dynamisch abgeschirmte Coulomb–Wechselwirkung eingeführt wird. Die Dynamik des Systems wird dann nur noch durch einen Typus von Greenschen Funktionen bestimmt, z. B. von G^{+-}. Diese ist dann mittels (3.1) bis (3.3) äquivalent zu Dichtematrizen, also einzeitigen Erwartungswerten. Durch Einführung der Schwerpunktszeit

$$T = \frac{1}{2}(t_1 + t_2) \equiv t, \text{ für } t_1 = t_2 = t \tag{3.16}$$

lassen sich die beiden Bewegungsgleichungen (3.14) und (3.15) zu einer Bewegungsgleichung zusammenfassen:

$$\begin{aligned} &\Big[- i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon^e_{\mathbf{k}} - \varepsilon^h_{\mathbf{k}} \Big] P^{eh}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} P^{eh}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \\ &= \sum_{h'} \mathbf{d}^{h'e}_{\mathbf{k}} \mathbf{E} \left(\delta_{h,h'} - f^{hh'}_{\mathbf{k}} \right) - \sum_{e'} \mathbf{d}^{he'}_{\mathbf{k}}\, \mathbf{E}\, f^{e'e}_{\mathbf{k}} + \frac{\partial}{\partial t} P^{eh}_{\mathbf{k}} \bigg|_{\mathrm{int}} . \end{aligned} \tag{3.17}$$

Die Variationsableitung in (3.14) liefert wieder eine Vierteilchen–Korrelation, wie schon in (2.35) angelegt war. Diese werden durch den Wechselwirkungsanteil der Bewegungsgleichung (3.17) beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} P^{eh}_{\mathbf{k}} \bigg|_{\mathrm{int}} = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \bigg\{ \sum_{e'} \Big[\langle \hat{e}^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\, \hat{h}^\dagger_{-\mathbf{k}}\, \hat{e}'^\dagger_{\mathbf{k}'}\, \hat{e}'_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \rangle - \langle \hat{e}^\dagger_{\mathbf{k}}\, \hat{h}^\dagger_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}\, \hat{e}'^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}\, \hat{e}'_{\mathbf{k}'} \rangle \Big] \tag{3.18}$$

$$+\sum_{h'}\left[\langle \hat{e}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\,\hat{h}^{\dagger}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}\,\hat{h}'^{\dagger}_{-\mathbf{k}'}\,\hat{h}'_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}}\rangle - \langle \hat{e}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\,\hat{h}^{\dagger}_{-\mathbf{k}}\,\hat{h}'^{\dagger}_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}}\,\hat{h}'_{-\mathbf{k}'}\rangle\right]\Bigg\}\,.$$

Die Frage, vor die man sich gestellt sieht, ist, wie diese Korrelationen behandelt werden sollen. Stellt man auch für diese eine Bewegungsgleichung auf, so wird aufgrund der Coulomb–Wechselwirkung eine Sechsteilchen–Korrelation in das System gekoppelt. Auf diese Weise entsteht eine unendliche Hierarchie von gekoppelten Korrelationsfunktionen.

Diese Hierarchie muß durch ein geeignetes Schema abgebrochen werden, um ein geschlossenes Gleichungssystem für eine endliche Zahl von Korrelationen zu erhalten. Dazu haben Balslev und Hanamura [11] sowie Axt [7, 8] vorgeschlagen, die Korrelationen nach Ordnungen im externen Laserfeld $\mathbf{E}$ zu klassifizieren und dann in einer bestimmten Ordnung abzubrechen. Dieses Abbruchschema soll im folgenden Abschnitt vorgestellt werden.

3.2 Abbruch der Hierarchie

Die Bewegungsgleichung der Übergangsamplitude (3.17) enthält Vierteilchen–Korrelationen und deren Bewegungsgleichungen enthalten wiederum Sechsteilchen–Korrelationen. Dies kann man anhand der Ausgangsgleichung für die Greensche Funktion (3.14) sofort erkennen, indem man die Bewegungsgleichung für die Variationsableitung aus (3.14) ableitet. Dann tritt nämlich eine Variationsableitung zweiter Ordnung auf, die Sechsteilchen–Funktionen ins Spiel bringt.

Wir wollen die entstehende Hierarchie von Dichtematrizen abbrechen, indem wir uns auf eine bestimmte Ordnung im äußeren Laserfeld beschränken. Dies unterstellt, daß sich das System als Ensemble von Elektron–Loch–Paaren beschreiben läßt, die kohärent durch das äußere Laserfeld getrieben werden. Enthält das System also schon im Grundzustand Ladungsträger, z. B. aufgrund von Dotierungen, so startet die Dynamik nicht von einem vollen Valenzband und einem leeren Leitungsband. Die Ladungen im Halbleiter lassen sich dann nicht ausschließlich durch Elektron–Loch–Paare beschreiben. Bei den uns interessierenden Experimenten wurden aber intrinsische Halbleiter verwendet, so daß dieses Problem nicht entsteht.

Aus praktischen Gründen beschränkt man sich bei dem Abbruch der Hierarchie üblicherweise auf die dritte Ordnung im optischen Feld [100, 9, 60]. Würde man noch weiter gehen, wären Sechsteilchen–Korrelationen zu behandeln und der Rechenaufwand stiege enorm an. Außerdem stellt sich dann bald die Frage, ob eine solche Entwicklung überhaupt noch sinnvoll ist, oder ob man bereits in Bereiche der Anregungsdichte gelangt, für die das Feld kein Kleinheitsparameter mehr ist und die Entwicklung folglich nicht mehr konvergiert. Einige Beiträge höherer Ordnung wurden aber bereits berechnet [12].

Exemplarisch soll hier eine solche Vierteilchenkorrelation behandelt werden:

$$\langle \hat{e}^\dagger_{\mathbf{k+q}}\, \hat{h}^\dagger_{-\mathbf{k}}\, \hat{e}'^\dagger_{\mathbf{k}'}\, \hat{e}'_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \rangle \to \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{e}^\dagger_m\, \hat{e}_{m'} \rangle \,. \tag{3.19}$$

Der Übersichtlichkeit halber verwenden wir die abgekürzten Indizes $n = \mathbf{k}_n$. Obwohl die in (3.18) auftretenden Vierteilchenkorrelationen lediglich von drei unabhängigen Indizes abhängen, betrachten wir den allgemeineren Fall von vier unabhängigen Indizes.

Dieser Erwartungswert ist mindestens dritter Ordnung im optischen Feld. Dies erkennt man, wenn man sich klar macht, daß der Zeitentwicklungsoperator S in (2.3) mindestens in dritter Ordnung entwickelt werden muß, um drei Elektron–Operatoren zu erhalten. Damit ist aber auch klar, daß in dritter Ordnung im elektrischen Feld keine höheren Korrelationen als Sechsteilchen–Korrelationen auftreten können. Allgemein sind solche n-Teilchen–Korrelationen von niedrigster Ordnung im Laserfeld, die nur Paare von Elektron- und Locherzeugern bzw. -vernichtern enthalten. Die Hierarchie wird also durch die Beschränkung im elektrischen Feld wie erwünscht abgebrochen.

Da in unserem System die Teilchenzahl erhalten ist, und deshalb der Teilchenzahloperator $\hat{N}$ mit dem Hamilton–Operator $\hat{H}$ vertauscht, kann man die Vierteilchen–Korrelation durch Sechsteilchen–Korrelationen ausdrücken und sich dabei auf solche zurückziehen, die nur Elektron–Loch–Operatoren enthalten und damit die niedrigste Ordnung im Feld wiedergeben:

$$\langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{e}'_{m'} \rangle = \sum_{lh''} \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}''^\dagger_l\, \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle - \sum_{le''} \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{e}''^\dagger_l\, \hat{e}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle \,. \tag{3.20}$$

Wähernd der erste Ausdruck mindestens dritter Ordnung im optischen Feld ist, ist der zweite Erwartungswert mindestens fünfter Ordnung und kann folglich vernachlässigt werden.

Solange die Dynamik des Systems durch die aufgeprägte Kohärenz des Laserfeldes dominiert wird und Dephasierungsprozesse vernachlässigt werden können, können die Erwartungswerte faktorisiert werden. Diesen Grenzfall bezeichnet man als *kohärenten Grenzfall.* Die vorliegende Sechsteilchen–Korrelation kann also in Produkte aus Zwei- und Vierteilchenkorrelationen zerlegt werden, die nur Elektron–Loch–Paar–Operatoren enthalten:

$$\begin{aligned}\langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}''^\dagger_l\, \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle &= \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}''^\dagger_l \rangle \langle \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle \\ &+ \langle \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}''^\dagger_l\, \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'} \rangle + \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle \langle \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}''^\dagger_l \rangle \\ &- \langle \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}^\dagger_{n'}\, \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}''^\dagger_l \rangle - \langle \hat{e}^\dagger_n\, \hat{h}''^\dagger_l\, \hat{h}''_l\, \hat{e}'_{m'} \rangle \langle \hat{e}'^\dagger_m\, \hat{h}^\dagger_{n'} \rangle \,.\end{aligned} \tag{3.21}$$

Durch die Faktorisierung treten zwei neue Vierteilchenkorrelationen auf, die im folgenden wichtig werden. Zum einen tritt die *biexzitonische Korrelation* $B^{ehe'h'}$ auf:

$$\begin{aligned} B^{ehe'h'}_{n,m,k,l} &= \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{h}^\dagger_m \, \hat{e}'^\dagger_k \, \hat{h}'^\dagger_l \rangle \\ &- \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{h}^\dagger_m \rangle \langle \hat{e}'^\dagger_k \, \hat{h}'^\dagger_l \rangle + \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{h}'^\dagger_l \rangle \langle \hat{e}'^\dagger_k \, \hat{h}^\dagger_m \rangle \, . \end{aligned} \tag{3.22}$$

Bei der Definition der biexzitonischen Korrelation wurden die möglichen Faktorisierungen der Vierteilchen–Korrelation subtrahiert, so daß $B^{ehe'h'}$ nur noch den reinen Korrelationsanteil enthält. Weiterhin erhält man die Exziton–Paardichte $N^{ehe'h'}$ gemäß:

$$N^{ehe'h'}_{n,m,k,l} = \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{h}^\dagger_m \, \hat{h}'_l \, \hat{e}'_k \rangle - \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{h}^\dagger_m \rangle \langle \hat{h}'_l \, \hat{e}'_k \rangle \, . \tag{3.23}$$

Auch die Elektronendichte (3.2) läßt sich wie die Vierteilchen–Korrelation in (3.20) durch Summation einer Vierteilchen–Korrelation ausdrücken, wobei sich gerade die Summe über die Exziton–Paardichte ergibt:

$$\begin{aligned} f^{ee'}_n &= \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{e}'_n \rangle = \sum_{lh} \langle \hat{e}^\dagger_n \, \hat{h}^\dagger_l \, \hat{h}_l \, \hat{e}'_n \rangle + \mathcal{O}(E^4) \\ &= \sum_h P^{eh}_n \, P^{e'h*}_n + + \sum_{hl} N^{ehe'h}_{n,l,n,l} + \mathcal{O}(E^4) \, . \end{aligned} \tag{3.24}$$

Eine analoge Gleichung ergibt sich für die Lochdichte (3.3). Im Rahmen des vorgestellten Entkopplungsschemas beschreibt Gleichung (3.24) die Zerlegung der Dichte in einen kohärenten Anteil, nämlich $\sum_h P^{eh}_n \, P^{e'h*}_n$ und einen inkohärenten Anteil $\sum_{hl} N^{ehe'h}_{n,l,n,l}$.

Mit (3.1), (3.22) und (3.23) sind alle Größen definiert, die bis zur dritten Ordnung im elektrischen Feld in die Dynamik des Systems eingehen können. Der Wechselwirkungsanteil (3.18) in der Bewegungsgleichung der Übergangsamplitude (3.17) kann nun durch diese Größen ausgedrückt werden, ebenso wie die Dichten in (3.17). Die Bewegungsgleichungen für $B^{ehe'h'}$ und $N^{ehe'h'}$ müssen noch aufgestellt werden. Dies und eine Diskussion der Ergebnisse werden im folgenden Abschnitt durchgeführt.

3.3 Bewegungsgleichungen der relevanten Korrelationsfunktionen

Ersetzt man im Wechselwirkungsanteil (3.18) die Vierteilchen–Korrelationen durch die biexzitonische Korrelationsfunktion $B^{ehe'h'}$ nach (3.22) und die Exziton–Paardichte $N^{ehe'h'}$ nach (3.23), so läßt sich dieser Anteil in einen Hartree–Fock–Anteil und einen Korrelationsanteil zerlegen. Der Hartree–Fock–Anteil beschreibt diejenigen Beiträge zur Bewegungsgleichung, die man erhalten würde, wenn man die

Vierpunkt–Funktionen in (3.18) in Zweipunktfunktionen faktorisiert, jedoch auch Elektron- und Lochdichte zuläßt. Man findet diesen Anteil explizit wieder, weil wir bei der Definition der biexzitonischen Korrelation (3.22) und der Exziton–Paar–Dichte (3.23) die möglichen Faktorisierungen abgezogen haben.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} P^{eh}_{\mathbf{k}}\Big|_{\mathrm{HF}} &= \sum_{\mathbf{q},e'h} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \Big[P^{eh'}_{\mathbf{q}} f^{h'h}_{\mathbf{k}}\, \delta_{e,e'} + P^{e'h}_{\mathbf{q}} f^{e'e}_{\mathbf{k}}\, \delta_{h,h'} \\ &\qquad - P^{e'h}_{\mathbf{k}} f^{e'e}_{\mathbf{q}}\, \delta_{h,h'} - P^{eh'}_{\mathbf{k}} f^{h'h}_{\mathbf{q}}\, \delta_{e,e'} \Big] . \end{aligned} \tag{3.25}$$

Es handelt sich hier nur um den Austausch–Beitrag der Hartree–Fock–Entkopplung. In homogenen Systemen verschwindet der Hartree–Beitrag bekanntlich. Der Korrelationsanteil enthält die Beiträge der Vierteilchen–Korrelationen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} P^{eh}_{\mathbf{k}}\Big|_{\mathrm{corr}} = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q},e'h'} v_{\mathbf{q}} \Big\{ &\Big[P^{e'h'*}_{\mathbf{k}'} - P^{e'h'*}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \Big] \Big[B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + B^{ehe'h'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \Big] \\ &+ P^{e'h}_{\mathbf{k}} N^{e'h'eh'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - P^{e'h}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} N^{e'h'eh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\ &+ P^{eh'}_{\mathbf{k}} N^{e'h'e'h}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} - P^{eh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} N^{e'h'e'h}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{k}} \\ &+ \Big[P^{e'h'}_{\mathbf{k}'} - P^{e'h'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \Big] \Big[N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}} + N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} \Big] \Big\} . \end{aligned} \tag{3.26}$$

Der Beitrag der biexzitonischen Korrelation führt zu einer linearen Dephasierung der Übergangsamplitude [100], wie wir in Kapitel 4 noch sehen werden. Damit haben wird die Bewegungsgleichung der Übergangsamplitude P^{eh} vollständig in den relevanten Korrelationsfunktionen ausgedrückt. Gleichzeitig erhält man aber auch das Hartree–Fock–Entkopplungsschema explizit, so daß wir die Korrelationseffekte aufgrund von (3.26) diskutieren können.

Die Bewegungsgleichung der biexzitonischen Korrelation erhält man, wie üblich, durch Vertauschung mit dem Hamilton–Operator. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} &\Big[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon^{e}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon^{h}_{\mathbf{k}} - \varepsilon^{e'}_{\mathbf{k}'} - \varepsilon^{h'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - i\hbar\gamma_B \Big] B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \\ &- \sum_{\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \Big[B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}',\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \\ &\qquad - B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \\ &\qquad - B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}',\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \\ &= -v_{\mathbf{q}} \Big[P^{eh}_{\mathbf{k}} - P^{eh}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \Big] \Big[P^{e'h'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - P^{e'h'}_{\mathbf{k}'} \Big] + v_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \Big[P^{e'h}_{\mathbf{k}} - P^{e'h}_{\mathbf{k}'} \Big] \Big[P^{eh'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - P^{eh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \Big] \end{aligned} \tag{3.27}$$

Wie man leicht nachrechnet, ergeben die führenden Terme bezüglich der Coulomb–Wechselwirkung in Markoff–Näherung gerade die $\chi^{(3)}$–Streubeiträge in (3.13), und zwar in der Näherung, in der f durch den rein kohärenten Anteil PP^* approximiert wird. Genau dieser Beitrag fehlt, wie schon erwähnt in der diagrammatischen Analyse in Abbildung 3.1. Er kann jedoch problemlos hinzugefügt werden, indem man f in den kohärenten und inkohärenten Anteil zerlegt und für den PP^*-Beitrag die Coulomb–Wechselwirkung in höherer Ordnung einführt.

Die Bewegungsgleichung für die Exziton–Paar–Dichte ergibt sich schließlich zu:

$$\begin{aligned}\Big[& - i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon^e_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon^h_{\mathbf{k}_2} + \varepsilon^{e'}_{\mathbf{k}_3} + \varepsilon^{h'}_{\mathbf{k}_4}\Big] N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} \\ & - \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \Big[N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\mathbf{k}_2+\mathbf{q},\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} - N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{q},\mathbf{k}_4+\mathbf{q}}\Big] \\ & = \frac{\partial}{\partial t} N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4}\Big|_{\text{source}} + \frac{\partial}{\partial t} N^{ehe'h'}_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4}\Big|_{\text{scatt}} . \end{aligned} \tag{3.28}$$

Die Quellterme von (3.28) sollen hier lediglich diskutiert werden. Der eigentliche Quellterm ist in seiner einfachsten Form proportional zu $\gamma_P \, P^{eh*}_{\mathbf{k}_1} P^{e'h'}_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\, \delta_{\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4}$, d. h. zum Zerfall der kohärenten Polarisation. Der Beitrag der Streuung hat den Effekt, die Paar–Dichte zu ihrem Quasigleichgewichtswert zu relaxieren. Prinzipiell kann eine Theorie, die nur bis zur dritten Ordnung im optischen Feld geht, solche Beiträge nicht berücksichtigen. Um eine konsistente Theorie jenseits der $\chi^{(3)}$-Ebene und des kohärenten Limes zu formulieren, sind die Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen vorteilhafter. Wenn man dort das Coulomb–Potential störungstheoretisch behandelt, können inkohärente Dephasierungsprozesse in der Markoff–Näherung so geschrieben werden, daß sich bekannte Ergebnisse der Nichtgleichgewichts–Greensfunktions–Theorie ergeben [99, 58].

Da wir uns auf den kohärenten Fall beschränken, kann die Exziton–Paar–Dichte vernachlässigt werden, denn sie wird nur von inkohärenten Termen getrieben. Entsprechend sind in (3.25) und (3.17) die Teilchendichten durch ihren kohärenten Anteil zu ersetzen. Das zu betrachtende Gleichungssystem besteht also aus der Übergangsamplitude, an die die biexzitonische Korrelation koppelt. Der Vollständigkeit halber geben wir die schließlich zu lösende kinetische Gleichung für die Übergangsamplitude geschlossen an:

$$\begin{aligned}\Big[& - i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon^e_{\mathbf{k}} - \varepsilon^h_{\mathbf{k}} - i\hbar\gamma_P\Big] P^{eh}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} P^{eh}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \\ = \; & \mathbf{d}^{he}_{\mathbf{k}}\,\mathbf{E} - \sum_{h'e'} \Big[\mathbf{d}^{h'e}_{\mathbf{k}}\,\mathbf{E}\, P^{e'h'*}_{\mathbf{k}} P^{e'h}_{\mathbf{k}} + \mathbf{d}^{he'}_{\mathbf{k}}\,\mathbf{E}\, P^{e'h'*}_{\mathbf{k}} P^{eh'}_{\mathbf{k}}\Big] \\ + \; & \sum_{\mathbf{q},e'h'} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \Big[P^{e'h'*}_{\mathbf{k}} - P^{e'h'*}_{\mathbf{q}}\Big] \Big[P^{e'h}_{\mathbf{k}} P^{eh'}_{\mathbf{q}} + P^{e'h}_{\mathbf{q}} P^{eh'}_{\mathbf{k}}\Big] \\ + \; & \sum_{\mathbf{kq},e'h'} v_{\mathbf{q}} \Big[P^{e'h'*}_{\mathbf{k}'} - P^{e'h'*}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}\Big] \Big[B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + B^{ehe'h'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}'}\Big] . \end{aligned} \tag{3.29}$$

In den beiden Bewegungsgleichungen (3.29) und (3.27) wurde eine phänomenologische Dämpfungskonstante eingeführt. Neben der Coulomb–Wechselwirkung, die wir bisher ausschließlich betrachtet haben, muß nämlich auch die Wechselwirkung mit Phononen oder Störstellen berücksichtigt werden. Diese zerstören die Kohärenz des Systems, die durch die Anregung mit Laserpulsen aufgeprägt wurde. Die Dämpfungskonstanten berücksichtigen diese Effekte durch ein lineares Dephasing. Es ist für die berechnete Dynamik wichtig, daß diese Dämpfungskonstanten erst eingeführt werden, nachdem die Bewegungsgleichungen für die Polarisation und die biexzitonische Korrelation abgeleitet wurden. Würde man bei der Ableitung der kinetischen Gleichung der biexzitonischen Korrelation eine Dämpfungskonstante für die ursprüngliche Vierteilchen–Korrelation einführen, käme man zu anderen kinetischen Gleichungen [7, 9]. Die Gleichungen sind nur dann exakt, wenn die Dämpfungen verschwinden.

Mit den kinetischen Gleichungen (3.29) und (3.27) steht nun das theoretische Gerüst, mit dessen Hilfe sich die kohärente Dynamik eines optisch angeregten Vielteilchensystems in einem Halbleiter beschreiben läßt. Im folgenden Kapitel wenden wir uns einer konkreten Anwendung dieser Theorie zu.

Kapitel 4

Biexzitonen

In Analogie zum Wasserstoffmolekül, das aus der Bindung zweier Wasserstoffatome hervorgeht, können zwei Exzitonen mit entgegengesetztem Spin einen gebundenen Zustand bilden, der als *Biexziton* bezeichnet wird. Biexzitonen werden nur in nichtlinearen optischen Experimenten beobachtet [86, 83, 50]. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten, wie ein solcher Zustand gebildet werden kann: den *kohärenten* und den *inkohärenten* Fall. Im Verlaufe einer optischen Anregung können Biexzitonen kohärent erzeugt werden. Dies ist der Fall, für den wir uns im folgenden interessieren werden. Er wird unterschieden von der Erzeugung inkohärenter Biexzitonen, die das Ergebnis einer Relaxation heißer Ladungsträger sind.

Letztere können generiert werden, indem man Elektron–Loch–Paare weit oberhalb der Absorptionsschwelle, also mit hoher Überschußenergie erzeugt. Diese relaxieren dann und geben dabei ihre Überschußenergie an das Gitter ab. Diese Relaxationsprozesse können sehr schnell sein, insbesondere schnell im Vergleich zur strahlenden Rekombination der Paare, so daß die Bildung von Exzitonen und Biexzitonen möglich wird. Da der Bindungszustand des Biexzitons energetisch unterhalb der Summe zweier gebundener Exziton–Zustände liegt, ist ein verdünntes Gas von Biexzitonen bei mittleren Anregungsdichten der stabilste quasithermische Endzustand.

Für die Erzeugung kohärenter Biexzitonen gibt es zwei Möglichkeiten: *resonante* und *nichtresonante* Anregung. Wenn durch resonante Anregung 1s-Exzitonen erzeugt werden, wird die Generierung von Biexzitonen durch Photonen mit entgegengesetztem Spin möglich. Dieser Prozeß führt zu induzierter Absorption bei einer Photonenenergie, die der Energie des 1s-Exzitons minus der Biexziton–Bindungsenergie entspricht. Andererseits können Biexzitonen unter nichtresonanter Anregung mittels eines virtuellen Zwischenzustandes erzeugt werden [43, 38, 93]. Wird dieser Zweiphotonenprozeß durch Photonen von gleicher Energie getrieben, dann erscheint die Resonanz bei der Exziton–Energie minus der halben Biexziton–Bindungsenergie.

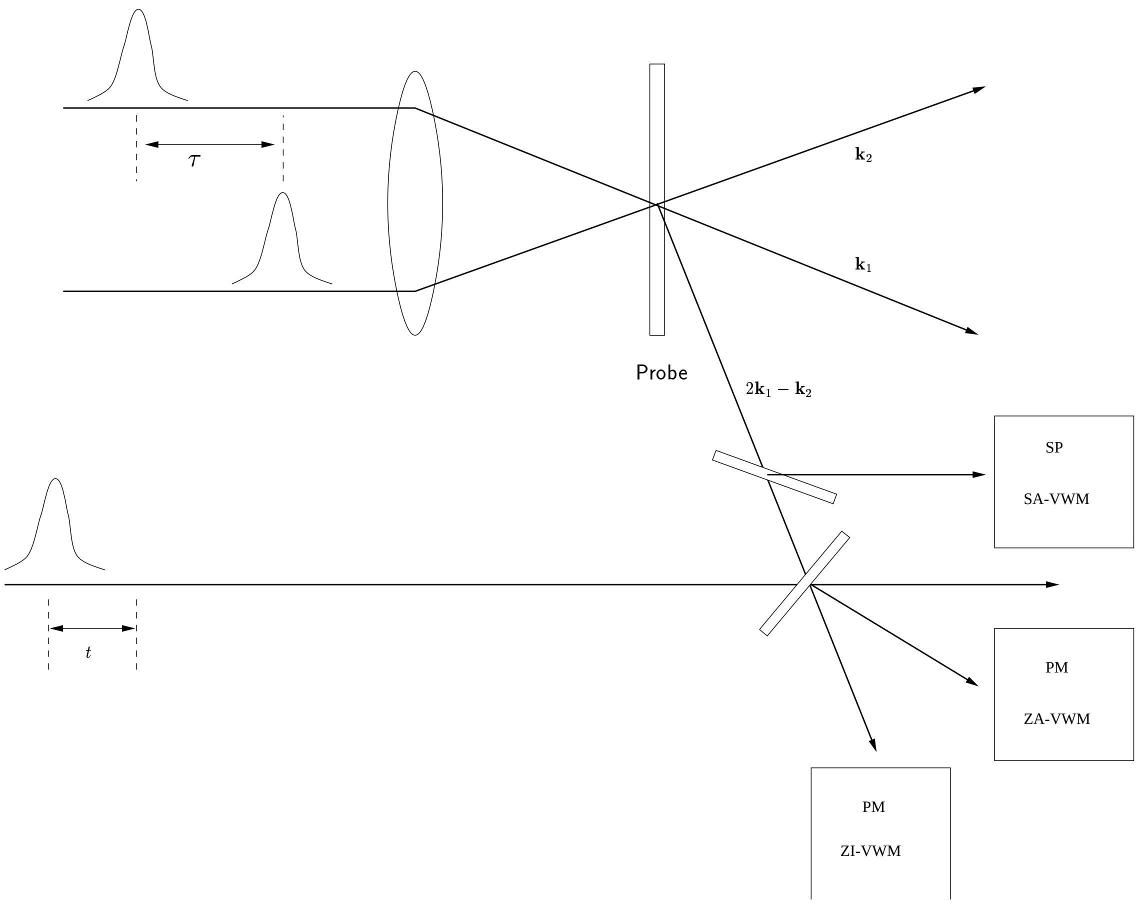


Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau des Vierwellenmisch–Experimentes

4.1 Das Vierwellen–Mischen

Unter den verschiedenen experimentellen Möglichkeiten, den Einfluß elektronischer Wechselwirkungen auf die optischen Eigenschaften von Halbleitern zu untersuchen, hat sich das Vierwellen–Mischen als besonders sensitiv herausgestellt. In der überwiegenden Anzahl der Experimente wird das *entartete Vierwellen–Mischen* benutzt. Eine Skizze des Versuchsaufbaus ist in Abbildung 4.1 gegeben.

Bei diesem Experiment werden zwei Laserpulse in verschiedenen Richtungen auf die Probe geschickt. Der stärkere der beiden Pulse in der $\mathbf{k}_1$-Richtung wird als Pumppuls bezeichnet, der zweite Puls in der $\mathbf{k}_2$-Richtung als Testpuls. Beide Pulse können aber auch gleich stark gewählt werden. Man analysiert nun das in eine abgebeugte Richtung gestreute Licht, üblicherweise die $2\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ Richtung. Von zentraler Bedeutung ist nun die integrierte Intensität des Lichtes in dieser Richtung als Funktion der Verzögerung τ zwischen den beiden Pulsen, die mittels eines Photomultipliers (PM) gemessen wird. Aber auch zeitaufgelöste Messungen zu einer bestimmten Verzögerung oder frequenzaufgelöste Spektren geben wichtige Informationen.

Die zeitaufgelösten Messungen werden mit Hilfe eines zweiten Testpulses nach dem Aufkonversions–Verfahren durchgeführt. Der zweite Testpuls trifft in einem nichtlinearen Kristall auf das Streulicht. Aufgrund der Nichtlinearität des Kristalls wird Licht mit der Summenfrequenz der beiden eintreffenden Pulse abgestrahlt. Die Intensität ist dabei proportional zum Produkt der Intensitäten der beiden Pulse im Bereich ihres zeitlichen Überlapps, da es sich um einen Zweiphotonenprozeß handelt. Ist der zweite Testpuls also zeitlich genügend schmal im Vergleich zu den Schwebungsfrequenzen im abgebeugten Signal, so wird effektiv das zeitaufgelöste Signal gemessen, wenn man die Verzögerung t des Pulses variiert.

Aus theoretischer Sicht lassen sich die drei erwähnten Spektren des Vierwellenmisch–Experimentes aus der makroskopischen Polarisation $\mathbf{P}$ bestimmen:

$$\mathbf{P} = \sum_{eh\mathbf{k}} \mathbf{d}^{eh}_{\mathbf{k}} P^{eh}_{\mathbf{k}} + \text{c. c.}. \tag{4.1}$$

Die makroskopische Polarisation geht also direkt aus der Übergangsamplitude $P^{eh}_{\mathbf{k}}$ hervor. Wir werden annehmen, daß die Proben optisch dünn sind, so daß Propagationseffekte des Lichtes durch den Halbleiter nicht in Betracht gezogen zu werden brauchen. Dann ist das abgestrahlte Lichtfeld in einer nichtlinearen Richtung proportional zur Polarisation $\mathbf{P}(t)$. Daher können die meßbaren Spektren jetzt mit der theoretisch zugänglichen Übergangsamplitude verknüpft werden.

Das zeitintegrierte Spektrum S_{TI} berechnet sich entsprechend:

$$S_{\text{TI}}(\tau) = \int dt\ |\mathbf{P}(t,\tau)|^2 = \int dt \left| \sum_{eh\mathbf{k}} \mathbf{d}^{eh}_{\mathbf{k}} P^{eh}_{\mathbf{k}}(t) \right|^2 . \tag{4.2}$$

Das zeitaufgelöste Spektrum S_{TR} wird nach der folgenden Formel berechnet:

$$S_{\text{TR}}(t) = |\mathbf{P}(t,\tau)|^2 = \left| \sum_{eh\mathbf{k}} \mathbf{d}^{eh}_{\mathbf{k}} P^{eh}_{\mathbf{k}}(t) \right|^2 . \tag{4.3}$$

Für das frequenzaufgelöste Spektrum S_{SR} schließlich wird die Fouriertransformierte der Polarisation benötigt:

$$S_{\text{SR}}(\omega,\tau) = \left| \int dt\, e^{i\omega t} \mathbf{P}(t,\tau) \right|^2 = \left| \int dt\, e^{i\omega t} \sum_{eh\mathbf{k}} \mathbf{d}^{eh}_{\mathbf{k}} P^{eh}_{\mathbf{k}}(t) \right|^2 . \tag{4.4}$$

Um den Namen des Experimentes zu erklären, sei noch erläutert, daß das Experiment im allgemeinen mit drei verschiedenen Laserpulsen auf der Probe durchgeführt wird, d. h. dem Pumppuls ist noch ein Vorpuls zeitlich vorangestellt. Betrachtet man nun die Lichtintensität in einer abgebeugten Richtung wie $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2$, so sind inklusive dieser abgebeugten Richtung vier Lichtpulse beteiligt; daher rührt der Name *Vier*wellen–Mischen. Fällt, wie in unserem Fall, der Vorpuls mit dem Pumppuls zusammen, spricht man von *entartetem* Vierwellenmischen.

Der wichtigste Vorteil dieses Experimentes liegt darin, daß in der betrachteten Richtung kein lineares Signal existiert. Wechselwirkungen der Elektronen, die erst in höheren Ordnungen des elektrischen Feldes auftreten, können deshalb hier untergrundfrei untersucht werden. In der üblicherweise benutzten Geometrie, bei der die $2\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$-Richtung untersucht wird, ist das Signal also mindestens dritter Ordnung im Laserfeld.

Natürlich ist es auch denkbar, noch höhere Ordnungen des Signals zu untersuchen. In dem uns hauptsächlich interessierenden Niederdichte–Fall, also bei noch moderaten Feldstärken der Pump– und Testpulse fallen die Intensitäten mit zunehmender Ordnung jedoch rasch ab und sind schon bald nicht mehr meßbar. Bei hohen Intensitäten sind allerdings auch diese Richtungen interessant; zum Verständnis muß dann eine Theorie herangezogen werden, die das elektrische Feld nicht als Kleinheitsparameter verwendet, sondern über eine solche Störungstheorie hinausgeht.

4.2 Bewegungsgleichungen

Ausgangspunkt für die Erstellung von Bewegungsgleichungen ist zunächst natürlich die genaue Beschreibung des Systems und damit die Festlegung der relevanten Eigenfunktionen. Wir wollen uns mit einem System wechselwirkender Elektronen und Löcher in einem starken Magnetfeld beschäftigen, das über das Dipolmatrixelement $\mathbf{d}_k^{eh}$ an ein externes Laserfeld koppelt. Aufgrund des Magnetfeldes erhält man neue Einteilchen–Zustände. Da für die betrachteten nichtlinearen Experimente die Feinstruktur der Einteilchen–Energien im Magnetfeld, die üblicherweise im Rahmen der Kohn–Luttinger–Theorie [63, 80, 79] beschrieben wird, nicht ausschlaggebend ist, beschränken wir uns im folgenden auf die einfachste Beschreibung der Einteilchen–Zustände und approximieren sie durch *Landau–Zustände.* Ein kurzer Überblick über Eigenschaften eines Bloch–Elektrons in einem statischen Magnetfeld in Landau–Eichung findet sich in Anhang B.

In den hier interessierenden Experimenten werden starke Magnetfelder angewandt. In diesem Fall befinden sich alle Elektronen im untersten Landau–Niveau von leichtem bzw. schwerem Loch. Darüberhinaus ist die Annahme gerechtfertigt, daß die Kopplung an höhere Landau–Niveaus vernachlässigbar ist.

Die Einteilchen–Energien des untersten Landau–Niveaus sind entsprechend (B.7) aus Anhang B gegeben durch

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e,h} = \varepsilon_0^{e,h} + \frac{\hbar^2}{2m_{e,h}l^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{e,h}}\,, \tag{4.5}$$

die Wellenfunktionen nach (B.8) durch

$$\langle \mathbf{r}|0k_yk_z\rangle = \left(\sqrt{\pi}l\right)^{-1/2} \exp\Big(-\frac{1}{2}\big(\frac{x}{l}-lk_y\big)^2\Big)e^{i(k_yy+k_zz)}\,, \tag{4.6}$$

wobei

$$l = \sqrt{\hbar/eB} \tag{4.7}$$

die magnetische Länge bedeutet.

In dieser Basis haben die Bewegungsgleichungen (3.29) und (3.27) die gleiche Struktur, wie in Kapitel 3 eingeführt. Lediglich die Interpretation der $\mathbf{k}$-Vektoren und die Form des Coulomb–Potentials ist eine andere. Führt man die entsprechende Rechnung direkt in der Landau–Basis durch, so erhält man anstelle von (3.29) und (3.27) die folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned}
&\Big[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h - i\hbar\gamma_P\Big]P_{\mathbf{k}}^{eh} + \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}^0 P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{eh} \\
&= \mathbf{d}^{h'e}\,\mathbf{E} - \sum_{e'h'}\Big[\mathbf{d}^{he'}\,\mathbf{E}\,P_{\mathbf{k}}^{eh'}\,P_{\mathbf{k}}^{e'h'*} + \mathbf{d}^{h'e}\,\mathbf{E}\,P_{\mathbf{k}}^{e'h}\,P_{\mathbf{k}}^{e'h'*}\Big] \\
&\quad + \sum_{e'h'}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0\Big[P_{\mathbf{k}}^{e'h'*}P_{\mathbf{k}}^{e'h}P_{\mathbf{q}}^{eh'} + P_{\mathbf{k}}^{e'h'*}P_{\mathbf{q}}^{e'h}P_{\mathbf{k}}^{eh'} \\
&\qquad\qquad - P_{\mathbf{q}}^{e'h'*}P_{\mathbf{k}}^{e'h}P_{\mathbf{q}}^{eh'} - P_{\mathbf{q}}^{e'h'*}P_{\mathbf{q}}^{e'h}P_{\mathbf{k}}^{eh'}\Big] \\
&\quad + \sum_{e'h'}\sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}^{k_y-k_y'}\Big[P_{\mathbf{k}'}^{e'h'*} - P_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{e'h'*}\Big]\Big[B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{ehe'h'} + B_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}'}^{ehe'h'}\Big]\quad .
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Hierbei wurde auch die Abhängigkeit des Übergangsmatrixelementes $\mathbf{d}_{\mathbf{k}}^{eh}$ von der Wellenzahl vernachlässigt, denn auch sie kann in guter Näherung als schwach angenommen werden [102]. Das bedeutet im Ortsraum, daß der Übergang lokal erfolgt, d. h. im Bereich benachbarter Atome.

Die entsprechende Gleichung für die biexzitonische Korrelation lautet:

$$\begin{aligned}
&\Big[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h - \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{e'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{h'} - i\hbar\gamma_B\Big]B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{ehe'h'} \\
&-\sum_{\mathbf{q}'}\Big\{v_{\mathbf{q}'}^{k_y-k_y'+q_y-q_y'}B_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ehe'h'} + v_{\mathbf{q}'}^{k_y-k_y'-q_y+q_y'}B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^{ehe'h'}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\quad -v_{\mathbf{q}'}^{k_y-k'_y}\left[B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}',\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} + B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right] \\
&\quad -v_{\mathbf{q}'}^{q_y}\left[B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} + B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}\right]\Bigg\} \\
= &-v_{\mathbf{q}}^{k_y-k'_y}\left[P^{eh}_{\mathbf{k}} - P^{eh}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right]\left[P^{e'h'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - P^{e'h'}_{\mathbf{k}'}\right] \\
&+v_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{q_y}\left[P^{e'h}_{\mathbf{k}} - P^{e'h}_{\mathbf{k}'}\right]\left[P^{eh'}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - P^{eh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right] \quad .
\end{aligned} \tag{4.9}
$$

Die Coulomb–Wechselwirkung ist dabei gegeben durch:

$$
v_{\mathbf{q}}^{k_y} = \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 L^2}\int_{-\infty}^{\infty} dq_x \frac{e^{-l^2(q_x^2+q_y^2)/2}}{q_x^2+\mathbf{q}^2} e^{il^2 q_x k_y} \, . \tag{4.10}
$$

Die Vektorindizes $\mathbf{k}$ bzw. $\mathbf{q}$ sind als zweidimensionale Vektoren mit einer y- und z-Komponente zu lesen. Die Bandindizes e und h bezeichnen neben dem Band auch den Spin.

Die linke Seite dieser Gleichung ist gerade die $\mathbf{k}$-Raum–Darstellung der Schrödingergleichung für zwei Elektronen und zwei Löcher, die über das Coulomb–Potential miteinander wechselwirken. Sieht man von der etwas veränderten Coulomb–Wechselwirkung und von den Effektivmassen ab, dann ist dies gerade das Problem des Wasserstoffmoleküls. Es gibt in der Literatur viele Untersuchungen insbesondere über den Grundzustand, also ein gebundenes Biexziton. Die Ortsraumdarstellung dieses Hamilton–Operators wurde verwendet, um Bindungsenergien in verschiedenen Halbleitern und Quantentrögen zu bestimmen. Dabei wurden vor allem Variationsmethoden benutzt. Dort benutzt man Testwellenfunktionen, deren Parameter dann so bestimmt werden, daß die sich ergebende Grundzustandsenergie minimal wird.

Die bekannteste Form einer solchen Testfunktion ist wohl die von Heitler und London [49] vorgeschlagene Form für das Wasserstoffmolekül. Falls die Lochmassen m_h sehr viel größer als die Elektronmassen m_e sind, wird hier ein antisymmetrisiertes Produkt von Exziton–Wellenfunktionen als Testfunktion benutzt. Der Spinanteil der Gesamtwellenfunktion kann dabei entweder als symmetrisch (*Triplett*) oder antisymmetrisch (*Singulett*) angesetzt werden. Der Ortsraumanteil der Wellenfunktion muß dann gerade die andere Symmetrie haben, damit das Pauli–Prinzip für Fermionen gewährleistet ist. Der Variationsparameter ist hierbei der Abstand der Löcher. Für den Singulett–Zustand findet man auf diese Weise ein ausgeprägtes Minimum, also einen gebundenen Zustand.

Wir sind hier nicht nur an diesem Grundzustand interessiert, denn auch das Kontinuum des Biexzitons hat einen starken Einfluß auf die nichtlinearen optischen Eigenschaften eines Halbleiters. Jedoch wollen wir uns bei der Entwicklung der Gleichungen (4.8) und (4.9) an dieser Näherung orientieren.

4.3 Eigenfunktions–Entwicklung

Bei den Bewegungsgleichungen für die Übergangsamplitude (4.8) und insbesondere die biexzitonische Korrelation (4.9) handelt es sich immer noch um hochdimensionale gekoppelte Differentialgleichungen. Deshalb ist es nötig, einen geeigneten Satz von Funktionen zu finden, in den die beiden Gleichungen entwickelt werden können. Die Entwicklung soll es ermöglichen, nicht nur den biexzitonischen Grundzustand, sondern auch das Kontinuum der biexzitonischen Korrelation zu beschreiben. Daher ist eine Entwicklung nach einer Variationswellenfunktion für den Grundzustand und eventuell noch einige angeregte Zustände nicht möglich.

Die Homogenitäten der Gleichungen legen es nahe, nach Exziton–Eigenfunktionen zu entwickeln, die einen endlichen Schwerpunktsimpuls besitzen. Auf diese Weise läßt sich das Streukontinuum der biexzitonischen Korrelation erfassen. Die Entwicklung soll gewährleisten, daß die grundlegenden Symmetrieeigenschaften der Größen auf jeder Stufe der Entwicklung erhalten bleiben, insbesondere die Antisymmetrie der biexzitonischen Korrelation, weil es sich um Fermionen handelt.

Diese Eigenschaft ist natürlich auch gewährleistet, wenn man nach einem vollständigen Funktionensystem entwickelt. Die Entwicklung soll aber ermöglichen, daß nur wenige Entwicklungskoeffizienten berücksichtigt werden müssen. Wählt man also irgendein Funktionensystem, dann ist die Antisymmetrie nur noch näherungsweise richtig. Damit verspricht eine antisymmetrische Entwicklung auch schneller zu konvergieren.

Wie im Detail noch diskutiert wird, bleibt die Gleichung (4.9) für die biexzitonische Korrelation geschlossen, wenn einige Integrationen vorab durchgeführt werden. Entsprechende Integrationen sind in der Gleichung (4.8) möglich.

4.3.1 Antisymmetrisierung der Entwicklung

Aus der Definition der biexzitonischen Korrelation ist unmittelbar klar, daß für den Austausch zweier Elektronen

$$B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = -B^{e'heh'}_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \tag{4.11}$$

gilt und entsprechend für den Austausch zweier Löcher:

$$B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = -B^{eh'e'h}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{k}} \,. \tag{4.12}$$

Stellen wir B als Summe von vier Hilfsgrößen $\tilde{B}$ dar, so gelten die obigen Beziehungen.

$$\begin{aligned} B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = \; & \tilde{B}^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \tilde{B}^{e'heh'}_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \\ - \; & \tilde{B}^{eh'e'h}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{k}} + \tilde{B}^{e'h'eh}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}} \end{aligned} \tag{4.13}$$

Jede dieser Hilfsgrößen kann nun nach Produkten von exzitonischen Eigenfunktionen entwickelt werden:

$$\begin{aligned}\tilde{B}^{ehe'h'}_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} &= \sum_{nm} \tilde{\varphi}^h_n(\hat{\alpha}\mathbf{k}_1+\hat{\beta}\mathbf{k}_2, k_{1y}-k_{2y})\,\tilde{\varphi}^{h'}_m(\hat{\alpha}\mathbf{k}_3+\hat{\beta}\mathbf{k}_4, k_{3y}-k_{3y}) \\ &\qquad \times \tilde{b}^{ehe'h'}_{nm}(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\,. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Die scheinbare Unsymmetrie im Argument des Entwicklungskoeffizienten bei dieser Definition ist für unser Problem unerheblich, da wegen des verschwindenden Gesamtimpulses der relevanten Korrelationen immer $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3$ gilt.

An dieser Stelle setzen wir die Exziton–Eigenfunktionen möglichst allgemein an. Insbesondere lassen wir auch eine Abhängigkeit von der y-Komponente des Relativimpulses zu. Diese käme durch eine Abhängigkeit der kinetischen Energie von k_y zustande. Es wird sich noch zeigen, daß diese Verallgemeinerung zu Beginn notwendig ist, um bestimmte Integrationen in der Bewegungsgleichung der biexzitonischen Korrelation durchführen zu können. Beim Schwerpunktsimpuls braucht keine Abhängigkeit der Wellenfunktionen von der z-Komponente angenommnen zu werden. Diese käme durch eine solche Abhängigkeit des Coulomb–Potentials ins Spiel, was aber nicht der Fall ist. Der Relativmassen-Tensor $\hat{\alpha}$ soll diagonal sein mit den Elementen:

$$\alpha_{ij} = \delta_{i,j}\frac{m_{hi}}{m_{ei}+m_{hi}} \tag{4.15}$$

$$\beta_{ij} = \delta_{i,j}\frac{m_{ei}}{m_{ei}+m_{hi}}\,. \tag{4.16}$$

Damit erhält man insgesamt für die biexzitonische Korrelation

$$\begin{aligned}B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} &= \sum_{nm} \Big\{ \tilde{\varphi}^h_n(\mathbf{k}+\hat{\alpha}\mathbf{q}, q_y)\,\tilde{\varphi}^{h'}_m(\mathbf{k}'+\hat{\beta}\mathbf{q}, -q_y)\,B^{ehe'h'}_{nm}(\mathbf{q}) \\ &- \tilde{\varphi}^h_n(\hat{\alpha}\mathbf{k}'+\hat{\beta}\mathbf{k}, k'_y-k_y)\,\tilde{\varphi}^{h'}_m(\hat{\alpha}\mathbf{k}+\hat{\beta}\mathbf{k}'+\mathbf{q}, k_y-k'_y)\,B^{e'heh'}_{nm}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\Big\}\,, \end{aligned} \tag{4.17}$$

wobei neue Koeffizienten eingeführt wurden:

$$B^{ehe'h'}_{nm}(\mathbf{q}) = \tilde{b}^{ehe'h'}_{nm}(\mathbf{q}) + \tilde{b}^{e'h'eh}_{mn}(-\mathbf{q})\,. \tag{4.18}$$

Die beiden Beiträge in (4.17) stammen daher, daß sich die beiden Elektronen und Löcher auf zwei Arten zu Exzitonen kombinieren lassen, nämlich einmal die Kombination eh-$e'h'$ und die Kombination $e'h$-eh'.

Jeder Entwicklungskoeffizient hängt noch von den Band- und Spinindizes ab. Es ist vorteilhaft, die Spinquantenzahlen so zu kombinieren, daß sich gerade und ungerade

Spinfunktionen bezüglich Vertauschung zweier Elektronenspins ergeben. Mit anderen Worten geht man zu Spin–Singulett- bzw. Spin–Triplett–Zuständen über. Für den Fall, daß die beiden Elektronindizes gleich sind, hat man trivialerweise einen Triplettzustand bereits vorliegen, der bezüglich Vertauschung der Indizes gerade ist. Interessant ist also nur der Fall, bei dem beide Indizes verschieden sind; hierfür werden neue biexzitonische Korrelationen eingeführt:

$$B^{\pm\,hh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = \frac{1}{2}\big(B^{ehe'h'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \pm B^{e'heh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}\big)\,. \tag{4.19}$$

Benutzt man diese Beziehung in der Entwicklung der biexzitonischen Korrelation (4.17), dann erhält man für den Singulett- und Triplett–Anteil:

$$\begin{aligned} B^{\pm\,hh'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \;=\; & \sum_{nm}\Big\{\tilde{\varphi}^{h}_{n}(\mathbf{k}+\hat{\alpha}\mathbf{q},q_y)\,\tilde{\varphi}^{h'}_{m}(\mathbf{k}'+\hat{\beta}\mathbf{q},-q_y)\,B^{\pm\,hh'}_{nm}(\mathbf{q}) \\ & - \;\tilde{\varphi}^{h}_{n}(\hat{\alpha}\mathbf{k}'+\hat{\beta}\mathbf{k},k'_y-k_y)\,\tilde{\varphi}^{h'}_{m}(\hat{\alpha}\mathbf{k}+\hat{\beta}\mathbf{k}'+\mathbf{q},k_y-k'_y)\,B^{\pm\,hh'}_{nm}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\Big\}\,, \end{aligned} \tag{4.20}$$

mit den neuen Koeffizienten

$$B^{\pm\,hh'}_{nm}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\big[\tilde{b}^{ehe'h'}_{nm}(\mathbf{q}) \pm \tilde{b}^{e'heh'}_{nm}(\mathbf{q})\big]\,. \tag{4.21}$$

4.3.2 Relevante Eigenfunktionen

Nun geht es darum, die in (4.14) allgemein definierten Exziton–Eigenfunktionen zu bestimmen. Dabei streben wir an, die in der Bewegungsgleichung der Übergangsamplitude (4.8) auftretende Kopplung einer in allen Indizes zweidimensionalen biexzitonischen Korrelation dadurch zu vereinfachen, daß über die k_y- und k'_y-Indizes vorab integriert wird. Diese Integrationen lassen sich auch in der Bewegungsgleichung der biexzitonischen Korrelation (4.9) so durchführen, daß ein geschlossenes Gleichungssystem erhalten bleibt. Allerdings ist es notwendig, sehr sorgfältig vorzugehen.

Führt man nämlich die Summationen vorab durch und anschließend die Entwicklung nach exzitonischen Eigenfunktionen, so sind die im vorigen Abschnitt diskutierten Symmetrierelationen nicht mehr gültig. Man hat deshalb die Entwicklung zuerst allgemein durchzuführen und anschließend die möglichen Summationen durchzuführen. Dann muß man analysieren, wie sich hierdurch die exzitonischen Eigenfunktionen transformieren. Dies wird im folgenden im Detail durchgeführt.

Wie schon erwähnt, hängen die Einteilchen–Energien entsprechend (4.5) nur von der z-Komponente des Impulsvektors k ab. Der homogene Teil der Differentialgleichung für die Übergangsamplitude $P^{eh}_{\mathbf{k}}$ hängt also nicht von k_y ab. Das hat aber zur Folge, daß $P^{eh}_{\mathbf{k}}$ ebenfalls nicht von k_y abhängen kann. Das wiederum kann man leicht einsehen, wenn man die lineare Lösung in die Inhomogenität iteriert. Eine Abhängigkeit von k_y könnte nur durch den Beitrag der biexzitonischen Korrelation herein gebracht werden. Hierüber summieren wir aber ab, so daß auch diese Möglichkeit ausscheidet. Die Übergangsamplitude hängt also nur von der Komponente parallel zum magnetischen Feld ab.

Anders sieht es für die biexzitonische Korrelation B aus. Nachdem über die y-Komponenten von $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}'$ in (4.8) absummiert worden ist, erhält man zusammen mit dem Phasenfaktor des Coulombpotentials, der ja auch von diesen Koordinaten abhängt, eine Größe, die von den z-Komponenten der Impulsvektoren $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}'$ sowie q_x und q_y abhängt. Diese Abhängigkeit bleibt auch für die Inhomogenität von (4.9) bestehen. Die biexzitonische Korrelation ist also *nicht* effektiv eindimensional. Andererseits legt die Symmetrie unseres Systems nahe, daß Wellenfunktionen nur eine Abhängigkeit von der Radialkoordinate η

$$\eta \equiv \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \tag{4.22}$$

haben sollten. Indem man die so resultierenden integrierten biexzitonischen Korrelationen auch noch über den Radialwinkel bezüglich $\mathbf{q}$ mittelt, erhält man eine neue Korrelation, die ebenfalls nur noch von η und den z-Komponenten der Impulsvektoren $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}'$ abhängt.

Insgesamt ist die biexzitonische Korrelation demnach mit dem Phasenfaktor

$$e^{iq_x(k_y - k'_y)}$$

der Coulombwechselwirkung in (4.8) zu multiplizieren und über k_z, k'_y sowie dem zu η gehörigen Winkel zu integrieren.

Zunächst wird angenommen, daß die Einteilchenenergien in (4.9) auch von k_y abhängen, so daß ein anisotropes zweidimensionales Problem vorliegt. Später wird dann der physikalische Grenzwert $m_{ey} = m_{hy} \to \infty$ durchgeführt. In die Entwicklung (4.14) gehen daher zunächst Eigenfunktionen $\tilde{\varphi}^{eh}_n$ zum zweidimensionalen Problem ein.

$$\begin{aligned}\left[\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{(k_y+q_y)^2}{m_{ey}} + \frac{(k_z+q_z)^2}{m_{ez}} + \frac{k_y^2}{m_{hy}} + \frac{k_z^2}{m_{hz}}\right]\right]\tilde{\varphi}^{eh}_n(\mathbf{k}+\hat{\alpha}\mathbf{q}, q_y)& \\ - \sum_{\mathbf{q}'} v^{q_y}_{\mathbf{q}'}\,\tilde{\varphi}^{eh}_n(\mathbf{k}+\hat{\alpha}\mathbf{q}+\mathbf{q}', q_y) = E^{eh}_n(q_z, q_y)\,\tilde{\varphi}^{eh}_n(\mathbf{k}+\hat{\alpha}\mathbf{q}, q_y)&\end{aligned} \tag{4.23}$$

Bei der Entwicklung wird sowohl die relative Elektronmasse wie auch die Lochmasse benötigt. Im folgenden werden wir bei den Wellenfunktionen den Leitungsband- und Spinindex e weglassen, da wir uns für GaAs interessieren werden. Bei diesem Halbleiter gibt es nur ein Leitungsband an der Bandkante.

Nachdem nach diesen Eigenfunktionen entwickelt wurde, wird das System der Bewegungsgleichungen für die biexzitonische Korrelation (4.9) mit dem Phasenfaktor $\exp(il^2 q_x(k_y - k'_y)$ des Coulomb–Potentials in (4.8) multipliziert und über k_y und k'_y summiert. Dadurch erhält man neue Exziton-Eigenfunktionen, die letztlich die relevanten Entwicklungsfunktionen für das Problem darstellen.

$$\varphi_n^h(k_z + \alpha_{zz} q_z, \eta) = \sum_{k_y} e^{il^2 q_x (k_y + \alpha_{yy} q_y)} \tilde{\varphi}_n^h(k_z + \alpha_{zz} q_z, k_y + \alpha_{yy} q_y, q_y) \tag{4.24}$$

Durch Einsetzen dieser Transformation in die Eigenfunktionsgleichung für $\tilde{\varphi}_n^h$ (4.23) ergibt sich die Eigenfunktionsgleichung für φ_n^h:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2(k+q)^2}{m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{m_h}\right] \varphi_n^h(k + \alpha q, \eta) \quad &- \quad \sum_{q'} V_{q'}^{\mathrm{ex}\,\eta}\, \varphi_n^h(k + \alpha q + q', \eta) \\ &= \quad E_n^h(q, \eta)\, \varphi_n^h(k + \alpha q, \eta)\ . \end{aligned} \tag{4.25}$$

In dieser Gleichung wurde der z-Index an allen Größen weggelassen, denn dies ist neben der Radialkoordinate η die einzige verbleibende Koordinate. Sollte es nötig sein, den Betrag des Vektors $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q)$ einzuführen, so wird dies explizit erwähnt.

In der Eigenfunktionsgleichung (4.25) tritt ein anderes Matrixelement der Coulomb–Wechselwirkung auf, nämlich:

$$V_q^{\mathrm{ex}\,\eta} = \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 L} \int_0^\infty d\eta'\, \eta'\, \frac{\exp(-l^2\eta'^2/2)}{\eta'^2 + q^2}\, J_0(l^2 \eta \eta')\ . \tag{4.26}$$

Die Gleichung (4.25) stellt das verallgemeinerte Eigenwertproblem zum Hamilton–Operator für die Übergangsamplituden (4.8) dar. Zunächst ist klar, daß diese Gleichung für $\eta = 0$ gerade den linearen Teil der Differentialgleichung (4.8) beschreibt, denn es gilt:

$$V_q^{\mathrm{ex}\,0} = \sum_{q_y} v_{\mathbf{q}}^0\ . \tag{4.27}$$

Läßt man auch endliche Schwerpunktsimpulse für die Übergangsamplituden zu, dann erhält man gerade das obige Eigenwertproblem.

Nachdem die Bewegungsgleichung für die biexzitonische Korrelation (4.9) nach den Eigenfunktionen $\tilde{\varphi}_n^h$ entwickelt wurde, und die oben beschriebenen Transformationen durchgeführt wurden, erhält man eine Bewegungsgleichung mit den neuen Eigenfunktionen φ_n^h. Projiziert man diese Gleichung nun auf eben diese neuen Eigenfunktionen, erhält man schließlich die Bewegungsgleichung für die zugehörigen Entwicklungskoeffizienten. Damit ist der Weg skizziert, auf dem die Dimensionalität des Systems reduziert werden kann.

4.3.3 Entwickelte Bewegungsgleichungen

Die Entwicklung (4.20) und (4.23) wird in die Bewegungsgleichung (4.9) eingesetzt und die zuvor beschriebenen Schritte durchgeführt, also zunächst der Grenzwert der Effektivmassen in y-Richtung gegen unendlich, Multiplikation mit dem Phasenfaktor $\exp(il^2(k_y - k_y'))$ und Summation über k_y und k_y'. Dadurch erhält man ein Gleichungssystem in den neuen Wellenfunktionen φ_n^h. Die Übergangsamplituden können direkt nach diesen Wellenfunktionen bei $\eta = 0$ entwickelt werden:

$$P_{\mathbf{k}}^{eh} = \sum_n \varphi_n^h(k, 0)\; P_n^{eh} \tag{4.28}$$

Wie bereits erwähnt, ist deren Eigenwertgleichung gerade die Homogenität von (4.8). Schließlich erhält man die Bewegungsgleichung für die neuen Entwicklungskoeffizienten $B_{nm}^{\pm\, hh'}(\eta, q)$, indem man die erhaltene Gleichung auf $\varphi_n^h(k + \alpha q, \eta)\, \varphi_m^{h'}(k' + \beta q, \eta)$ projiziert und über die Winkelkoordinate zu η mittelt:

$$B_{nm}^{\pm\, hh'}(\eta, q) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi}\, B_{nm}^{\pm\, hh'}(\mathbf{q}) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi}\, B_{nm}^{\pm\, hh'}(q, \eta \sin\theta)\,. \tag{4.29}$$

Nach diesen Prozeduren ergibt sich:

$$\begin{aligned} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_n^h(q,\eta) + E_m^{h'}(q,\eta) \right] B_{nm}^{\pm\, hh'}(q,\eta) \;+ \sum_{n'm'} \sum_{q'\eta'} H_{nm,n'm'}^{\pm}(q\eta, q'\eta')\, B_{n'm'}^{\pm\, hh'}(q',\eta') \\ = \sum_{n'm'} C_{nm,n'm'}^{\pm}(q\eta) \left[P_{n'}^{eh}\, P_{m'}^{e'h'} \pm P_{n'}^{e'h}\, P_{m'}^{eh'} \right]. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Die neueingeführten Größen werden im folgenden kurz diskutiert. Die Quelle der biexzitonischen Korrelationen ist offensichtlich ein Produkt von Übergangsamplituden. Das zugehörige Matrixelement ist gegeben durch den Ausdruck:

$$C_{nm,n'm'}^{\pm}(q\eta) = \frac{1}{2} \sum_{\bar n \bar m \bar q \bar\eta} \left[1 \mp S \right]^{-1}_{nm,\bar n \bar m}(q\eta, \bar q \bar \eta) \left[V^{\mathrm{c}}_{\bar n \bar m, n'm'}(\bar q \bar \eta) \mp V^{\mathrm{xc}}_{\bar n \bar m, n'm'}(\bar q \bar \eta) \right]. \tag{4.31}$$

Es besteht aus einem Anteil der direkten Coulomb–Wechselwirkung V^{c} sowie einem Beitrag der Austausch–Wechselwirkung V^{xc}. Diese werden mit der inversen Überlappmatrix $(1 - S)^{-1}$ multipliziert. Die zusätzliche Multiplikation mit der Überlappmatrix ist zurückzuführen auf die beiden Anteile in der Entwicklung der biexzitonischen Korrelationsfunktion in (4.20), nämlich die Nichtorthogonalität der exzitonischen Eigenfunktionen zu verschiedenen Bandkombinationen. Um die Bewegungsgleichung der Entwicklungskoeffizienten $B_{nm}^{\pm\, hh'}(q)$ in (4.20) zu erhalten, muß die Bewegungsgleichung (4.9) auf die adjungierten Eigenfunktionen aus (4.25) projiziert werden. Das Argument der adjungierten Eigenfunktionen wird dabei wie im ersten Term der Entwicklung (4.20) gewählt, nämlich $\varphi_n^h(k+\alpha q,\eta)\,\varphi_m^h(k'+\beta q,\eta)$. Die Projektion wird deshalb so gewählt, weil sie auf dem ersten Summanden in (4.20) orthogonal ist. Der zweite Summand ergibt nach der Projektion die Überlappmatrix S. Um nun letztlich die Bewegungsgleichung für die Koeffizienten $B_{nm}^{\pm hh'}(q)$ in (4.20) zu erhalten, muß nur noch mit der inversen Matrix multipliziert werden.

Die Definition der Überlappmatrix findet sich im Anhang D, ebenso wie die Definitionen für die beiden effektiven Coulomb–Wechselwirkungsmatrizen. Wie man an der Kombination der Quellterme erkennt, verschwinden diese gerade für den Singulett–Anteil, also das untere Vorzeichen, wenn beide Elektronspins parallel stehen. Dies ist auch zu erwarten, denn mit zwei parallelen Spins kann der gebundene Singulett–Zustand bekanntermaßen nicht angeregt werden [49] (vgl. Anhang C).

Die Wechselwirkungsmatrix ist zu schreiben als Matrixprodukt aus der inversen Überlappmatrix mit Coulomb–Wechselwirkungsmatrixelementen, die ihrerseits wieder einen direkten und einen Austausch–Anteil enthalten:

$$\begin{aligned} H^{\pm}_{nm,n'm'}(q\eta,q'\eta') \;=\; & \sum_{\bar n\bar m\bar q\bar\eta} \left[1\mp S\right]^{-1}_{nm,\bar n\bar m}(q\eta,\bar q\bar\eta)\cdot \\ & \cdot\Big[H^{\mathrm{c}}_{\bar n\bar m,n'm'}(\bar q\bar\eta,q'\eta')\mp H^{\mathrm{xc}}_{\bar n\bar m,n'm'}(\bar q\bar\eta,q'\eta')\Big]\,. \end{aligned} \tag{4.32}$$

Auf die explizite Angabe der Matrixelemente wird hier verzichtet; sie können im Anhang D nachgesehen werden. Hier sei nur erwähnt, daß der Beitrag der Austausch–Wechselwirkung H^{xc} sowohl von $q+q'$ als auch von $q-q'$ abhängt. Das hat zur Folge, daß sowohl in der gewählten Impulsraumdarstellung als auch im Ortsraum die Wechselwirkung nichtlokal ist. Geht man aber zu unendlicher Lochmasse über, so daß $\alpha=1$ und $\beta=0$ gelten, so hängt die Wechselwirkung nur noch von $q-q'$ ab. Bei Transformation in den Ortsraum wird aus der Faltung dann ein Produkt mit einer lokalen Wechselwirkung, die vom Abstand der Löcher abhängt. Beschränkt man sich überdies nur auf den Grundzustand der Exzitonen, so erhält man genau das von Heitler und London beschriebene Problem [49].

Die Bewegungsgleichung für die Übergangsamplituden wird nun ebenso in den Exziton–Eigenfunktionen entwickelt und man erhält:

$$\begin{aligned} &\big[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-E_n^h(0,0)\big]P_n^{eh}=\mathbf{d}^{eh}\mathbf{E}\,\hat\varphi_n^{eh}(0,0) \\ &-\sum_{e'h'ml}\Big[\mathbf{d}^{eh'}\mathbf{E}\,b^{hh'h}_{nml}P_m^{e'h'*}P_l^{eh'}+\mathbf{d}^{e'h}\mathbf{E}\,b^{hh'h'}_{nml}P_m^{e'h'*}P_l^{e'h}\Big] \\ &+\sum_{e'h'n'm'}V^{\mathrm{st}}_{nm,n'm'}\,P_m^{e'h'*}P_{n'}^{e'h}P_{m'}^{eh'} \\ &+\sum_{e'h'n'm'}\sum_{q\eta}\big[V^{\mathrm{c}}_{n'm',nm}(q\eta)-V^{\mathrm{xc}}_{n'm',nm}(q\eta)\big]^*P_m^{e'h'*}B^{+hh'}_{n'm'}(q,\eta) \end{aligned}$$

$$+\sum_{e'h'n'm'}\sum_{q\eta}\left[V^{\rm c}_{n'm',nm}(q\eta)+V^{\rm xc}_{n'm',nm}(q\eta)\right]^{*}P^{e'h'*}_{m}\,B^{-\,hh'}_{n'm'}(q,\eta)\,. \tag{4.33}$$

Die im Vergleich zu (4.30) zusätzlich auftretenden Matrixelemente für das Pauli–Blocking b und die statische Coulomb–Wechselwirkung $V^{\rm st}$ sind im Anhang D definiert.

Die so durchgeführte und zugegebenermaßen recht aufwendige Entwicklung (4.20), (4.23)–(4.25) stellt eine systematische Möglichkeit dar, die Vierteilchen–Korrelationen in optischen Spektren zu behandeln. Im Gegensatz zu Variationswellenfunktionsansätzen liefert sie nicht nur den untersten gebundenen Zustand des Biexzitons, sondern auch angeregte Zustände und insbesondere das exzitonische Streukontinuum. Wie sich bei der Diskussion der erzielten Ergebnisse zeigen wird, ist dies ein wesentlicher Punkt. Allerdings muß erwähnt werden, daß es aus praktischen Gründen unmöglich ist, mehr als einige wenige Exziton–Eigenfunktionen φ^h_n in der Entwicklung zu berücksichtigen. Dies stellt bei den im Experiment gewählten Anregungsbedingungen aber keine starke Einschränkung dar, da die Laserpulse energetisch so schmal sind, daß nur die niedrigsten exzitonischen Zustände angeregt werden.

Werden allerdings auch ungebundene Elektron–Loch–Paare angeregt, muß man entsprechend den im Kapitel 3 vorgestellten Methoden anders an das Problem herangehen. Die Wechselwirkung freier Ladungsträger führt nämlich zu Abschirmungseffekten der Coulomb–Wechselwirkung und bei hohen Anregungsdichten schließlich zur Zerstörung der Korrelationen, so daß man schließlich in eine durch inkohärente Dynamik bestimmte Situation gelangt. Diesen Übergangsbereich quantitativ zu beschreiben stellt eine Herausforderung für die Zukunft dar. Hier und im folgenden werden wir uns ausschließlich der kohärenten Dynamik zuwenden.

4.4 Modellierung und numerische Implementierung

Wie im Abschnitt 4.1 beschrieben wurde, werden beim Vierwellenmischen zwei Pulse mit den Wellenvektoren k_1 und k_2 auf die Probe gerichtet. Im allgemeinen können die Pulse auch verschiedene Zentralfrequenzen haben, wir wollen hier aber annehmen, daß die Zentralfrequenzen gleich und kurz unterhalb der Halbleiterbandkante eingestellt sind. Wir bezeichnen diese im folgenden als ω_0. Das Signal des Vierwellenmischens wird in der abgebeugten Richtung $2k_1 - k_2$ detektiert. Die beiden Pulse sind um die Verzögerung τ gegeneinander verschoben. Per Definition ist τ positiv, wenn der k_2-Puls vor dem k_1-Puls eintrifft.

Das elektrische Feld, das in die Bewegungsgleichung für die Übergangsamplitude (4.33) eingeht, besteht also aus den Anteilen der beiden Pulse

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(t) &= \mathbf{E}_1(t) + \mathbf{E}_2(t) \\ &= E_1(t)\,\mathbf{e}_1\,e^{i\omega_0 t} + E_2(t+\tau)\,\mathbf{e}_2\,e^{i\omega_0 t} + \text{c. c.}\,. \end{aligned} \tag{4.34}$$

Die Pulse werden jeweils durch einen Polarisationsvektor $\mathbf{e}_i$ und eine reelle Enveloppenfunktion $E_i(t)$ charakterisiert. Wir werden annehmen, daß es sich um Gaussche Einhüllende handelt. Die volle Halbwertsbreite experimenteller Pulse beträgt typischerweise 50 fs bis 2 ps.

Die Ortsabhängigkeit des elektrischen Feldes kann vernachlässigt werden, denn die betrachteten Proben sind dünn im Vergleich zur Wellenlänge des verwendeten Lichtes. Allerdings muß die Richtungsabhängigkeit der Pulse beachtet werden, die durch die Indizes angedeutet wird. Wie man aus der Bewegungsgleichung für die Übergangsamplituden (4.33) erkennt, überträgt sich in linearer Ordnung des elektrischen Feldes die Richtungsabhängigkeit des anregenden Pulses auf die Übergangsamplitude. Formal läßt sich dies zeigen, wenn man bei der Definition der Übergangsamplitude (4.8) unterschiedliche Impulse für Elektron und Loch zuläßt und auf diese Weise effektiv endliche Schwerpunktimpulse für die Exzitonen einführt. Dieser endliche Schwerpunktimpuls ist in linearer Näherung gerade der Impuls des Lichtes, der in (4.8) nicht explizit aufgeführt wurde.

Dieses Ergebnis ist auch von der Anschauung her klar, denn die lineare Polarisation der Probe breitet sich natürlich gerade in den Richtungen der beiden Pulse aus.

Das bedeutet wiederum, daß die Übergangsamplituden auch noch nach den Richtungen zu klassifizieren sind. Da wir uns hier auf die dritte Ordnung im elektrischen Feld beschränken werden, treten neben der k_1- und k_2-Richtung auch noch die Richtungen $2k_1 - k_2$ und $2k_2 - k_1$ auf sowie natürlich die entgegengesetzten Richtungen. Da aber in dritter Ordnung im elektrischen Feld die Polarisationen in die beiden abgebeugten Richtungen nicht mehr an die Polarisationen der linearen Richtungen koppeln, braucht man lediglich eine dieser Richtungen in die Rechnung einzubeziehen. Ferner werden nach der Rotating–Wave–Näherung nur resonante Beiträge berücksichtigt.

Die Polarisationsrichtungen der beiden Pulse können natürlich frei gewählt werden. Bei zwei linearen Polarisationen erhält man dadurch einen zusätzlichen Parameter, um bestimmte Anteile der Wechselwirkung ein- oder auszuschalten. Bei zirkularen Polarisationen hat man diesen Freiheitsgrad nicht. Es ist sogar so, daß theoretisch für entgegengesetzt zirkulare Polarisationen überhaupt kein Vierwellenmisch–Signal zu erwarten ist. Dies kann man sich anhand der Auswahlregeln für die Dipolübergänge $\mathbf{d}^{eh}$ klar machen. Abbildung 4.2 soll dabei behilflich sein. Die beiden Valenzbänder haben den Gesamtdrehimpuls $J = 3/2$. Die Schwerlochbänder haben dabei die z-Komponente $J_z = \pm 3/2$, die Leichtlochbänder $J_z = \pm 1/2$. Mit

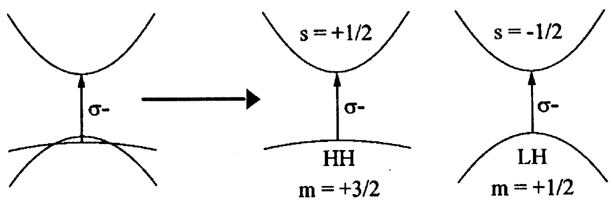


Abbildung 4.2: Bandschema für GaAs. Es sind die beiden untersten Valenzbänder und das oberste Leitungsband skizziert. Mit zirkular polarisiertem σ^--Licht kann man von den spinentarteten Bändern jeweils einen Übergang treiben.

einer zirkularen Polarisation (σ^+-Licht), kann man von den beiden jeweils spinentarteten Schwer- und Leichtlochbändern lediglich einen Übergang anregen, für das Schwerloch–Exziton also den Übergang $-3/2 \rightarrow -1/2$ und für das Leichtloch–Exziton den Übergang $-1/2 \rightarrow 1/2$. Mit dem anderen Puls wird der andere Spinunterraum angeregt. Um ein Signal dritter Ordnung erzeugen zu können, muß der Beitrag der statischen Coulomb–Wechselwirkung oder der der biexzitonischen Korrelationen in (4.33) von Null verschieden sein. Für den Beitrag der statischen Coulomb–Wechselwirkung ist dies unmöglich, denn wenn P_n^{eh} aus dem einen und $P_m^{e'h'*}$ aus dem anderen Spinraum stammen, dann sind die Übergänge zu $P_{n'}^{e'h}$ oder $P_{m'}^{eh'}$ verboten. Für den entsprechenden Quellterm in der Bewegungsgleichung der biexzitonischen Korrelation (4.30) gilt entsprechendes. Aber auch der andere Quellterm in dieser Gleichung liefert nichts, denn beide Polarisationen müssen vom gleichen Puls getrieben werden, was aber auch nicht möglich ist. Damit ist klar, daß im Rahmen dieser Theorie kein Signal für kontrazirkulare Anregungsgeometrie zu erwarten ist. Es sei an dieser Stelle aber schon erwähnt, daß experimentell sehr wohl ein Vierwellenmisch–Signal gemessen wird, wenngleich es etwa einen Faktor 100 kleiner ist. Die Unzulänglichkeit der Theorie, kein Signal zu liefern, ist darin begründet, daß in dem gewählten Effektivmassen–Modell die kinetische Energie diagonal in den Bandindizes ist. Eine Verbesserung des Modells würde die Einführung des sogenannten *Luttinger Hamilton–Operators* [80, 79, 46] bringen, der auch Nichtdiagonalelemente enthält. Dann würde die Theorie auch bei kontrazirkularer Anregungsgeometrie ein Vierwellenmisch–Signal liefern. Da das Experiment ein solch kleines Signal bei kontrazirkularer Anregung liefert, ist unsere vereinfachte Beschreibung der Einteilchen–Zustände bei anderen Anregungsgeometrien gerechtfertigt.

In dieser Arbeit werden wir uns auf den Fall beschränken, daß beide Pulse gleichsinnig zirkular polarisiert sind. Das hat zur Folge, daß von beiden biexzitonischen Korrelationen nur diejenige beiträgt, die zum Triplett–Zustand korrespondiert, also $B_{nm}^{+hh'}$. Aus (4.30) ist unmittelbar klar, daß der Quellterm für $B_{nm}^{-hh'}$ verschwindet, wenn alle Bandindizes gleich sind. Damit ist also auch ausgeschlossen, daß ein gebundenes Biexziton angeregt werden kann. Wie die Experimente und theoretischen Ergebnisse zeigen werden, ist der Einfluß dieser Vierteilchen–Korrelationen auf die kohärente Dynamik dennoch erheblich.

Für die numerische Auswertung werden die Variabeln q und η diskretisiert. Dadurch erhält der Wechselwirkungsterm in der Bewegungsgleichung für die biexzitonische Korrelation (4.30)–(4.32) die Struktur einer Matrixmultiplikation, die inverse Überlappmatrix läßt sich dann auch explizit bestimmen. Die Coulomb–Matrixelemente stellen bei der Rechnung auf einem diskreten Gitter ein Problem dar, da sie für $q' = q$ und $\eta' = \eta$ singulär werden. Es handelt sich aber um eine integrable Singularität, d. h. daß das Integral über eine der Koordinaten existiert. Damit könnte die numerische Schwierigkeit behoben werden, indem man für den Fall der Singularität eine kleine Abschirmungskonstante einführt oder aber den Wert des nächsten Gitterpunktes übernimmt. Ist die Zahl der Gitterpunkte hinreichend dicht, so konvergiert dieses Verfahren.

In den hier vorgestellten Rechnungen wurde es jedoch vorgezogen, die Singularität zu heben. Das Verfahren wird im Anhang E vorgestellt. Dabei wird der Wert der Wechselwirkungsmatrix an der Stelle der Singularität, also auf der Diagonalen, so gewählt, daß er einen guten Schätzwert für das Integral über den Bereich zwischen den beiden nächsten Stützstellen ergibt. Diese Methode konvergiert wesentlich schneller als die zuvor skizzierte. Somit wird es möglich, deutlich weniger Stützstellen zu benutzen. Es zeigte sich außerdem, daß mit diesem Verfahren sehr viel schneller bekannte Exziton–Eigenenergien reproduziert werden konnten [102].

Die vollständige Lösung der Bewegungsgleichungen (4.33) und (4.30) ist immer noch sehr aufwendig und erfordert den Einsatz von Höchstleistungsrechnern. Es wurden daher nur sehr wenige Lösungen des vollständigen Problems durchgeführt. Diese erlauben jedoch eine systematische Bewertung von Näherungen, die für bestimmte Polarisationsgeometrien den numerischen Aufwand erheblich reduzieren.

Da wir uns darauf beschränken werden, kozirkular polarisierte Pulse zu betrachten, treten gebundene Biexzitonen in der Dynamik nicht auf. Die Wechselwirkung zwischen den Exzitonen bewirkt dann im wesentlichen eine Verschiebung des spektralen Gewichts der Beiträge der Exzitonen. Dieser Effekt ist aber von untergeordneter Bedeutung für viele qualitativen Merkmale des Vierwellenmisch–Experimentes. Da andererseits die Berechnung der Wechselwirkungsmatrix sehr aufwendig und ihre Berücksichtigung in der Integration der Bewegungsgleichungen ebenfalls zeitraubend ist, ist es zur Beschreibung qualitativer Effekte ausreichend, diese Wechselwirkung zu vernachlässigen. Diese Näherung entspricht der *zweiten Bornschen Näherung.*

Quantitative Resultate lassen sich im Rahmen der Bornschen Näherung allerdings nicht erwarten, da selbst im Triplett–Zustand die Umverteilung spektralen Gewichts im biexzitonischen Kontinuum aufgrund der Wechselwirkungsterme erheblich ist. Überhaupt nicht mehr gerechtfertigt ist die zweite Bornsche Näherung, wenn gebundene Biexzitonen durch die Anregungsbedingungen möglich sind. Denn es ist gerade der Wechselwirkungsterm, der diesen Zustand erst möglich macht. Daher verschiebt die Wechselwirkung nicht nur das spektrale Gewicht der exzitonischen Beiträge, sondern es treten sogar neue Resonanzen auf.

Schließlich soll noch auf die Wahl der phänomenologischen Dämpfungskonstanten eingegangen werden. Die Konstanten für den Schwerloch- bzw. Leichtloch–Übergang liegen in derselben Größenordnung. Es ist aber anzunehmen, daß der energetisch größere Übergang auch schneller dephasiert. Wie unten noch erklärt wird, entspricht das in entsprechenden Experimenten dem Schwerloch–Übergang. Für die biexzitonischen Korrelationen wurde nur eine Dämpfungskonstante eingeführt, um nicht zu viele Parameter zu erhalten. Die zugehörige Dephasierungszeit ist aber in Übereinstimmung mit entsprechenden Experimenten als sehr viel länger als diejenige der Übergangsamplituden anzunehmen, denn es handelt sich um eine reine Korrelation. In den Rechnungen wurde sie deshalb in der Regel zu Null gesetzt.

4.5 Ergebnisse

Die Experimente wurden an GaAs–Proben durchgeführt. Während in Volumenmaterial normalerweise das Schwerloch- und Leichtlochband am Γ-Punkt entartet sind, ist die Entartung bei den verwendeten Proben aufgehoben. Dies ist auf mechanische Spannungen der Proben, zurückzuführen, die durch das Aufwachsen des GaAs auf das Substrat bedingt sind. Auf diese Weise liegt das Leichtlochband am Γ-Punkt energetisch unterhalb des Schwerlochbandes, im Gegensatz zu vielen Experimenten an GaAs–Quantentrögen. Die Zentralfrequenz der beiden Pulse wurde so gewählt, daß das 1s–Schwerloch- und Leichtloch–Exziton etwa gleich angeregt wurden. Energetisch höher gelegene Exzitonen werden nicht angeregt, da diese außerhalb der Halbwertsbreite der Pulse liegen. Die Pulsdauer betrug 100 fs. Wie bereits erklärt, werden nur Experimente untersucht, bei denen beide Pulse kozirkular polarisiert waren.

4.5.1 Abhängigkeit von der Anregungsdichte

Die Abbildung 4.3 zeigt die Abhängigkeit des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals von der Anregungsdichte. Es ist zu erkennen, daß das Signal für positive Verzögerungszeiten durchgängig Oszillationen aufweist. Diese entsprechen der Differenz zwischen den Energien des Schwerloch- und Leichtloch–Exzitons. Die Abhängigkeit der Abfallszeit von der Anregungsdichte ist relativ schwach.

Anders sieht es jedoch mit der Abhängigkeit der Anstiegszeit, d. h. des Verhaltens für negative Verzögerungszeiten aus. Bei hohen Dichten steigt das Signal steil an, für die

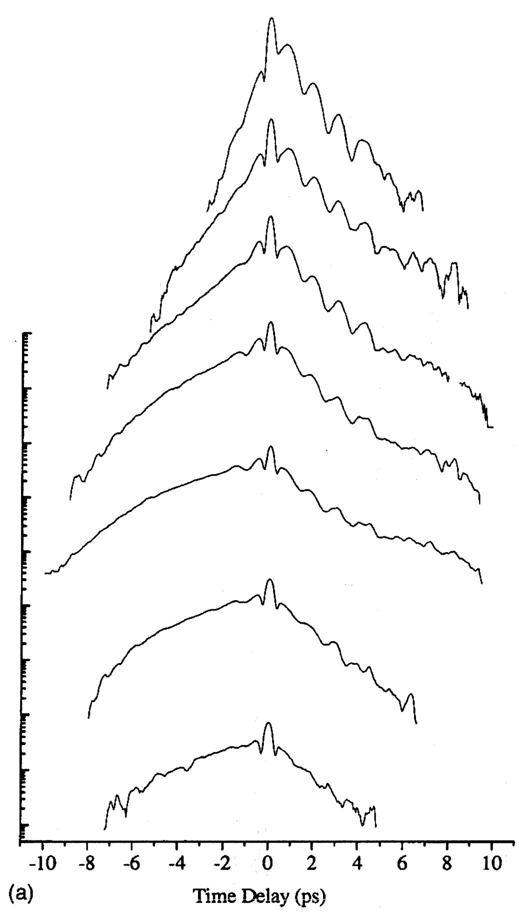


Abbildung 4.3: Gemessene Abhängigkeit des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals von der Anregungsdichte aus [60]. Die Messungen wurden bei 10 T durchgeführt. Die Dichten betragen von oben nach unten $N = 10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$, $N/2$, $N/3$, $N/6$, $N/20$, $N/63$, $N/200$.

höchste dargestellte Anregungsdichte von etwa $10^{17}cm^{-3}$ Elektronen ist nahezu kein Signal für diese Verzögerungszeiten vorhanden. Je niedriger die Anregungsdichten werden, desto länger wird die Anstiegszeit. Bei der niedrigsten Anregungsdichte ist sie deutlich länger als die Abfallszeit.

Eine realistische Modellierung der Dichteabhängigkeit steht noch aus. Das prinzipielle Verhalten kann aber im Rahmen der vorgestellten Theorie verstanden werden. Dazu zeigt Abbildung 4.4 einen Vergleich einer Rechnung im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Gleichungen, wo biexzitonische Korrelationen ausgeschlossen werden, mit einer Rechnung inklusive dieser Korrelationen in zweiter Bornscher Nähe-

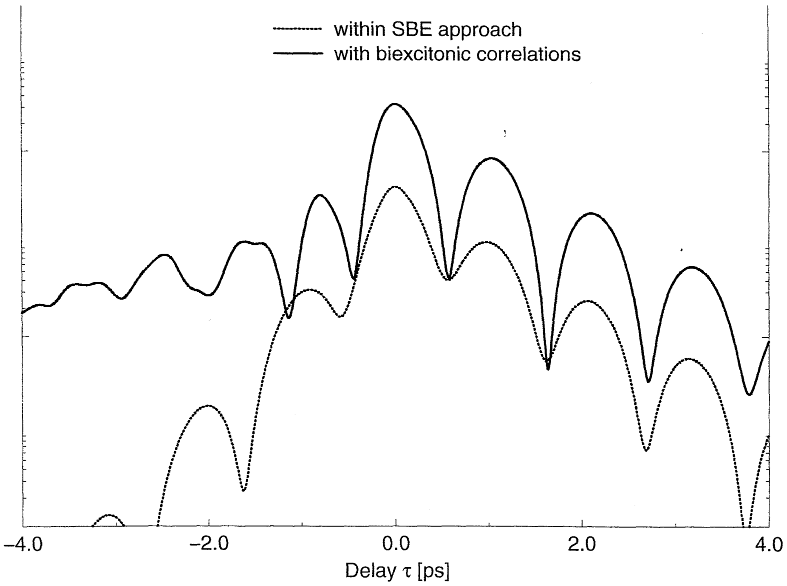


Abbildung 4.4: Zeitintegriertes Vierwellenmisch–Signal, berechnet im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Gleichungen und in zweiter Bornscher Näherung.

rung. Man erkennt, daß das Vierwellenmisch–Signal für positive Verzögerungszeiten sehr ähnlich ist. Der Grund hierfür ist, daß die Beiträge der statischen Coulomb–Wechselwirkung dominieren. Bei negativen Verzögerungen steigt das Signal im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Gleichungen jedoch schnell an, wohingegen der Anstieg unter Berücksichtigung von Vierteilchen–Korrelationen sehr viel flacher ist. Insbesondere ist die Anstiegszeit länger als die Abfallszeit für positive Verzögerungen.

Im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Theorie kann man zeigen, daß es sogar eine feste Beziehung zwischen der Anstiegszeit und der Abfallszeit im Vierwellenmisch–Signal gibt. Ist nämlich nur ein Band beteiligt oder sind die Abfallszeiten von Schwerloch- und Leichtloch–Polarisation gleich, dann ist die Anstiegszeit gerade halb so lang wie die Abfallszeit. Dies läßt sich anhand von (4.33) qualitativ verstehen. Der relevante Quellterm ist nun lediglich die statische Coulomb–Wechselwirkung V^{st}, der Beitrag des Pauli–Blockings kann durchweg vernachlässigt werden [7]. Für positive Verzögerungen trifft der k_2-Puls vor dem k_1-Puls ein, das bedeutet, daß bei einer Dephasierungskonstanten von γ der Quellterm qualitativ beschrieben wird durch:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P &\sim \theta(t) e^{-\gamma(t+\tau)} e^{-\gamma t} \\ \Rightarrow P &\sim e^{-\gamma\tau} . \end{aligned} \tag{4.35}$$

Das Signal setzt natürlich erst ein, nachdem auch der spätere der beiden Pulse eingetroffen ist, hier also der k_1-Puls. Bei negativen Verzögerungen gilt entsprechend

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P &\sim \theta(t+\tau) e^{-\gamma(t+\tau)} e^{-\gamma t} \\ \Rightarrow P &\sim e^{2\gamma\tau} \,. \end{aligned} \tag{4.36}$$

Damit ist das qualitative Verhalten geklärt.

Der Beitrag der biexzitonischen Korrelationen fällt aber sehr viel langsamer als die Übergangsamplituden ab. In den Rechnungen wurde die phänomenologische Dämpfungskonstante sogar zu Null gesetzt. Die im zeitintegrierten Signal gefundene Anstiegszeit ist somit nicht auf diese phänomenologische Dämpfung zurückzuführen, sondern stellt vielmehr einen Interferenzeffekt innerhalb des biexzitonischen Streukontinuums dar.

4.5.2 Abhängigkeit vom Magnetfeld

Als nächstes soll die Abhängigkeit von der magnetischen Feldstärke diskutiert werden. Abbildung 4.5 zeigt dazu gemessene zeitintegrierte Vierwellenmisch–Signale. In der Abbildung steigt das Magnetfeld von unten nach oben von 0 T bis 10 T in Schritten von 1 T. Mit zunehmendem Magnetfeld nimmt für negative Verzögerungen die Anstiegszeit des zeitintegrierten Signals deutlich zu. Die Abfallszeit ist bei großen Magnetfeldern relativ konstant, lediglich im Bereich von 0 T bis 4 T steigt sie an. Bei kleinen Magnetfeldern erkennt man außerdem für negative Verzögerungen Oszillationen, die dann mit zunehmendem Magnetfeld weniger ausgeprägt sind.

Zum Vergleich zeigt Abbildung 4.6 entsprechende berechnete zeitintegrierte Spektren. Auch hier wird das Magnetfeld von unten nach oben erhöht. Wie im Experiment nimmt mit zunehmendem Magnetfeld die Anstiegszeit ab. Außerdem werden die Oszillationen für negative Verzögerungen immer mehr ausgewaschen.

Der Grund hierfür ist, daß sich die Korrelationseffekte mit wachsendem Magnetfeld verstärken. Wird das Magnetfeld erhöht, so verkleinert sich der Zyklotron–Radius (vgl. Anhang B). Die Bewegung der Elektronen und Löcher wird auf einen kleineren räumlichen Bereich eingeschränkt. Dadurch werden Korrelationseffekte, wie sie insbesondere durch biexzitonische Korrelationen beschrieben werden, wichtiger.

Ein weiterer Effekt, der den zunehmenden Einfluß der biexzitonischen Korrelation belegt, ist das Einsetzen des flachen Anstiegs bei negativen Verzögerungen. Bei niedrigen Magnetfeldern macht sich der charakteristische flache Anstieg erst bei hohen negativen Verzögerungen bemerkbar. Das bedeutet, daß der Beitrag der statischen Coulomb–Wechselwirkung relativ stark ist. Da dieser aber für zunehmend negativere Verzögerungen schneller abfällt, setzt sich schließlich der flach verlaufende Beitrag der Vierteilchen–Korrelation durch. Bei hohen Magnetfeldern ist das anfängliche

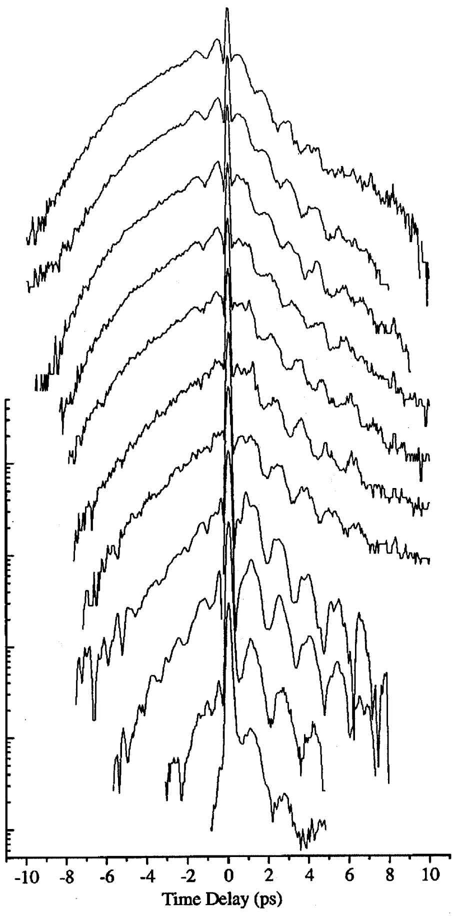


Abbildung 4.5: Gemessene Abhängigkeit des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals vom Magnetfeld von 0 T (unten) bis 10 T (oben) in Schritten von 1 T aus [60]. Die Anregungsdichte betrug $5 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$.

Abfallen des Signals für kleine negative Verzögerungen nicht mehr zu beobachten, d. h. der Beitrag der biexzitonischen Korrelation ist deutlich größer geworden.

An dieser Stelle soll auch auf den Peak bei Verzögerungen von 0 ps eingegangen werden. Er wird auch als *kohärenter Peak* bezeichnet. In vielen Rechnungen, die zahlreiche Merkmale des Vierwellen–Mischexperimentes richtig widergeben konnten, tritt dieser Peak nicht auf [7, 10, 100, 61]. Wie die Rechnungen zeigen, kann er erst dann reproduziert werden, wenn die biexzitonische Dynamik an ein zusätzliches Kontinuum ankoppelt. Dieses Kontinuum wird hier durch die Radialkoordinate η geliefert. Macht man nämlich die über die zweite Bornsche Näherung hinausgehende Annahme, daß die Abhängigkeit von der Radialkoordinate sowohl in der Energie der

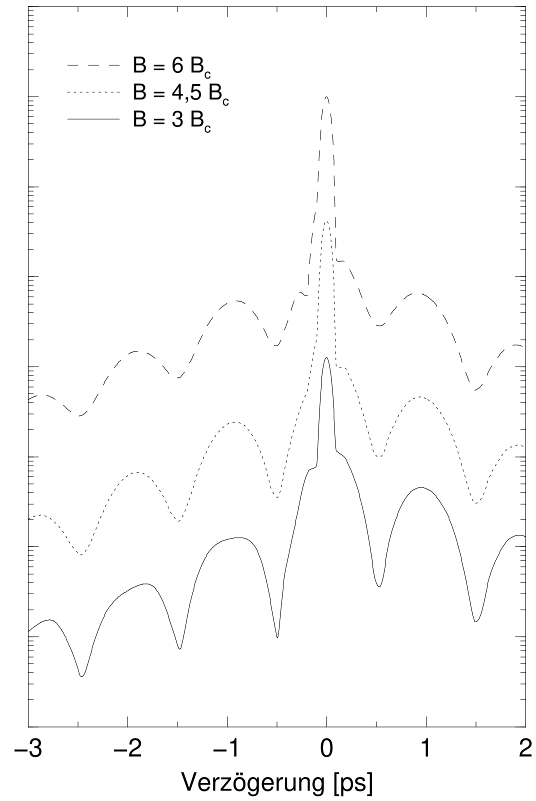


Abbildung 4.6: Berechnete zeitintegrierte Vierwellenmisch–Signale zu verschiedenen Magnetfeldern. Die Feldstärken betrugen 3, 4.5 und 6 B$_c$.

Exzitonen als auch bei den biexzitonischen Korrelationen klein ist, kann man sie in diesen Größen vernachlässigen. Dann kann man ein eindimensionales Problem in der longitudinalen Koordinate k_z entlang des magnetischen Feldes erhalten, indem man die Coulomb–Wechselwirkung über die Radialkoordinate mittelt. Die biexzitonische Korrelation in dieser Näherung koppelt also nicht mehr an das Kontinuum, das durch die Radialkoordinate dargestellt wird. Wie Rechnungen unter dieser Annahme zeigen, tritt der kohärente Peak dann nicht mehr auf [76, 77, 61]. In den hier vorgestellten Rechnungen kann er hingegen durchgängig wiedergegeben werden.

Die relative Höhe des kohärenten Peaks ist dabei abhängig von der magnetischen Feldstärke. Je größer das Magnetfeld wird, um so ausgeprägter wird diese Struktur. Da auch sie auf die Dynamik der Vierteilchen–Korrelationen zurückzuführen ist, wird dieses Verhalten ebenfalls verständlich. Wie bereits erwähnt, nehmen die Korrelationseffekte mit zunehmender magnetischer Feldstärke aufgrund der zunehmenden räumlichen Beschränkung zu.

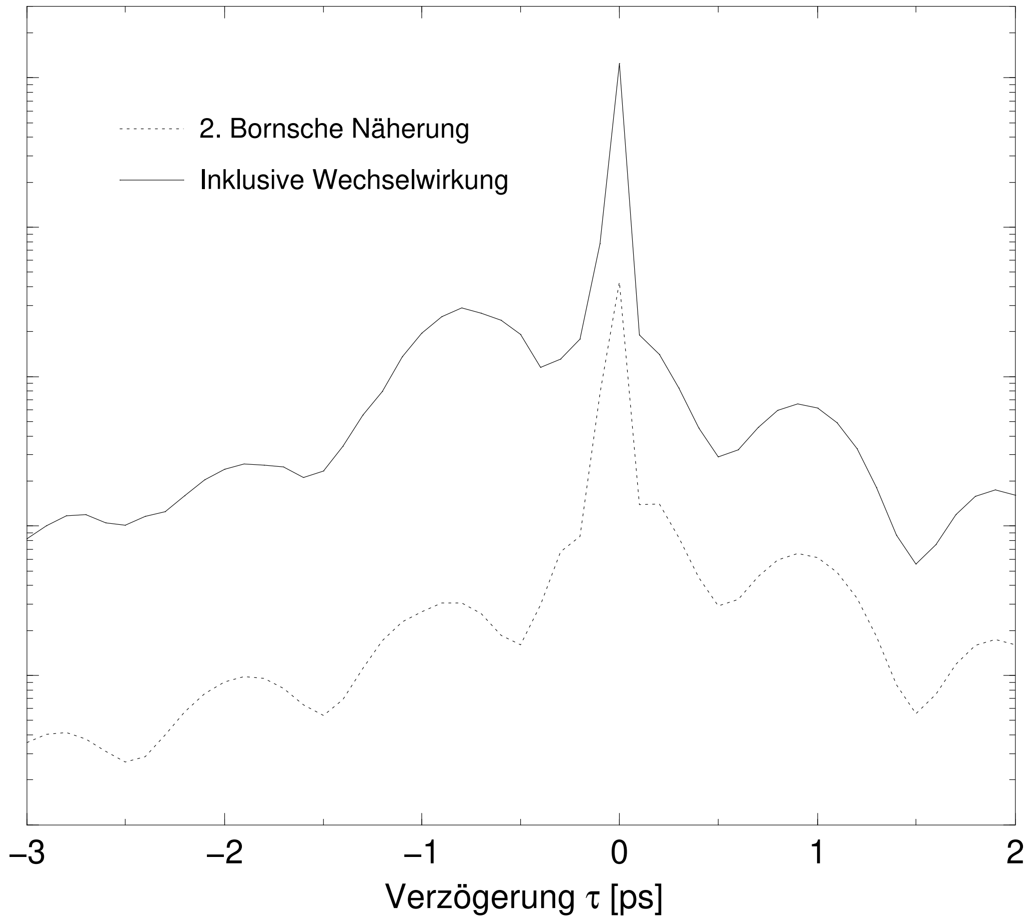


Abbildung 4.7: Zeitintegriertes Vierwellenmisch–Signal mit vollständiger Exziton–Exziton–Wechselwirkung. Zum Vergleich ist das zeitintegrierte Spektrum in 2. Bornscher Näherung ebenfalls eingezeichnet. Das Magnetfeld betrug $B = 4\ B_c$.

4.5.3 Spektren inklusive der Exziton–Exziton–Wechselwirkung

Da die Berechnung eines zeitintegrierten Spektrums unter Einschluß der Exziton–Exziton–Wechselwirkung sehr aufwendig ist, kann hier nur eine Rechnung für ein Magnetfeld vorgestellt werden. In Abbildung 4.7 wird das vollständige zeitintegrierte Spektrum mit demjenigen in zweiter Bornscher Näherung verglichen. Alle experimentellen und numerischen Parameter wurden gleich gewählt.

Man erkennt, daß für positive Verzögerungen die beiden Spektren kaum Unterschiede aufweisen. Da dieser Teil des Spektrums durch den Beitrag der Halbleiter–Bloch–Gleichungen dominiert wird, ist dieses Ergebnis verständlich.

Für negative Verzögerungen ergeben sich aber deutliche Abweichungen. Bei vollständiger Berücksichtigung der Exziton–Wechselwirkungen steigt das Signal für negative Verzögerungszeiten relativ zu demjenigen für positive an. Die erste Oszillation bei kleiner negativer Verzögerung ist in etwa so stark wie das Signal für positive Verzögerung bei etwa $\tau = 0.25$ ps. In zweiter Bornscher Näherung fällt das Signal für negative Verzögerungen hingegen zunächst steiler ab.

Dies ist darauf zurückzuführen, daß der Beitrag der biexzitonischen Korrelation zum zeitintegrierten Spektrum weiter angewachsen ist. Infolgedessen wird das Signal für $\tau < 0$ größer, denn dieser Teil des Signals wird wesentlich durch diesen Beitrag bestimmt. Der Beitrag der Hartree–Fock–Theorie verliert weiter an Bedeutung.

Außerdem werden die Oszillationen bei großen negativen Verzögerungen stärker ausgewaschen. Der Grund hierfür ist, daß aufgrund der Wechselwirkungsterme die biexzitonischen Korrelationsfunktionen stärker mischen, wodurch sich Oszillationen durch Interferenz mehr und mehr gegenseitig auslöschen.

Die Anstiegszeit für $\tau < 0$ hat sich im Vergleich zur Rechnung in zweiter Bornscher Näherung nicht wesentlich geändert. Da in den Rechnungen die Dämpfung γ_B der biexzitonischen Korrelation zu Null gewählt wurde, ist die Dephasierung in beiden Fällen ein Interferenzeffekt des exzitonischen Streukontinuums, das durch die biexzitonische Korrelation beschrieben wird. Dieser Effekt wird durch die Wechselwirkungsterme nicht wesentlich beeinflußt. Daher bleibt die Anstiegszeit in etwa gleich, sie scheint ein wenig kleiner zu sein.

Der Übersichtlichkeit halber wurde das zeitintegrierte Spektrum inklusive der Exziton–Exziton–Wechselwirkung in Abbildung 4.7 gegenüber demjenigen in zweiter Bornscher Näherung verschoben. Tatsächlich ist es etwa um einen Faktor 3,5 größer. Das belegt den Effekt der Umverteilung spektralen Gewichtes durch die Wechselwirkungsterme.

4.5.4 Frequenzspektren

Neben dem zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signal stellt das Frequenzspektrum des abgebeugten Signals eine aufschlußreiche Größe dar. Berechnete Spektren als Funktion der Verzögerung τ sind in Abbildung 4.8 zu sehen. Natürlich werden diese Spektren von den Resonanzen des untersten Schwer- und Leichtlochexzitons dominiert. Die Resonanz des Leichtloch–Exzitons hat, wie erwähnt, die kleinere Energie und liegt daher in Abbildung 4.8 vorne. Da die Signale und damit auch die Frequenzspektren mit der Verzögerung exponentiell abfallen, wurden sie hier normiert, und zwar auf das integrierte Frequenzspektrum, also anschaulich gesprochen auf die Fläche unterhalb der Kurve.

Um das Besondere dieser Spektren zu verstehen, muß man sich zunächst klar machen, was ohne die Vierteilchen–Korrelationen zu erwarten ist. Da das Dipolma-

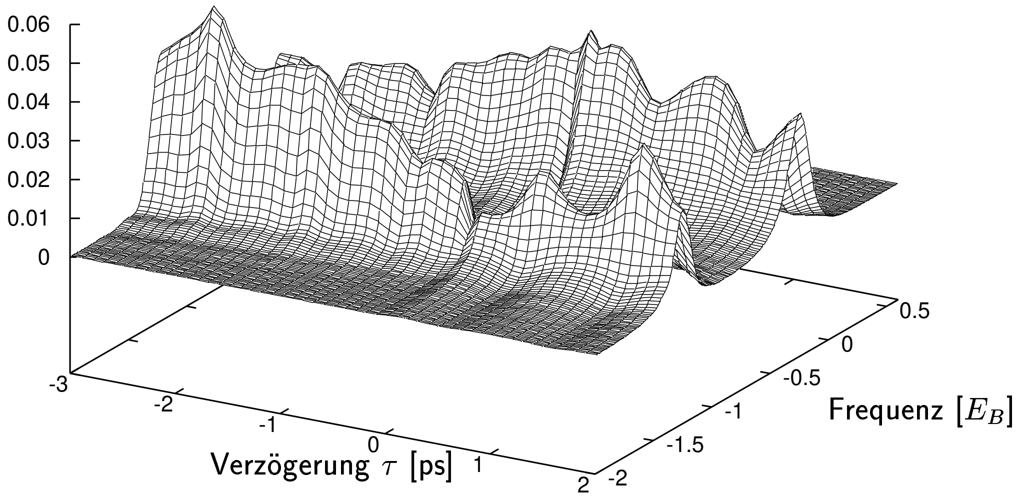


Abbildung 4.8: Normiertes Frequenzspektrum des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals als Funktion der Verzögerung τ. Die Frequenz ist in Einheiten von 3d–Schwerlochexziton–Bindungsenergien relativ zur Bandkante angegeben. Die vordere Resonanz ist die des Leichtloch–Exzitons, die hintere gehört zum Schwerloch–Exziton.

trixelement für den Leichtloch–Übergang um den Faktor $1/\sqrt{3}$ kleiner ist als das des Schwerloch–Übergangs, sollte dessen spektraler Beitrag auch kleiner sein, und zwar etwa um einen Faktor 9. Dies kann man sich wie folgt überlegen: Werden beide Übergänge spektral gleich stark angeregt, so wird die Übergangsamplitude des Leichtloches in linearer Ordnung um den Faktor $1/\sqrt{3}$ kleiner sein (vgl. (4.8)). Bei der Berechnung der makroskopischen Polarisation nach (4.1) erhält der Leichtlochbeitrag nochmals einen solchen Faktor, da mit dem Dipolmatrixelement $\mathbf{d}^{eh}$ multipliziert wird. Das Frequenzspektrum S_{SR} ist entsprechend (4.4) das Betragsquadrat des Fourierspektrums der Polarisation. Damit ergibt sich insgesamt ein Faktor von $(1/\sqrt{3})^4 = 1/9$.

Eine weitere Folgerung aus der Hartree–Fock–Theorie ist, daß das relative Gewicht nicht von der Verzögerung abhängen kann. Der Grund hierfür ist, daß sich die Beiträge des Schwerlochs und des Leichtlochs im Rahmen dieser Theorie nicht mischen können, da sie in unterschiedlichen Spinräumen auftreten. Eine Konsequenz hieraus ist auch, daß Schwebungen, die man in zeitaufgelösten oder zeitintegrierten Spektren beobachtet, lediglich *Polarisationsinterferenzen* sein können. Entsprechend (4.2) und (4.3) geht in diese Formeln das Betragsquadrat der makroskopischen Polarisation ein. Da die Beiträge des Schwerlochs und des Leichtlochs jeweils mit der entsprechenden Exziton–Energie oszillieren, erhält man in diesen Spektren Schwebungen mit der Differenzfrequenz. Im Frequenzspektrum kann man aber beide Beiträge getrennt erkennen. Treten auch hier Schwebungen auf, so bezeichnet man dies als *Quanteninterferenzen.*

Wie man in Abbildung 4.8 erkennt, ist das relative Gewicht der beiden Resonanzen nicht konstant, sondern hängt von der Verzögerung ab, bei der die Spektren berechnet wurden. Ferner ist bei bestimmten Verzögerungen der Anteil des Leichtloches sogar deutlich größer als der des Schwerloch–Übergangs. Diese Tatsache kann im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Gleichungen nicht erklärt werden, weil dort biexzitonische Korrelationen nicht berücksichtigt werden können. Der Effekt kann aber sofort verstanden werden, wenn man die Auswirkung der Vierteilchen–Korrelationen in den hier vorgestellten Rechnungen zugrunde legt: An den Schwerloch–Übergang h koppelt nicht nur die Vierteilchen–Korrelation B^{+hh}_{nm}, die keine Leichtloch–Anteile enthält, sondern auch die gemischten Korrelationen B^{+lh}_{nm} und B^{+hl}_{nm}, in die die Dynamik des Leichtloch–Überganges eingeht. Daher kann der Leichtloch–Übergang an spektralem Gewicht zunehmen und sogar die Oberhand gewinnen.

Gleichzeitig erklärt dies auch das Auftreten von Quantenschwebungen im Frequenzspektrum. Durch die biexzitonischen Korrelationen wird in beide Beiträge die jeweils andere Frequenz beigemischt. Dies führt zu den Oszillationen in Abhängigkeit von der Verzögerungszeit.

Die Frequenzspektren des Vierwellenmisch–Signals unter Berücksichtigung der Exziton–Exziton–Wechselwirkung zeigen gegenüber denen in zweiter Bornscher Näherung keine qualitativen Unterschiede. Wie in Abschnitt 4.5.4 diskutiert, treten auch hier Schwebungen der Exziton–Resonanzen in Abhängigkeit von der Verzögerung τ auf. Es treten keine neue Resonanzen auf. Diese könnte man erwarten, wenn die Polarisationen der beiden Pulse so gewählt würden, daß ein gebundener Biexzitonzustand möglich wird. Da hier aber nur das Streukontinuum in die Dynamik eingeht, kann sich lediglich das spektrale Gewicht von Schwer- und Leichtlochübergang verschieben.

4.5.5 Zeitaufgelöstes Vierwellen–Mischen

Nun sollen zeitaufgelöste Vierwellenmisch–Signale diskutiert werden. Abbildung 4.9 zeigt einige Spektren bei ausgewählten Verzögerungen τ. Ein zeitaufgelöstes Signal in der abgebeugten Richtung kann man natürlich erst dann erhalten, wenn beide Pulse eingetroffen sind. Der Zeitnullpunkt wurde in den Rechnungen so gewählt,

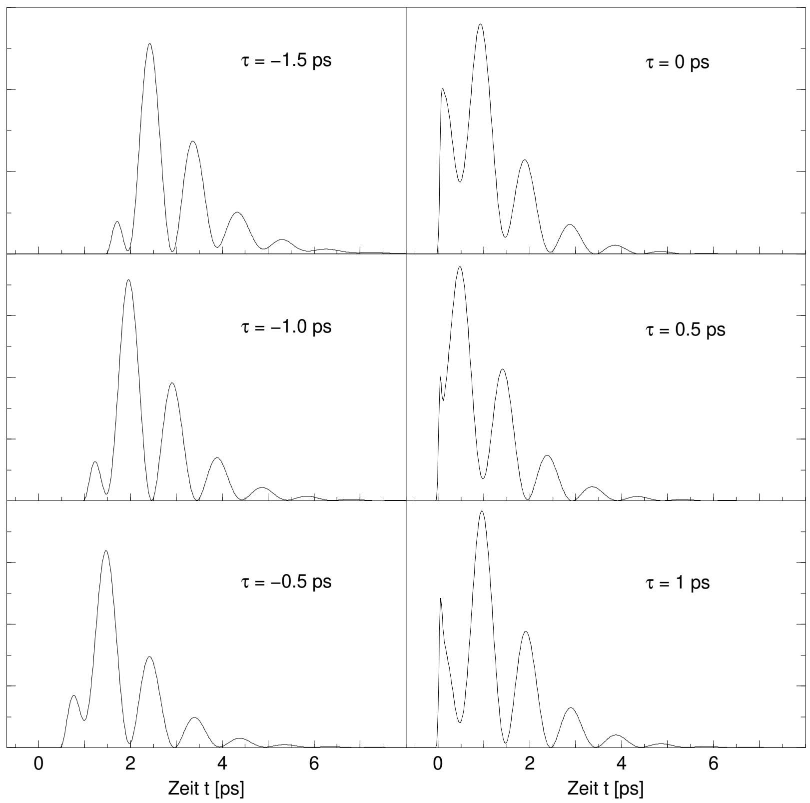


Abbildung 4.9: Berechnete zeitaufgelöste Spektren des Vierwellen–Mischexperimentes. Die Verzögerungszeiten τ sind in den jeweiligen Abbildungen angegeben. Die Einheiten auf der y-Achse sind willkürlich.

daß der $\mathbf{k}_1$-Puls stets bei $t = 0$ ps eintrifft. Erinnern wir uns jetzt an die Vorzeichenkonvention für die Verzögerung τ aus Abschnitt 4.4, derzufolge eine positive Verzögerung bedeutet, daß der $\mathbf{k}_2$-Puls vor dem $\mathbf{k}_1$-Puls eintrifft, so ist klar, daß für positive Verzögerungen das Signal stets bei $t = 0$ ps einsetzt. Bei negativen Verzögerungen setzt das Signal erst bei $t = -\tau$ ein, wie man in Abbildung 4.9 erkennt.

Die zeitaufgelösten Spektren sind hier linear aufgetragen. Bei allen Spektren sind ausgeprägte Oszillationen zu erkennen. Die Oszillationsfrequenz entspricht dem energetischen Abstand des Schwerlochs vom Leichtloch. Wie im vorigen Abschnitt erklärt, kann man in diesem Signal die Polarisationsinterferenz nicht von der Quanteninterferenz unterscheiden.

Es ist aber interessant zu beobachten, daß das zeitaufgelöste Signal sein Maximum nicht zu Beginn annimmt, sondern erst bei größeren Zeiten, in der Regel mit der zweiten Oszillation. Gäbe es keine biexzitonischen Korrelationen und auch nicht

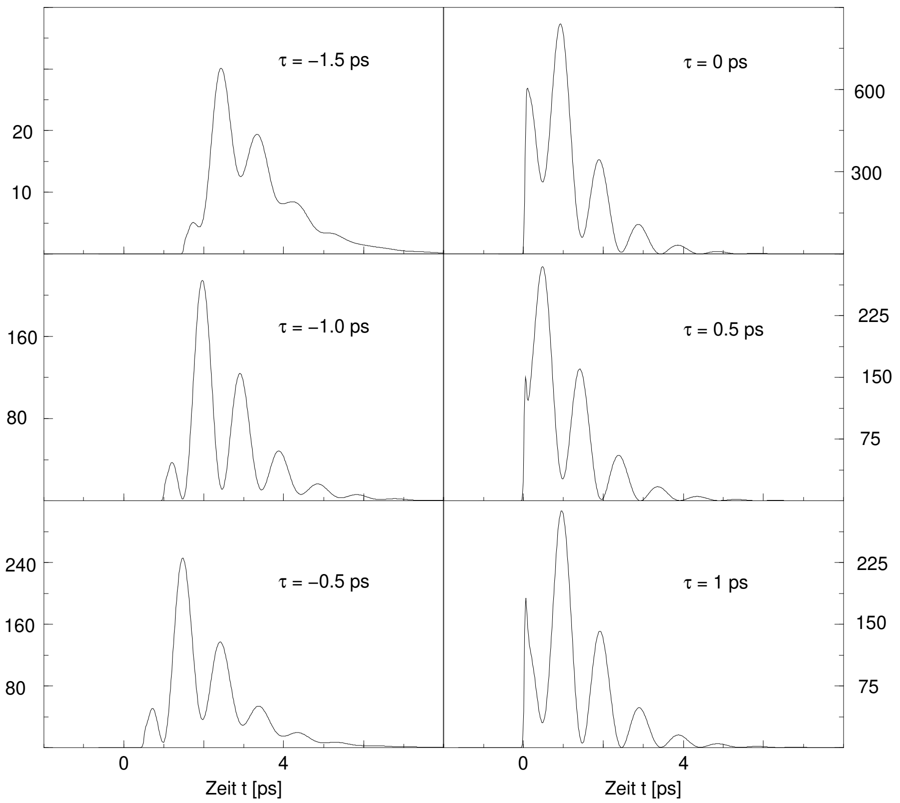


Abbildung 4.10: Berechnete zeitaufgelöste Spektren unter Einschluß der Exziton–Exziton–Wechselwirkung. Die zugehörigen Verzögerungszeiten sind angegeben.

die weiteren Beiträge in (4.8) aufgrund der Coulomb–Wechselwirkung, dann müßte das zeitaufgelöste Signal, abgesehen von Polarisationsinterferenzen, von Beginn an exponentiell zerfallen. Diese Situation wird als *freier Polarisationszerfall* bezeichnet.

Aufgrund der Coulomb–Wechselwirkung treten in der Dynamik der Übergangsamplitude weitere Quellterme auf, die die Übergangsamplitude treiben können. Dabei muß der Beitrag der biexzitonischen Korrelation als potentiell wichtigster Beitrag angesehen werden, da er selbst nur sehr schwach gedämpft und somit sehr langlebig ist. Allerdings muß sein Gewicht auch groß genug sein, so daß er gegenüber den Termen der Coulomb–Wechselwirkung aus der Hartree–Fock–Theorie dominiert. In jedem Fall erkennt man in den zeitaufgelösten Spektren, daß deutliche Wechselwirkungseffekte auftreten.

Dieser Effekt ist noch deutlicher bei negativen Verzögerungen. Dort wird das Maximum relativ zum Beginn des Signals noch später angenommen als bei positiven Verzögerungen. Hierin spiegelt sich der größere Einfluß der biexzitonischen Korrelation wieder. Wie schon bei den zeitintegrierten Signalen in Abschnitt 4.5.2

diskutiert wurde, wird die Dynamik bei positiven Verzögerungen durch die Hartree–Fock–Beiträge bestimmt, bei negativen Verzögerungen überwiegt der Beitrag der biexzitonischen Korrelation.

Auch für die zeitaufgelösten Spektren sind durch die vollständige Berücksichtigung der Exziton–Exziton–Wechselwirkung in Abbildung 4.10 keine qualitativen Veränderungen in zweiter Bornscher Näherung zu erkennen. Aufgrund des verstärkten Wechselwirkungseffektes der biexzitonischen Korrelationen können sich Effekte wie die Verschiebung des Maximums des Spektrums verstärken. Die absoluten Werte des zeitaufgelösten Spektrums liegen insbesondere bei kleinen Verzögerungen deutlich über denjenigen, die in zweiter Bornscher Näherung erhalten werden. Dies kann man auch aus dem zeitintegrierten Signal schließen, denn dieses zeigte ja insbesondere für kleine negative Verzögerungen eine deutliche Erhöhung im Vergleich zur zweiten Bornschen Näherung.

Insgesamt konnte in diesem Kapitel die Bedeutung der biexzitonischen Korrelation für das grundlegende Verständnis nichtlinearer optischer Experimente belegt werden. Das Vierwellenmischen hat sich als ein sensitives Experiment für die Untersuchung von Korrelationseffekten erwiesen, die durch die Coulomb–Wechselwirkung der Teilchen induziert werden. Es konnte gezeigt werden, daß eine Hartree–Fock–Theorie, die Vierteilchen–Korrelationen vernachlässigt, nicht in der Lage ist, qualitative Merkmale der Experimente zu erklären. Erst die Berücksichtigung der biexzitonischen Korrelation läßt auch eine quantitative Beschreibung zu. Dazu wurde gezeigt, daß die beschriebene Entwicklung der biexzitonischen Korrelationsfunktion eine systematische numerische Behandlung von Korrelations–Effekten ermöglicht.

Kapitel 5

Elektronischer Transport in Halbleiter–Heterostrukturen

Bei der Beschreibung von Transportphänomenen in Halbleitern werden üblicherweise zwei Theorien benutzt: Landauer–Büttiker–Theorie [69, 21] und die Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen [55, 54, 102].

Die von Landauer und Büttiker entwickelte Theorie basiert auf der Annahme, daß ein dissipationsfreies System an verschiedene Reservoirs ankoppelt. Das System wird mit *Transportkoeffizienten* beschrieben, die sich aus der Lösung der Einteilchen–Schrödinger–Gleichung ergeben. Während diese Theorie erfolgreich Phänomene wie Leitfähigkeitsfluktuationen oder die Quantisierung der Leitfähigkeit erklären konnte [114, 113], ist es prinzipiell unmöglich, dissipative Prozesse einzubeziehen. Auch eine realistische Modellierung der Kontakte des Systems ist schwierig.

Die andere Vorgehensweise basiert auf der Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen, wie sie in Kapitel 2 vorgestellt wurde. Transportprozesse stellen im Rahmen der in 2 beschriebenen Theorie den Grenzfall dar, daß Effekte, bei denen die Coulomb–Wechselwirkung in beliebiger Ordnung benötigt wird, wie z. B. gebundene Zustände oder Vielteilchen–Korrelationen eine untergeordnete Rolle spielen. In der Regel handelt es sich um Elektronen, die sich hoch im Leitungsband bewegen. Diese verlieren in einer im Vergleich zur relevanten Zeitskala kurzen Zeit ihre Erinnerung an den Anregungsprozeß. Die Dynamik wird folglich durch inkohärente Prozesse bestimmt. Aus diesem Grund ist häufig die Approximation der Einteilchen–Selbstenergie (2.36) in einfachsten Näherungen sinnvoll.

Da die Greens–Funktions–Theorie eine mikroskopische Theorie ist, lassen sich im Gegensatz zur Landauer–Büttiker–Theorie Dephasierungsprozesse detailliert behandeln. Die grundsätzlichen Gleichungen gehen wieder auf die von Kadanoff, Baym [54] und Keldysh [55] abgeleiteten Gleichungen zurück und wurden auf verschiedene

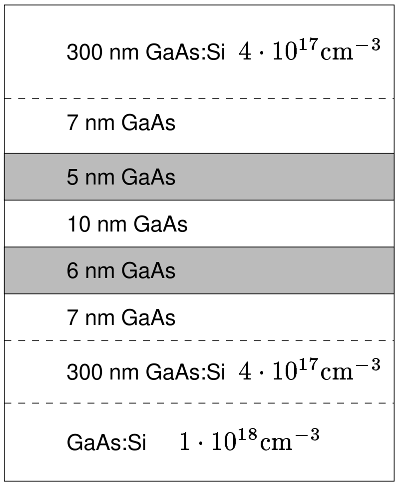


Abbildung 5.1: Schichtstruktur eines Quantentopfes aus [103]

Wechselwirkungen in verschiedenen Systeme übertragen [20]. Allerdings werden wegen des enormen Rechenaufwandes meistens die Elektron–Phonon–Wechselwirkung sowie die Coulomb–Wechselwirkung vollständig vernachlässigt [34] oder in einer stark vereinfachten Weise behandelt. Die Streuung mit LO–Phononen wird beispielsweise durch eine Kontaktwechselwirkung beschrieben [25, 67] oder es werden unrealistische Annahmen z. B. für die Elektronen–Verteilung gemacht [35]. In diesem Teil der Arbeit werden wir eine schnell konvergierende Entwicklung für die Verteilungsfunktion vorstellen, die den Rechenaufwand für eine realistische Beschreibung der Elektron–Phonon–Wechselwirkung drastisch verringert.

5.1 Motivation und Experiment

Durch das Schichten von Halbleitern mit verschiedenen Bandlücken können Strukturen erzeugt werden, die die Bewegungsfreiheit der Elektronen so stark einschränken, daß Quantisierungseffekte wesentlich werden. Die einfachste Möglichkeit besteht darin, verschiedene Halbleiter aufeinander zu wachsen und so eine Schichtstruktur zu erzeugen, die die Bewegung der Elektronen entlang der Wachstumsrichtung behindert. Eine typische Struktur dieser Art stellt die Tunneldiode dar [116, 22], die in Abbildung 5.1 skizziert ist. Dabei befindet sich eine Schicht mit niedriger Bandlücke, der sogenannte Quantentrog, zwischen zwei dünnen Schichten mit größerer Bandlücke, den sogenannten Barrieren. Der Sprung in der Bandlücke wirkt für Elektronen und Löcher wie eine Potentialbarriere und hindert sie daran, den Topf schnell zu verlassen. Vielmehr tunneln sie durch die Barrieren, was umso wahrscheinlicher ist, je niedriger und schmäler die Barrieren sind. Außerhalb der Barrieren befinden sich die sogenannten Pufferschichten. Quantentröge haben typischerweise eine Dicke von einigen 10 nm. Diese Länge ist so klein, daß die Quantisierung der kinetischen Energie in der Wachstumsrichtung in den Bereich von meV kommt und meßbar wird.

Schränkt man auch die Bewegung in eine weitere Raumrichtung ein, so erhält man sogenannte *Quantendrähte*, bei denen sich die Elektronen nur noch in einer Richtung frei bewegen können. Wird auch diese Richtung eingeschränkt, so erhält man die *Quantenpunkte*. Diese können als *„künstliche Atome“* bezeichnet werden, denn das Energiespektrum ist vollständig quantisiert [128].

Man kann nun versuchen, die Energiezustände durch optische Experimente zu untersuchen. Da es sich aber um Systeme innerhalb eines Halbleiters handelt, besteht auch die Möglichkeit, die Zustände durch Elektronentransport durch die Struktur zu detektieren. Dabei dienen zwei Elektronenreservoire, die man an die Struktur koppelt als Sonde. Variiert man die Spannung entlang der Struktur, dann lassen sich die Energieniveaus in den Strukturen detektieren.

Um dies plausibel zu machen, kehren wir zur Tunneldiode zurück. Innerhalb des Quantentroges sind nur bestimmte Energiezustände möglich. Da er aus einem intrinsischen Halbleiter besteht, befinden sich im Gleichgewicht, d. h. ohne angelegte Spannung, dort keine Ladungsträger. Legt man nun eine Spannung an, so werden Ladungsträger in die Struktur injiziert. Sie tunneln durch die beiden Barrieren und gelangen in das andere Reservoir. Daher bezeichnet man den Strom auch als *Tunnelstrom*. Anschaulich ist klar, daß der Tunnelprozeß dann schnell abläuft, wenn die Energie der injizierten Elektronen mit einem Energiezustand im Quantentrog resonant ist. Erhöht man die Spannung noch weiter, so sinkt die Tunnelwahrscheinlichkeit zunächst wieder, bis das man in die Nähe eines weiteren Zustandes kommt. Die Kennlinie eines solchen Bauelementes zeigt also bei den Energien des Quantentroges lokale Maxima. Abbildung 5.2 zeigt ein typisches Experiment. Die unterste Kennlinie bezieht sich dabei auf eine einfache Tunneldiode. Sie zeigt zwei Maxima, die zwei Zuständen im Topf entspricht.

Die weiteren Kurven in Abbildung 5.2 zeigen Dioden mit mehreren gekoppelten Töpfen. Mit jedem hinzukommenden Quantentopf spalten die beiden Resonanzen auf, wie man aus der elementaren Quantenmechanik weiß. Bei zwei Töpfen können die Grundzustandsfunktionen der beiden Töpfe symmetrisch oder antisymmetrisch gekoppelt werden, mit zwei leicht verschiedenen Energien. Die Aufspaltung hängt dabei von der Kopplung der beiden Töpfe ab.

Durch verschiedene Streuprozesse sind solche Resonanzen in der Kennlinie aber verbreitert und verschoben. Außerdem beeinflussen sie den Wert des Minimums, das nach der Resonanz angenommen wird. Ziel der theoretischen Beschreibung ist es, ein quantitatives Verständnis hierfür zu entwickeln.

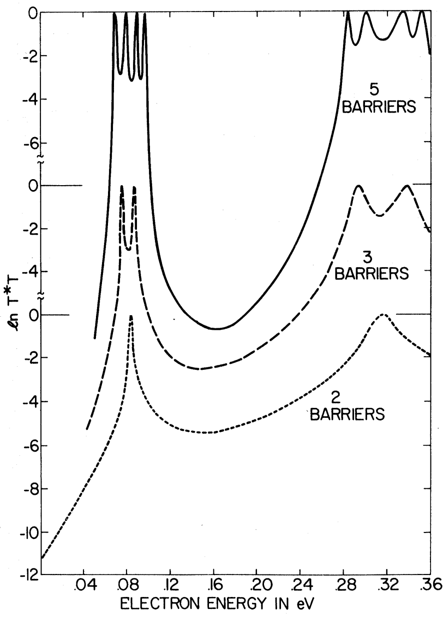


Abbildung 5.2: Experimentell bestimmte Kennlinien verschiedener Tunneldioden aus [116]. Die Stromstärken sind logarithmisch aufgetragen. Verglichen werden Dioden mit einem, zwei oder vier gleichen Quantentöpfen.

Tunnelsysteme dieser Art gehören zu den bestuntersuchten mesoskopischen Halbleitersystemen, auf die die gesamte Bandbreite theoretischer Methoden von Transfermatrix–Methoden bis hin zu Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen angewendet wurde. Die große Streuung der Resultate hängt von den verwendeten Methoden und der numerischen Implementation ab. Deshalb soll in dieser Arbeit der Stand der Kunst kritisch untersucht werden und eine entsprechende systematische numerische Studie des Modellsystems vorgestellt werden.

5.2 Weyl–Transformation und Gradienten–Entwicklung

Da wir Transportphänomene auf der Grundlage der Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen beschreiben wollen, machen wir uns zunächst klar, wie man aus den im Kapitel 2 definierten Greenschen Funktionen (2.11) und (2.13) bis (2.15) die makroskopisch relevanten Größen wie Stromdichte oder Ladungsdichte erhalten kann. Im folgenden werden wir uns an die Vorzeichenkonvention aus (2.25) bis (2.28) halten, da diese in der Transporttheorie die gebräuchlichere ist.

Die Ladungsdichte $n(\mathbf{r},t)$ der Elektronen ergibt sich als der Erwartungswert des Teilchenzahl–Operators:

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r},t) &= -e\langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\,\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\rangle \\ &= -ie\hbar\, G^{+-}(\mathbf{r},t;\mathbf{r},t)\ . \end{aligned} \tag{5.1}$$

Die Stromdichte erhält man aus den Feldoperatoren wie folgt:

$$\begin{aligned} j(\mathbf{r},t) &= \frac{-ie\hbar}{2m}\,\langle(\nabla\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t))\hat{\psi}(\mathbf{r},t) - \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)(\nabla\hat{\psi}(\mathbf{r},t))\rangle \\ &= \frac{-ie\hbar}{2m}\lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}}\langle(\nabla'-\nabla)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}',t)\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\rangle \\ &= \frac{-e\hbar^2}{2m}\lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}}(\nabla-\nabla')\,G^{+-}(\mathbf{r}',t;\mathbf{r},t)\ . \end{aligned} \tag{5.2}$$

Statt Zweipunkt–Funktionen zu betrachten, kann man natürlich auch die Fouriertransformierten bezüglich der Relativkoordinaten betrachten und deren Dynamik studieren. Eine solche Funktion

$$G(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T) = \int\frac{d^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{(2\pi)^3}\int\frac{d(t-t')}{2\pi}\,e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\,e^{i\omega(t-t')}\,G^<(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') \tag{5.3}$$

wird als verallgemeinerte *Wigner–Funktion* bezeichnet [126]. Die Transformation ist als *Weyl–Transformation* bekannt [125]. Die Schwerpunktskoordinaten sind dabei definiert als

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}+\mathbf{r}')\,, \\ T &= \frac{1}{2}(t+t')\,. \end{aligned} \tag{5.4}$$

Die Bedeutung der Wigner–Funktion liegt darin, daß das *Weyl–Postulat der Quantenmechanik* besagt, daß diese Funktion einer klassischen Verteilungsfunktion im Raum der Impulse, Energien und Orte entspricht. Dieses Postulat wird plausibel, wenn man sich die Beziehungen (5.1) und (5.2) für die Wigner–Funktion anschaut:

$$n(\mathbf{R},T) = -ie\hbar\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int\frac{d\omega}{2\pi}\,G^{+-}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T)\ , \tag{5.5}$$

$$j(\mathbf{R},T) = -ie\hbar\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int\frac{d\omega}{2\pi}\,\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\,G^{+-}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T)\ . \tag{5.6}$$

Offenbar verhält sich $G^<(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T)$ gerade wie eine klassische Verteilungsfunktion.

Nun soll zunächst die Bewegungsgleichung der Wigner–Funktion abgeleitet werden. Dazu geht man von der Bewegungsgleichung für die ursprüngliche Funktion (2.37) sowie derjenigen mit Bezug auf die zweite Zeitvariable aus:

$$\begin{aligned}\Big[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - h(1) - \phi_{\text{ext}}(1)\Big] G^{+-}(12) \\ - \int d3\, \Big[\Sigma^{++}(13)\, G^{+-}(32) + \Sigma^{+-}(13)\, G^{--}(32)\Big] = 0 \qquad (5.7)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Big[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - h(2) - \phi_{\text{ext}}(2)\Big] G^{+-}(12) \\ - \int d3\, \Big[G^{++}(13)\, \Sigma^{+-}(32) + G^{+-}(13)\, \Sigma^{--}(32)\Big] = 0\,. \qquad (5.8)\end{aligned}$$

Durch Subtraktion der beiden Gleichungen erhält man die Bewegungsgleichung in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten. Bezüglich der Relativkoordinaten muß in der Bewegungsgleichung anschließend eine Fouriertransformation durchgeführt werden. Es ist klar, daß beim Übergang zu Schwerpunkts- und Relativkoordinaten Integrale, wie sie die Einbeziehung der Selbstenergien nötig macht, Probleme bereiten.

$$I(q,X) = \int dx\, e^{-iqx} \int dx_3\, \Sigma(x_1 - x_3, \frac{x_1+x_3}{2})\, G(x_3 - x_2, \frac{x_2+x_3}{2}) \qquad (5.9)$$

Hier sind die Orts- und Zeitkoordinaten in der Variabeln $x = (\mathbf{r}, t)$ zusammengefaßt. $x = x_1 - x_2$ ist die externe Relativkoordinate, $X = (x_1 + x_2)/2$ die zugehörige Schwerpunktskoordinate. Die konjugierte Variable im Fourierraum q ist zu lesen als $q = (\mathbf{k}, -\omega)$. Führt man anstelle von x_3 die Variable $y = x_1 - x_3$ ein und ersetzt x durch $z = x - y$, so erhält man:

$$I(q,X) = \int dz \int dy\, e^{-iq(z+y)} \Sigma(y, X + \frac{z}{2})\, G(z, X - \frac{y}{2})\ . \qquad (5.10)$$

An dieser Stelle macht man die Annahme, daß die Selbstenergie und die Greensche Funktion in der Schwerpunktskoordinate nur schwach veränderlich sind, d. h. daß diese makroskopische Skalen sind, während die Relativkoordinaten sich auf einer kleinen Skala ändern. Unter diesen Annahmen kann man die beiden Funktionen in den Schwerpunktskoordinaten entwickeln. Diese Entwicklung wird als *Gradienten–Entwicklung* bezeichnet. Formal läßt sich eine solche Entwicklung, die Lokalität in allen Variabeln der kinetischen Gleichungen erzwingt, sogar bis zur unendlichen Ordnung aufsummieren [54, 81]. Dies wird in Anhang F gezeigt.

Für die folgenden Rechnungen werden wir nur die niedrigste Stufe der Entwicklung betrachten, was der vollständigen Vernachlässigung aller mikroskopischen Variabeln gegenüber makroskopischen Variabeln entspricht. In diesem Falle gehen die Integrale im Fourierraum also einfach in Produkte aus Selbstenergie und Greenscher Funktion über.

Für das zeitabhängige externe Potential $\phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}T)$ nehmen wir im selben Sinne wie bei der Gradientenentwicklung an, daß die Zeit sich nur auf einer langsamen Zeitskala verändert und anstelle von $T \pm t/2$ das Zeitargument T ausreichend ist. Damit erhält man schließlich:

$$\begin{aligned}&\Big[i\hbar\frac{\partial}{\partial T} + i\hbar\,\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\,\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}\Big]\,G^{+-}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T) \\ &\quad + i\hbar\,\frac{1}{\hbar}\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,G^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{R};\omega,T)\,\Big[U(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R}) + U_{\text{ext}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R})\,g(T)\Big] \\ &= G^{+-}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T)\,\Sigma^{-+}_{\text{LO}}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T) - G^{-+}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T)\,\Sigma^{+-}_{\text{LO}}(\mathbf{k},\mathbf{R};\omega,T)\ .\end{aligned} \tag{5.11}$$

Es wurde ferner angenommen, daß das externe Potential sich faktorisieren läßt gemäß

$$\phi_{\text{ext}}(\mathbf{R}T) = U_{\text{ext}}(\mathbf{R})\,g(T)\,, \tag{5.12}$$

wobei $g(T)$ normalerweise den Einschaltvorgang des Potentials beschreibt. Die Fouriertransformierten der beiden Potentiale sind gegeben durch

$$U(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R}) = \int d^3r\,\sin\big[(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}\big]\Big[U(\mathbf{R}+\frac{\mathbf{r}}{2}) - U(\mathbf{R}-\frac{\mathbf{r}}{2})\Big]\,. \tag{5.13}$$

In der Bewegungsgleichung (5.11) ist die Elektronmasse m als Effektivmasse zu interpretieren und das Potential $U(\mathbf{R})$ enthält folglich nicht mehr das Potential der Ionenrümpfe, sondern nur noch Strukturen wie Störstellen oder Barrierenstrukturen, die durch das Wachsen verschiedener Halbleiterschichten entstanden sind.

Wesentliche Merkmale der Strom–Spannungs–Kennlinie erhält man bereits, wenn man Selbstenergiebeiträge völlig vernachlässigt und ausschließlich das externe Potential U_{ext} und die Barrierenstruktur U in die Rechnung einbezieht. Zum Verständnis der weiteren Rechnungen ist es außerdem hilfreich, sich zunächst mit grundsätzlichen Problemen bei der numerischen Implementation vertraut zu machen. Aus diesen Gründen wird zunächst die Berechnung des einfachsten Modellsystems vorgestellt.

5.3 Das elementare Modell

Das einfachste Modell einer resonanten Tunneldiode zieht keinerlei Selbstkonsistenzbedingungen in Betracht und vernachlässigt auch alle Selbstenergie–Effekte. Ferner wird angenommen, daß das System in den Ebenen senkrecht zur Schichtstruktur homogen ist. Dann hängen die Potentiale nur von der z-Komponente im Ortsraum ab. Das hat zur Folge, daß die Fouriertransformierten der Potentiale ebenfalls nur von dieser Richtung abhängen und in der k_x- und k_y-Komponente δ-förmig sind. Wie man aus Gleichung (5.11) erkennt, kann unter diesen Annahmen die Greensche Funktion über k_x und k_y integriert werden. Auch die Frequenzabhängigkeit läßt sich abintegrieren, denn das Potential hängt ja nicht von der Frequenz ab. Die in Kapitel 2.5 eingeführte Quasiteilchennäherung braucht also nicht explizit gemacht zu werden; es wird lediglich benötigt, daß das Frequenzintegral existiert. Wir wollen uns bei der Notation der abintegrierten Größe an die dortige Namensgebung halten. Man erhält eine Bewegungsgleichung für die Verteilungsfunktion $f(k_z, z, T)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T}\, f(k_z, z, T) \quad &= \quad -\frac{\hbar k_z}{m}\, \frac{\partial}{\partial z}\, f(k_z, z, T) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int \frac{dk_z'}{2\pi}\, f_m(k_z, z, T) \left[U(k_z - k_z', z) \; + U_{\mathrm{ext}}(k_z - k_z', z)\, g(T) \right]. \end{aligned} \tag{5.14}$$

Diese Bewegungsgleichung ist nun für die Tunneldiode zu lösen. Da sie eine Ortsableitung enthält, ist es notwendig, Randbedingungen an das System zu stellen, die durch den physikalischen Hintergrund gerechtfertigt sein müssen.

5.3.1 Randbedingungen und Diskretisierung

Die Bewegungsgleichung der elektronischen Dynamik ist eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Ortskoordinate z. Aus diesem Grund muß mathematisch gesehen für jeden Zeitpunkt die Funktion für einen Ortspunkt festgelegt werden, damit sie eindeutig ist. Aus physikalischer Sicht handelt es sich um die Randbedingungen des Systems. An den Enden der Tunneldiode befinden sich Metallkontakte, mit denen sie an die externe Spannungsquelle angeschlossen ist. Aus praktischen Gründen kann man in den Rechnungen das Betrachtungsgebiet meist nicht so groß wählen, sondern beschränkt sich auf einen hinreichend großen Bereich um die Barrierenstruktur.

In jedem Fall koppelt die Tunneldiode an ihren beiden Rändern an Teilchenreservoire. Die physikalische Annahme ist nun, daß diese Reservoire beliebig groß sind, so daß die Dynamik des betrachteten Systems die Reservoire selbst nicht beeinflußt. Es besteht also keine Rückwirkung des Systems auf die Reservoire durch Teilchen, die vom System in die Reservoire eintreten. Diese sollen sich ihrerseits stets im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Das bedeutet, daß die Verteilungsfunktion innerhalb der Reservoire stets eine Fermi–Verteilung sein muß.

Beim Übergang der Elektronen von der Diode in den Metallkontakt treten schnelle Phonon–Streuprozesse auf, die die eintretenden Elektronen effektiv auf die Temperatur des Reservoirs abkühlen. Wegen der hohen Elektronendichte im Metall spielt dort außerdem die Coulomb–Streuung eine wesentliche Rolle. Aber auch innerhalb der Dotierungsbereiche der Diode ist die Elektronendichte noch so hoch, daß hier Coulomb–Streuung wichtig ist. Daher ist anzunehmen, daß die Verteilung hinreichend weit von der Struktur entfernt bereits zu einer Fermiverteilung relaxiert. In der Nähe der Struktur ist diese Annahme nicht gerechtfertigt.

Es ist daher sinnvoll, die Randbedingung so zu wählen, daß die Verteilungsfunktion bei $z = 0$ und $z = L$, den Rändern des Betrachtungsgebietes, eine Fermiverteilung sein soll.

Für eine Differentialgleichung erster Ordnung kann man aber nur *eine* Randbedingung vorgeben. Dieses Problem wird dadurch gelöst, daß man sich die Gesamtverteilung als gekoppeltes System von Verteilungen bei jeweils einem bestimmten longitudinalen Impuls k_z vorstellt [34, 36, 59]. Jede dieser Verteilungen beschreibt Elektronen, die sich je nach Vorzeichen des Impulses entweder nach rechts oder nach links durch die Diode bewegen. Für die Subverteilungen, die zu positiven Impulsen, also nach rechts laufenden Elektronen, gehören, wird der linke Randwert vorgegeben. Entsprechend gibt man für die andere Gruppe von Elektronen den rechten Randwert vor.

Diese Vorstellung wird auch von der physikalischen Anschauung getragen. Diejenigen Elektronen, die in das Bauelement eintreten, stammen aus einem Reservoir im thermischen Gleichgewicht. Daher ist ihr Impuls bekannt. Für diejenigen Elektronen, die vom Bauelement in das Reservoir übergehen, braucht man aber keine Randbedingung zu fordern. Ihre Verteilung ist Ergebnis der berechneten Dynamik und sie treten in das Reservoir wie in einen idealen Absorber ein, ohne dessen Eigenschaften zu verändern.

Allerdings muß man erwarten, daß diese Verteilung im stationären Zustand aufgrund der Bedingung detaillierten Gleichgewichts [13, 24] wiederum eine Fermi–Verteilung ist. Für die in das Reservoir eintretenden Elektronen ist dies aber keine Randbedingung, sondern die Bestätigung, daß sich das System wieder im stationären Zustand befindet. Auf das Problem, daß die Randverteilung auch bei einer externen Spannung eine Fermiverteilung sein muß, wird in Abschnitt 5.6.1 noch näher eingegangen.

Wenn bisher stets verlangt wurde, daß die Verteilungsfunktion am Rand eine Fermiverteilung ist, dann ist mit dieser Fermiverteilung die über k_x und k_y gemittelte Verteilung gemeint, denn die Bewegungsgleichung (5.14) war ja bereits durch Integration von (5.11) über diese Koordinaten hervorgegangen. Dieses Integral läßt sich explizit ausführen:

$$\begin{aligned} f_{\mathrm{F}}(k_z) &= \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\, f_{\mathrm{F}}(\mathbf{k}) \\ &= \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\, 2 \left[\exp\left(\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T} \Big(\frac{\hbar^2(k^2+k_z^2)}{2m} - \mu \Big) \right) + 1 \right]^{-1} \\ &= \frac{1}{\lambda^2}\,\frac{1}{2\pi}\ln(1+e^{-l^2k_z^2+\beta\mu})\,, \end{aligned} \tag{5.15}$$

λ ist die thermische Länge

$$\lambda = \left(\frac{\beta\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} . \tag{5.16}$$

Der Faktor 2 im Integranden der zweiten Zeile berücksichtigt die Spinentartung.

Um die Bewegungsgleichung (5.14) numerisch lösen zu können, müssen die Koordinaten k_z und z diskretisiert werden. Dazu wählen wir ein äquidistantes Gitter mit Schrittweiten Δk und Δz.

Diskretisiert man die Ortskoordinaten, so geht der Differentialquotient $\partial_z f(k_z, z, T)$ in einen Differenzenquotient über. Hierbei gibt es linear in Δz zwei mögliche Quotienten, nämlich

$$\frac{\partial}{\partial z} f(k_z, z, T) \;\rightarrow\; \frac{1}{\Delta z}\big[f(k_i, z_j, T) - f(k_i, z_{j-1}, T)\big] \tag{5.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} f(k_z, z, T) \;\rightarrow\; \frac{1}{\Delta z}\big[f(k_i, z_{j+1}, T) - f(k_i, z_j, T)\big]\,. \tag{5.18}$$

Das Problem läßt sich natürlich innerhalb der Struktur durch die Wahl einer symmetrischen Diskretisierung vermeiden. Auf dem Rand aber führt die Diskretisierung stets zu Problemen [34, 51]. Hier entscheidet man sich im selben Sinne, wie bei den Randbedingungen für die Unterscheidung zwischen Elektronen, die in das betrachtete Gebiet eintreten, und solchen, die austreten. Das bedeutet, daß für nach rechts laufende Elektronen mit $k_z > 0$ die Diskretisierung (5.18) gewählt wird, für Elektronen, die mit $k_z < 0$ nach links laufen, wird (5.17) benutzt. Der Einfluß von Differenzenquotienten höherer Ordnung wurde z. B. in [51] untersucht. Auch hier muß diese Unterscheidung getroffen werden. Andere Diskretisierungen des Differentialoperators werden in dieser Arbeit jedoch nicht untersucht.

Eine weitere Bedingung für die Wahl der Stützstellen ergibt sich aus der Kontinuitätsgleichung. Diese läßt sich aus der Bewegungsgleichung (5.14) ableiten, indem man über die Impulskoordinaten integriert.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T}\int dk_z\, f(k_z, z, T) + \frac{\partial}{\partial z}\int dk_z\, \frac{\hbar k_z}{m}\, f(k_z, z, T) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial T}\, n(z, T) + \frac{\partial}{\partial z}\, j(z, T) &= 0 \end{aligned} \tag{5.19}$$

Die Elektronendichte n und die Stromdichte j sind entsprechend (5.5) und (5.6) definiert durch:

$$\begin{aligned} n(z,T) &= -e\int\frac{dk_z}{2\pi}\, f(k_z,z,T)\ , \\ j(z,T) &= -e\int\frac{dk_z}{2\pi}\,\frac{\hbar k_z}{m}\, f(k_z,z,T)\ . \end{aligned} \tag{5.20}$$

Die Potentialstreuung in der Bewegungsgleichung (5.14) mittelt sich bei Integration über k_z nämlich gerade heraus:

$$\begin{aligned} \int dk_z\, U(k_z-k_z',z) &= \frac{1}{i}\int dk_z\int d\bar{z}\, e^{i\bar{z}(k_z-k_z')}\big[U(z+\frac{\bar{z}}{2})-U(z-\frac{\bar{z}}{2})\big] \\ &= 0\,, \end{aligned} \tag{5.21}$$

wobei die Definition der fouriertransformierten Potentiale (5.13) benutzt wurde. Die Kontinuitätsgleichung muß natürlich auch bei diskreten Variabeln erfüllt sein und sollte sich deshalb aus der Bewegungsgleichung herleiten lassen.

Für die Ladungsdichte bereitet die Diskretisierung keine Probleme:

$$n(z_i,T) = \frac{\Delta k}{2\pi}\sum_{k_l} f(k_l,z_i,T)\ . \tag{5.22}$$

In der diskretisierten Form sollten Vektorgrößen wie die Stromdichte oder auch das elektrische Feld — so man es berechnen will — eher mit den Intervallen zwischen den Gitterpunkten verknüpft werden als mit den Gitterpunkten selbst [36, 107]. Daher sollte man die diskrete Form der Kontinuitätsgleichung (5.19) in der symmetrischen Form

$$\frac{\partial}{\partial T}\, n(z_i,T) + \frac{1}{\Delta z}\Big[j(z_i+\frac{\Delta z}{2},T) - j(z_i-\frac{\Delta z}{2},T)\Big] = 0 \tag{5.23}$$

schreiben. Dann ist die diskrete Stromdichte definiert durch:

$$j(z_i+\frac{\Delta z}{2},T) = \frac{\Delta k}{2\pi}\Big[\sum_{k_l<0}\frac{\hbar(k_z+k_{\mathrm{D}})}{m} f(k_l,z_i+\Delta z,T) + \sum_{k_l>0}\frac{\hbar(k_z+k_{\mathrm{D}})}{m} f(k_l,z_i,T)\Big]\ . \tag{5.24}$$

Mit diesen Definitionen erhält man eine konsistente Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung.

Damit diese auch numerisch erfüllt ist, muß gewährleistet sein, daß sich die diskretisierten Streuterme bei Summation über k_z herausheben. Das bedeutet, Gleichung

(5.21) muß auch auf dem Gitter erfüllt sein. Nehmen wir an, daß die Gitterpunkte gegeben sind durch:

$$k_l = k_0 + l\Delta k \quad \text{für } l = 1, \ldots, L \tag{5.25}$$

$$\bar{z}_n = n\Delta\bar{z} \quad \text{für } n = n_1, \ldots, n_1 + N - 1 \tag{5.26}$$

Dabei kann das Netz, auf dem die Relativkoordinate x ausgewertet wird, durchaus verschieden sein von dem Netz für die Schwerpunktskoordinate z. Gleichung (5.21) hat diskretisiert die folgende Form:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\Delta k}{2\pi}\sum_{l=1}^{L}\Delta\bar{z}\sum_{n=n_1}^{n_1+N-1}\Big[U(z+n\frac{\Delta\bar{z}}{2}) - U(z-n\frac{\Delta\bar{z}}{2})\Big]e^{i\Delta\bar{z}\Delta k(l-l')n} \\ &= \frac{\Delta k\Delta\bar{z}}{2\pi}\sum_{n=n_1}^{n_1+N-1}\Big[U(z+n\frac{\Delta\bar{z}}{2}) - U(z-n\frac{\Delta\bar{z}}{2})\Big]e^{-i\Delta\bar{z}\Delta kl'n}\sum_{l=1}^{L}e^{i\Delta\bar{z}\Delta kln}\,. \end{aligned} \tag{5.27}$$

Diese Bedingung läßt sich nur dann erfüllen, wenn für $\Delta\bar{z}$ und Δk gilt:

$$\Delta\bar{z}\Delta k = j\frac{2\pi}{L} \text{ mit } j \in \mathrm{N}\,. \tag{5.28}$$

Damit können diese beiden Schrittweiten nicht unabhängig voneinander gewählt werden. Bei ihrer Wahl ist einerseits zu berücksichtigen, daß $\Delta\bar{z}$ klein genug ist, so daß die Barrierenstruktur aufgelöst werden kann. Andererseits darf man auch Δk nicht zu groß wählen, damit die Verteilungsfunktion aufgelöst werden kann. Δk muß also klein gegen die Breite der Verteilung sein.

In einigen Arbeiten werden $\bar{z}$ und z auf demselben Gitter ausgewertet [34, 36]. Dann muß man $\Delta\bar{z} = 2\Delta z$ wählen, damit das Potential immer auf dem gleichen Netz ausgewertet wird. Damit aber hat man dann wegen (5.28) eine Beziehung zwischen der Impulsauflösung und der Ortsauflösung erzwungen, die nicht notwendig ist. Es ist ja möglich, Schwerpunkts- und Relativkoordinaten mit verschiedenen Gittern auszuwerten.

Bevor wir zur Vorstellung erster Ergebnisse kommen, muß noch das externe Potential U_{ext} diskutiert werden. Das externe Potential beschreibt den Spannungsabfall entlang der Tunneldiode. Dieser Abfall ist linear, solange man den Unterschied zwischen den Dielektrizitätszahlen in Barriere und Topf vernachlässigt, denn die externe Spannungsquelle ist stabil genug, ein konstantes Feld innerhalb der Diode zu gewährleisten.

Bei Anlegen einer Spannung werden sich aber Elektronen vor der einen Potentialbarriere ansammeln und hinter der anderen Barriere wird ein Elektronenmangel entstehen. Das bedeutet, daß die Ladung nicht mehr homogen verteilt ist und sich

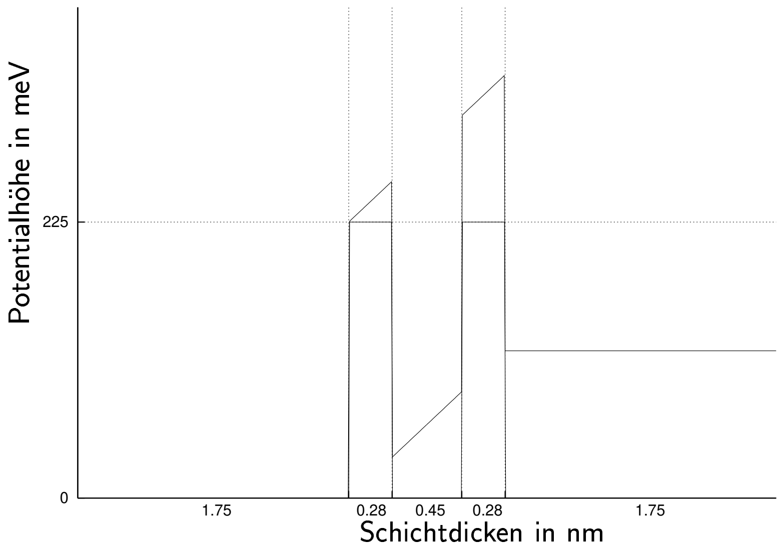


Abbildung 5.3: Skizze des effektiven Potentialverlaufes

ein induziertes Feld ergibt. Dieses induzierte Feld schirmt das externe Feld im Bereich der Pufferschichten ab. Da zunächst das Feld nicht selbstkonsistent bestimmt werden soll, nehmen wir an, daß der Spannungsabfall nur entlang der Barrieren und des Topfes stattfindet. Dieser Potentialverlauf ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Damit sind alle Parameter für die Berechnung der Verteilungsfunktion bestimmt. Der nächste Abschnitt präsentiert grundlegende Ergebnisse für resonante Tunneldioden.

5.3.2 Grundsätzliche Ergebnisse

Die wichtigste Abhängigkeit, die mit dem Experiment verglichen werden soll, ist die Strom–Spannungs–Kennlinie. Dafür benötigt man bei gegebener äußerer Spannung den stationären Wert der Stromdichte. Insofern man ausschließlich an stationären Zuständen des Systems interessiert ist, ist es nicht notwendig, die Bewegungsgleichung auf der Zeitachse zu lösen, wie es die Aufstellung einer Bewegungsgleichung zunächst nahelegt. Man sucht ja schließlich die Lösung zu $\partial_t f = 0$. Gleichung (5.14) zusammen mit der Randbedingung beschreiben dann ein lineares Gleichungssystem zur Bestimmung der Verteilungsfunktion. Die diskretisierte Potentialstreuung sowie der Driftoperator stellen einen Matrixoperator dar, die Randbedingung die Inhomogenität. Ein solches Gleichungssystem läßt sich sofort durch Inversion der Matrix

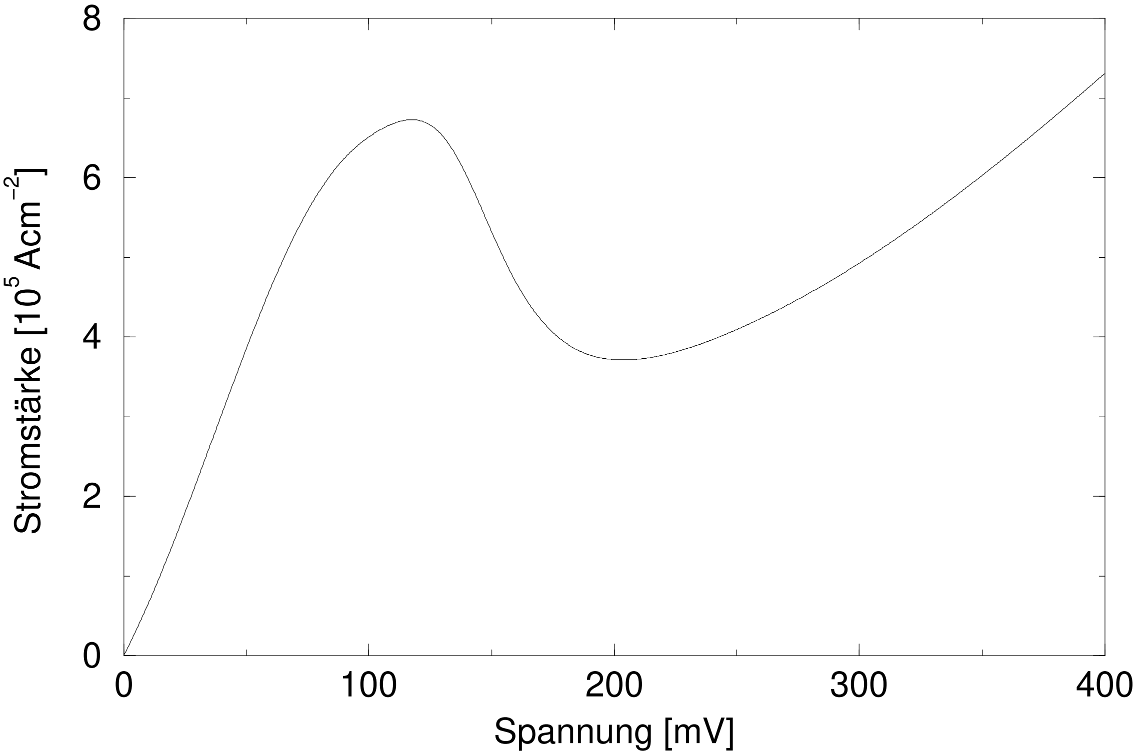


Abbildung 5.4: Berechnete Kennlinie einer resonanten Tunneldiode. Die Parameter der Barrierenstruktur entsprechen den in Abbildung 5.3 beschriebenen.

lösen. Die folgenden Ergebnisse wurden auf diese Weise berechnet[1].

Abbildung 5.4 zeigt eine typische Kennlinie einer resonanten Tunneldiode. Sie zeigt eine ausgeprägte Resonanz bei 120 mV. Danach fällt sie etwa auf die Hälfte der Stromstärke im Maximum ab, bevor sie wieder ansteigt. Man kann die berechnete Resonanz mit der Eigenenergie eines Elektrons in einem unendlich hohen Potential vergleichen, um einen ersten Eindruck zu bekommen, ob die in der Einleitung beschriebene Vorstellung über das Zustandekommen der Resonanz richtig ist. Die Eigenenergien eines Teilchens im Potentialkasten sind bekanntlich:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} \frac{n^2}{L^2}\,, \text{ mit } n = 1, 2, \ldots \,. \tag{5.29}$$

Die Breite des Potentialtopfes betrug 0.45 nm. Man muß aber berücksichtigen, daß die Verteilungsfunktion merklich in die Barrieren eindringt, und somit die effektive

[1] In der Praxis ist es nicht notwendig, den Matrixoperator tatsächlich zu invertieren. Da man nur an der Lösung zu einer bestimmten Inhomogenität interessiert ist, ist es ausreichend, eine LR-Zerlegung vorzunehmen. Der Aufwand hierfür ist erheblich geringer.

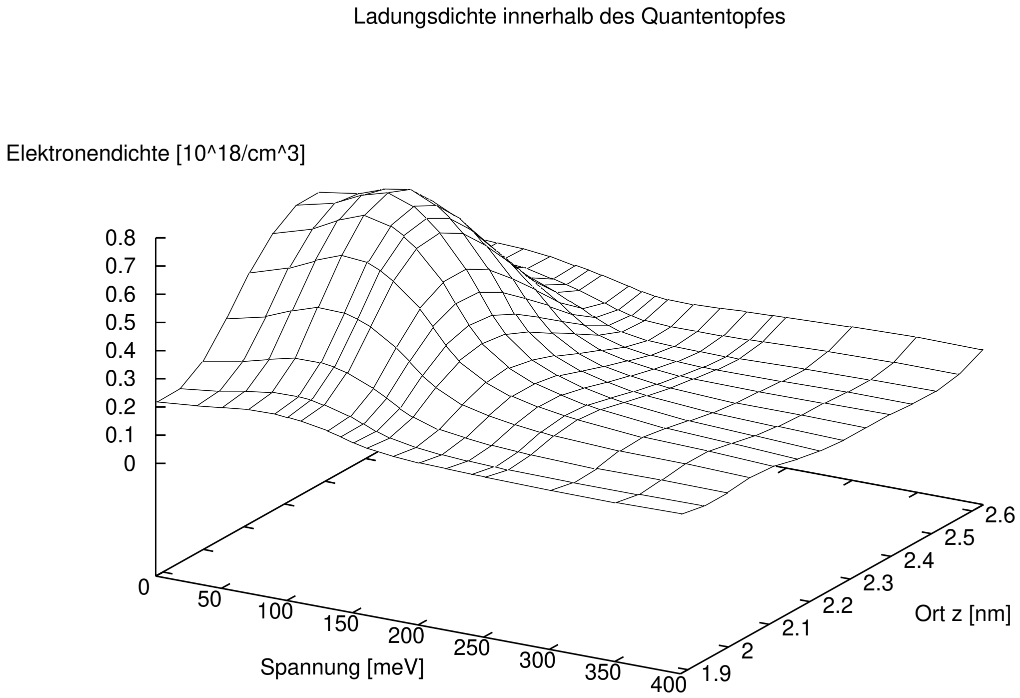


Abbildung 5.5: Ladungsverteilung innerhalb des Quantentopfes.

Breite des Topfes größer anzunehmen ist. Nimmt man an, daß die effektive Breite des Topfes 0.65 nm beträgt, dann erhält man gerade die erste Resonanz bei $E_1 =$ 121 meV. Eine weitere Resonanz kann nicht beobachtet werden, denn $E_2 = 484$ meV ist wesentlich größer als die Potentialbarrieren von 225 meV.

Betrachtet man die Ladungsverteilung innerhalb des Quantentopfes als Funktion der angelegten Spannung, so kann man die Resonanzen ebenfalls erkennen. Diese Abhängigkeit ist in Abbildung 5.5 dargestellt. Nähert man sich der Resonanz ausgehend vom Gleichgewichtszustand bei verschwindender Spannung, so steigt die Ladungsverteilung an, um etwa bei der Resonanz ein Maximum zu erreichen. Das örtliche Maximum der Ladungsverteilung liegt in der Mitte des Topfes, was in Analogie zum Problem des Elektrons im Potentialtopf der untersten Eigenfunktion entspricht. Wird die Spannung erhöht, so verringert sich die Elektronendichte drastisch.

Außerdem kann man erkennen, daß bei höheren Spannungen eine Umverteilung der Elektronen im Topf stattfindet. Es sind zwei kleine Maxima zu erkennen. Im Zentrum des Topfes ist die Dichte kleiner. Dabei handelt es sich um die zweite Eigenfunktion, die in der Mitte gerade einen Knoten besitzt. Obwohl die Resonanz nicht

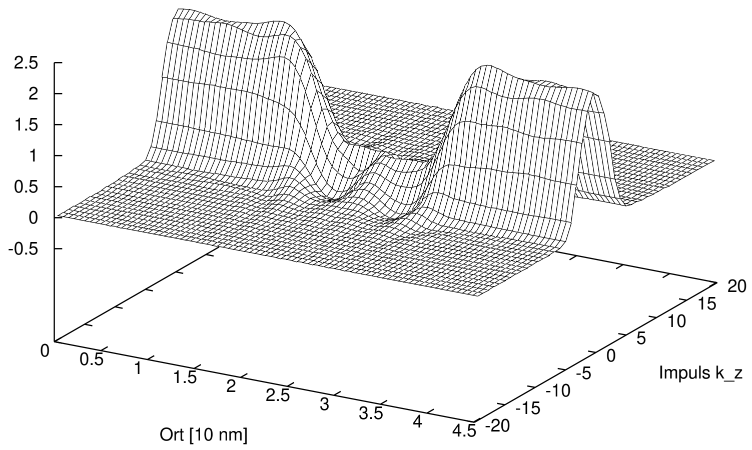


Abbildung 5.6: Verteilungsfunktion im Gleichgewicht.

erreicht wird, erkennt man in der Ladungsverteilung den Übergang zur nächsten Resonanz.

Nun sollen die grundsätzlichen Eigenschaften der Verteilungsfunktion selbst diskutiert werden. Dazu zeigt Abbildung 5.6 zuerst die Verteilungsfunktion bei verschwindender Spannung. In diesem Fall muß sie völlig symmetrisch bezüglich k_z und auch z sein. Auf dem Rand geht sie in die Fermiverteilung (5.15) über. Während das für die eine Hälfte der Verteilung auf dem Rand erzwungen ist, ergibt sich dies für die andere Hälfte der Verteilung aus der Rechnung. Im Rahmen der numerischen Genauigkeit ist die Randverteilung tatsächlich eine Fermiverteilung.

In der Nähe der Barrieren erkennt man aber deutliche Abweichungen von einer Fermiverteilung. Die Verteilungsfunktion weist Ausläufer zu großen k_z-Werten auf. Aber auch für kleine k_z-Werte ist ein Maximum in der Nähe der Barrieren zu beobachten. Elektronen häufen sich also vor den Barrieren an. Die Elektronendichte im Quantentopf ist im Vergleich zu der in den Pufferschichten klein. Das chemische Potential wurde so eingestellt, daß sich eine Elektronenkonzentration von $2 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$ ergibt. Im Topf beträgt sie maximal $0.7 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$. Wegen der sehr dünnen Barrieren ist die Elektronendichte aber auch dort noch merklich. In realistischeren Systemen werden die Barrieren dicker gewählt, wodurch die Resonanzen auch sehr viel schärfer werden.

Schließlich soll noch eine Verteilungsfunktion bei einer endlichen Spannung präsentiert werden. Dazu zeigt Abbildung 5.7 die Verteilungsfunktion bei der Resonanzspannung von 120 mV. Im Vergleich zur Gleichgewichtsverteilung in Abbildung 5.6

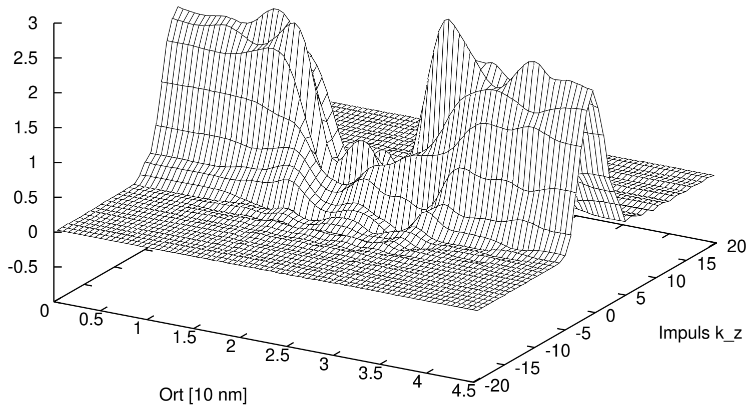


Abbildung 5.7: Stationäre Verteilungsfunktion bei einer Spannung von 120 mV, der Resonanzspannung.

zeigt sie sehr viel mehr Strukturen, insbesondere in der Nähe der Barrieren. Dies ist aber nicht nur bei der Resonanzspannung der Fall, sondern ein allgemeines Charakteristikum der Verteilungsfunktionen bei endlichen Spannungen. Zum Rand hin relaxiert die Verteilung aber wieder gegen die Fermiverteilung. Aufgrund der starken Strukturierung ist es verständlich, wie wichtig es ist, eine ausreichend hohe Dichte der Gitterpunkte zu haben, um quantitative Aussagen über das Verhalten der Tunneldiode zu erhalten.

5.3.3 Konvergenz bezüglich numerischer Parameter

Ziel dieses Abschnittes ist es, die Ergebnisse auf ausreichende numerische Genauigkeit zu testen, d. h. insbesondere darauf, ob die Ergebnisse noch von der Wahl der Diskretisierung abhängen. Dabei stößt man auf einen wichtigen Nachteil des Verfahrens der Matrixinversion. Grundsätzlich handelt es sich um eine Matrix, die quadratisch in der Anzahl der k_z- und z-Stützstellen ist. Nutzt man aus, daß bezüglich der z-Koordinate bei der gewählten Form des Differenzenquotienten nur nächste Nachbarn von z_i, also z_{i-1} bzw. z_{i+1} benötigt werden und die Matrix somit dünn besetzt ist, so kann man einen Speicherplatzbedarf proportional $N_k^2\,N_z$ erreichen. Die numerischen Untersuchungen zeigen nun, daß die Resultate empfindlich davon abhängen, wie Δz und Δk gewählt werden. Für Stützstellenzahlen, für die eine Matrixinversion noch durchgeführt werden kann, lassen sich keine konvergenten Ergebnisse erzielen.

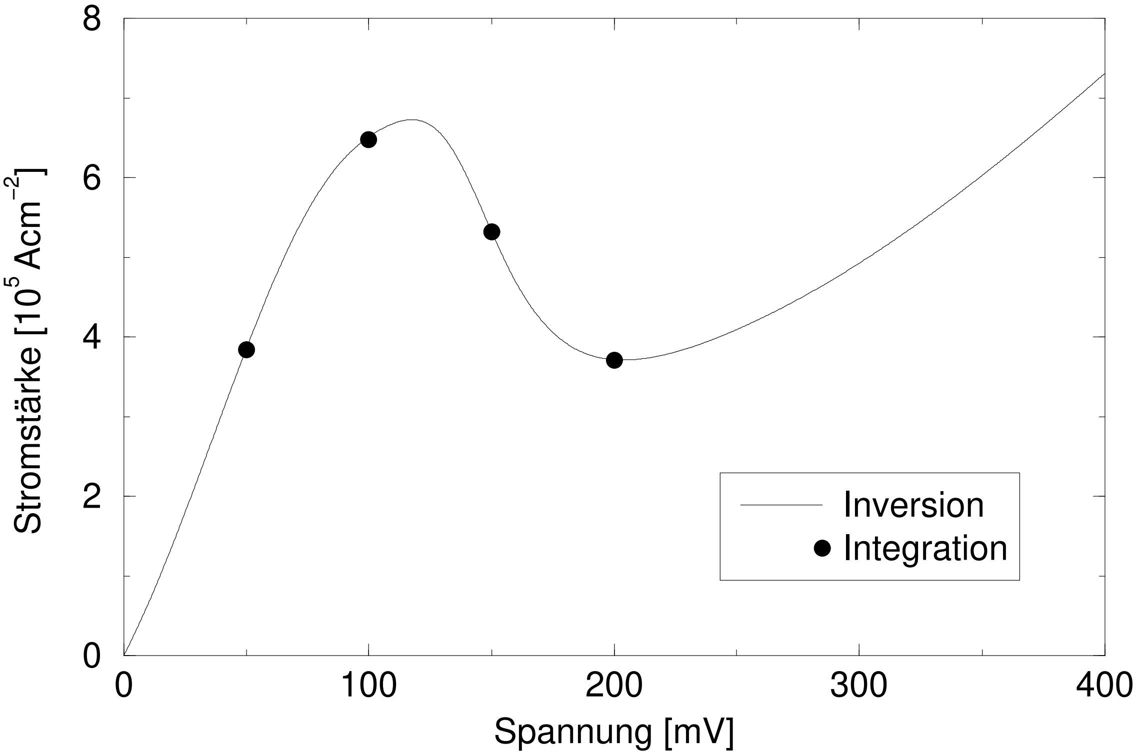


Abbildung 5.8: Vergleich der Kennlinien, die durch Matrixinversion oder Integration auf der Zeitachse erhalten wurden. Die Ergebnisse der Rechnung mit Matrixinversion sind in der durchgezogenen Linie dargestellt, die Punkte wurden durch Integration auf der Zeitachse bestimmt.

Integriert man die Bewegungsgleichung hingegen tatsächlich auf der Zeitachse auf, so ist der Speicherplatzbedarf linear in der Anzahl der Stützstellen, denn es müssen nur Vektoren abgespeichert werden. Dieser Vorteil wird durch die längere Rechenzeit erkauft, denn ausgehend von einem Anfangszustand muß solange integriert werden, bis der stationäre Zustand erreicht ist.

Abbildung 5.8 zeigt einen Vergleich der Ergebnisse beider Verfahren, allerdings für Stützstellenzahlen, für die noch keine Konvergenz erzielt ist. Die durchgezogene Kurve wurde mittels Matrixinversion bestimmt. Die Punkte entstammen einer Integration der Bewegungsgleichung. Die beiden Verfahren sind offenbar völlig äquivalent. Es sei hier auch bemerkt, daß es bei der Zeitintegration keine Rolle spielt, von welchem Startzustand ausgegangen wird. Der stationäre Endzustand ist unabhängig vom Startwert.

Zur Berechnung von Kennlinien oder anderer stationärer Größen ist es wichtig sicherzustellen, daß die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion tatsächlich so

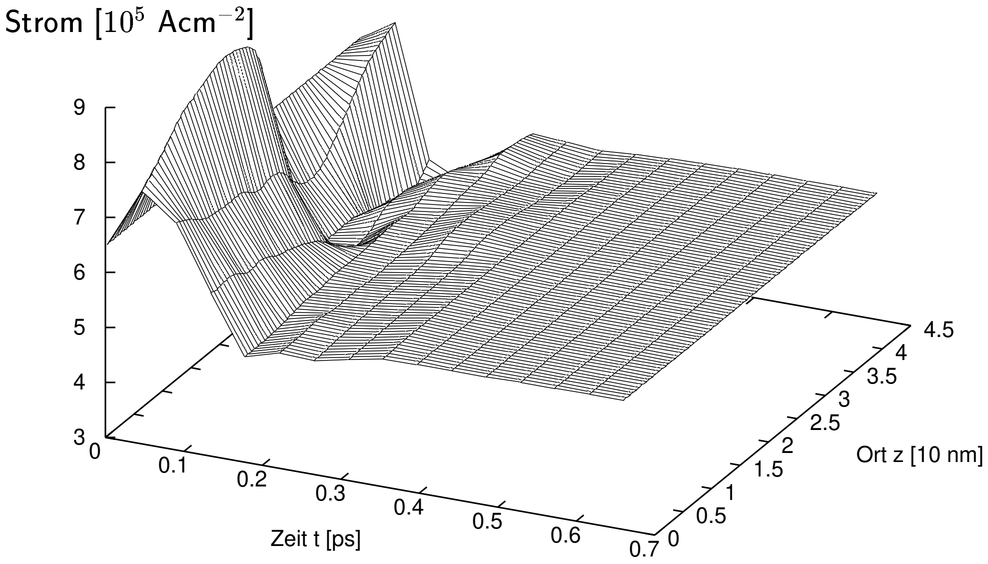


Abbildung 5.9: Berechnete Stromdichte als Funktion von Zeit t und Ort z. Es wurde von einer Spannung von 100 mV auf 150 mV geschaltet.

weit berechnet wurde, bis der stationäre Endzustand erreicht ist. Es ist aber unpraktisch, tatsächlich die Verteilungsfunktion darauf zu überprüfen, ob sie sich noch wesentlich verändert. Vielmehr werden wir die Konvergenz der Stromdichte als Kriterium für die Stationarität benutzen.

Im allgemeinen ist die Stromdichte $j(z,T)$ tatsächlich eine Funktion von Ort und Zeit. Erst wenn das System stationär, d. h. zeitunabhängig wird, wird die Stromdichte auch ortsunabhängig. Aus der Kontinuitätsgleichung (5.19) erkennt man, daß $j(z,T)$ noch ortsabhängig sein kann, solange die Ladungsdichte $n(z,T)$ noch nicht stationär ist, also $\partial_t n(z,T) \neq 0$. Falls aber Stationarität erreicht ist, muß auch $\partial_z j(z,T) = 0$ gelten. Erst dann läßt sich dem Bauelement wirklich eine einheitliche Stromdichte zuschreiben. Abbildung 5.9 zeigt dieses Verhalten, wenn von einer Spannung von 100 mV auf 150 mV geschaltet wird. Die Schaltzeit beträgt dabei $0.05ps$. Man erkennt deutlich, daß zu Beginn die Stromdichte örtlich und zeitlich stark variiert. Mit zunehmender Zeit nehmen diese Schwankungen ab und die Stromdichte erreicht den neuen stationären Zustand. Da bei den gewählten Probenparametern 150 mV bereits größer als die Resonanzenergie ist, sinkt die Stromstärke ab.

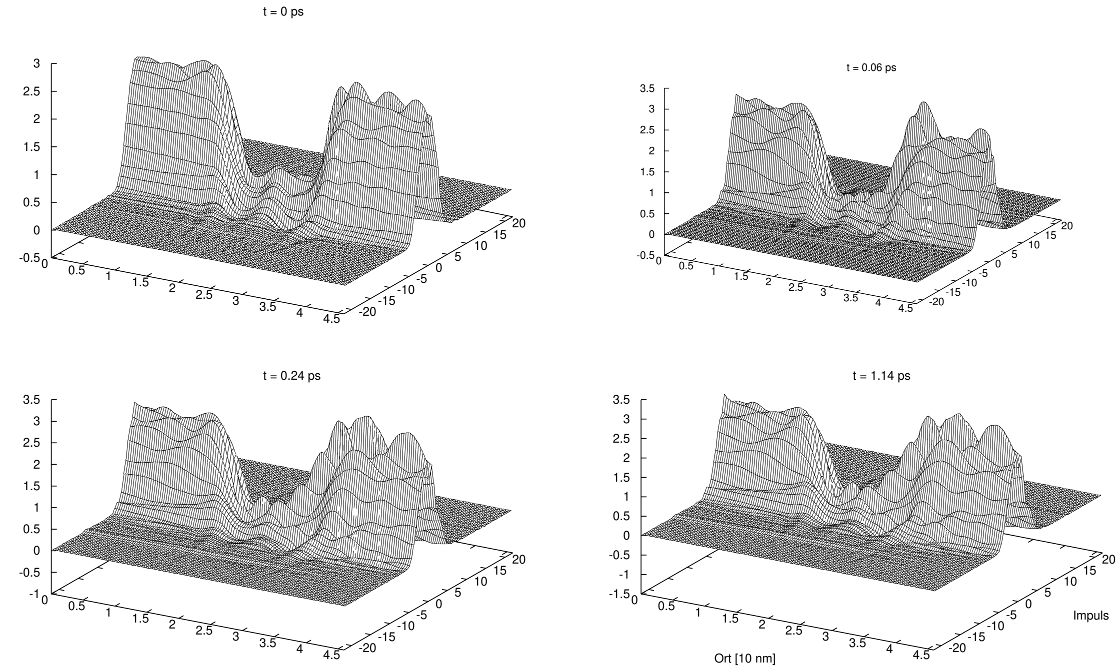


Abbildung 5.10: Zeitentwicklung der Verteilungsfunktion bei einer Spannungsänderung von 30 mV auf 120 mV. Die Zeitpunkte für die verschiedenen Verteilungen sind in den Bildern jeweils angegeben.

Zur Illustration zeigt Abbildung 5.10 die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion, wenn von einer Spannung von 30 mV auf 120 mV geschaltet wird. Man erkennt, wie die Strukturierung der Verteilungsfunktion zunimmt. Insbesondere während des Schaltvorganges von 0.1 ps treten starke Veränderungen der Verteilungsfunktion auf.

Durch die Integration auf der Zeitachse sind wir demnach in der Lage, die Ergebnisse tatsächlich auf Konvergenz bezüglich der numerischen Parameter der Stützstellenzahl zu testen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.11 dargestellt. Bei unveränderten Systemparametern wurden Kennlinien für unterschiedliche Stützstellenzahlen in k_z berechnet. Es ist wichtig, daß dabei die Zahl der Stützstellen in der Relativkoordinate $\Delta\bar{z}$ konstant bleibt. Verkleinert man nämlich die Schrittweite $\Delta\bar{z}$, so vergrößert sich wegen (5.28) die Schrittweite für die Impulskoordinate Δk, so daß die Auflösung selbst bei gleichbleibender Stützstellenzahl schlechter wird.

Wie man erkennt, verändert sich die Kennlinie deutlich mit der Stützstellenzahl. Dabei entspricht die Parametrisierung mit der kleinsten Anzahl in etwa derjenigen in [34]. Mit zunehmender Stützstellenzahl verschiebt sich das Maximum zu größeren Spannungen. Außerdem nimmt der Wert des Maximums zu, während das Minimum

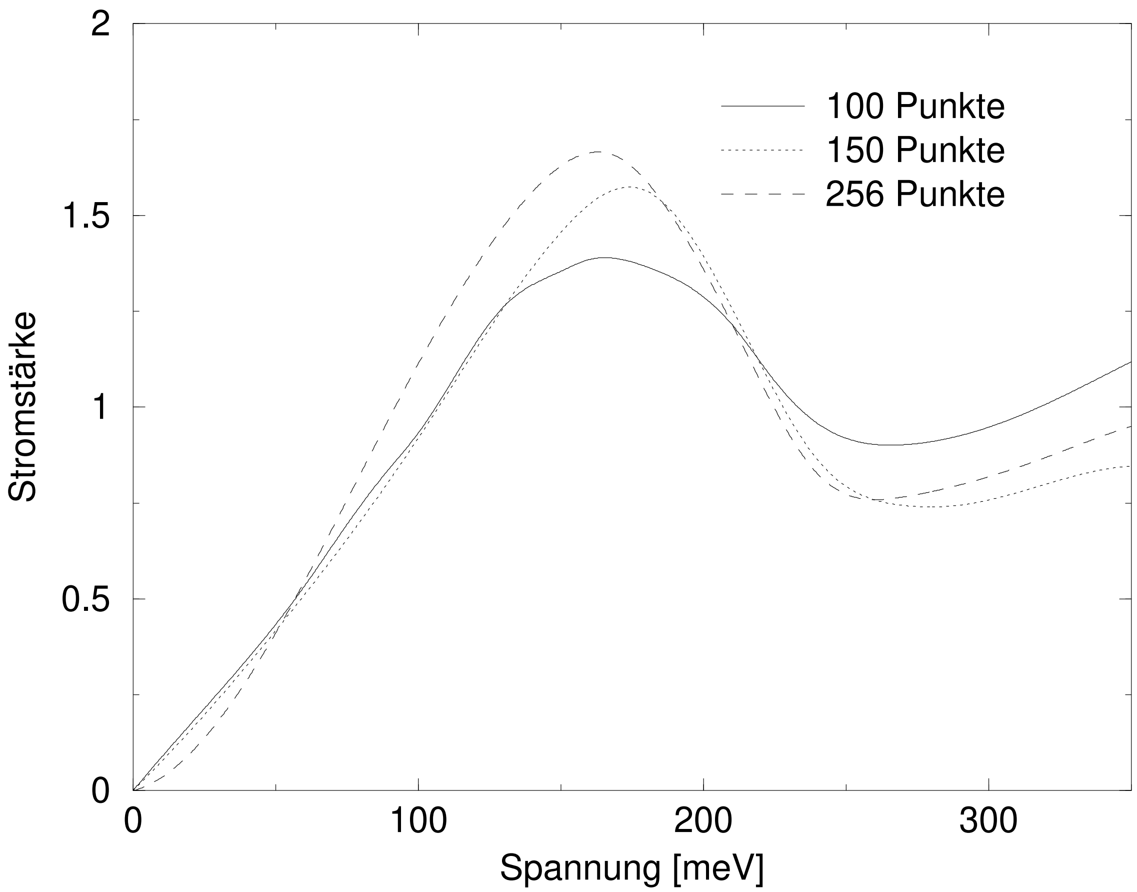


Abbildung 5.11: Kennlinien für verschiedene Anzahlen der Stützstellenzahl für k_z. Die übrigen Parameter wurden konstant gehalten.

kleinere Werte annimmt. Die Resonanz wird also ausgeprägter. Erst bei Werten von $N_k = 256$ verändert sich die Kennlinie nicht mehr wesentlich im Vergleich zu noch höheren Stützstellenzahlen. Die Auflösung in der Ortskoordinate N_z betrug dabei $N_z = 120$, für $N_{\bar{z}}$ wurde ein Wert von 80 gewählt. Damit ist die Auflösung in der Relativkoordinate scheinbar nicht sehr hoch. Es zeigte sich aber, daß sie durchaus ausreichend ist und eine weitere Erhöhung, die wie beschrieben auch eine entsprechende Erhöhung von N_k nach sich zieht, nicht notwendig ist.

Schon bei diesem einfachen Modell ist es also notwendig, Diskretisierungen zu benutzen, die eine Behandlung mit der Methode der Matrixinversion unpraktikabel machen. Die Integration bietet aber noch weitere wesentliche Vorteile. Eine Matrixinversion ist nämlich nur möglich, solange die Bewegungsgleichung linear in der Verteilungsfunktion ist. Wie im folgenden Kapitel gezeigt wird, ist dies für die Elektron–Phonon–Streuung nicht mehr der Fall. Dann könnte man allenfalls zu iterativen Verfahren übergehen, bei denen in bestimmten Teilen der Bewegungsgleichung die Verteilungsfunktion zunächst *geraten* wird und dann selbstkonsistent bestimmt werden muß. Allerdings kann man nicht sicher sein, daß man tatsächlich den stationären Zustand findet, wenn die Anfangsverteilung nicht genügend nah an der Endverteilung war.

Bei einer Integration auf der Zeitachse entsteht dieses Problem nicht; man gelangt automatisch in den stationären Endzustand. Auch weitere Selbstkonsistenzbedingungen können zwanglos einbezogen werden, wie in Abschnitt 5.6 noch gezeigt werden wird. Nun soll das Modell zunächst um den Beitrag der Elektron–Phonon–Wechselwirkung erweitert werden.

5.4 LO–Phonon–Streuung

Wir machen hier Gebrauch von den Resultaten der Elektron–Phonon–Wechselwirkung, wie sie in Kapitel 2.5 eingeführt wurden. Außerdem benutzen wir die dort eingeführte Quasiteilchen–Näherung für die Greenschen Funktionen. Mit den Gleichungen (2.59) und (2.60) für die Selbstenergien und (2.61) und (2.62) für die Greenschen Funktionen nimmt die Bewegungsgleichung für die Wigner–Funktion (5.11) die folgende Gestalt an:

$$
\begin{aligned}
&\left[\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}\right] f(\mathbf{k},\mathbf{R},T) \\
&\quad + \frac{1}{\hbar}\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\, f(\mathbf{k}',\mathbf{R},T)\left[U(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R}) + U_{\text{ext}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R})\, g(T)\right] \\
&= \left[1 - f(\mathbf{k},\mathbf{R},T)\right]\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\, M^2_{\mathbf{k}'}\, f(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R},T)\,\cdot \\
&\qquad \cdot\left[(N_0+1)\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}+\omega_0) + N_0\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}-\omega_0)\right] \\
&\quad - f(\mathbf{k},\mathbf{R},T)\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\, M^2_{\mathbf{k}'}\left[1 - f(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R},T)\right]\cdot \\
&\qquad \left[(N_0+1)\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}-\omega_0) + N_0\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}+\omega_0)\right]
\end{aligned}
\tag{5.30}
$$

Die Terme auf der rechten Seite der Gleichung können nun auch anschaulich als Streuraten in den und aus dem Zustand mit Wellenvektor $\mathbf{k}$ interpretiert werden. Dabei soll Abbildung 5.12 behilflich sein. Die Einstreurate ist proportianal zur Zahl der noch freien Zustände $[1 - f(\mathbf{k},\mathbf{R},T)]$ und proportional zur Zahl der besetzten Anfangszustände $f(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R},T)$, aus denen in den Zustand $\mathbf{k}$ gestreut wird. Diese Streuung kann auf zwei Arten mittels Wechselwirkung mit LO–Phononen geschehen. Zum einen kann man von einem energetisch niedrigeren Zustand $\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ unter

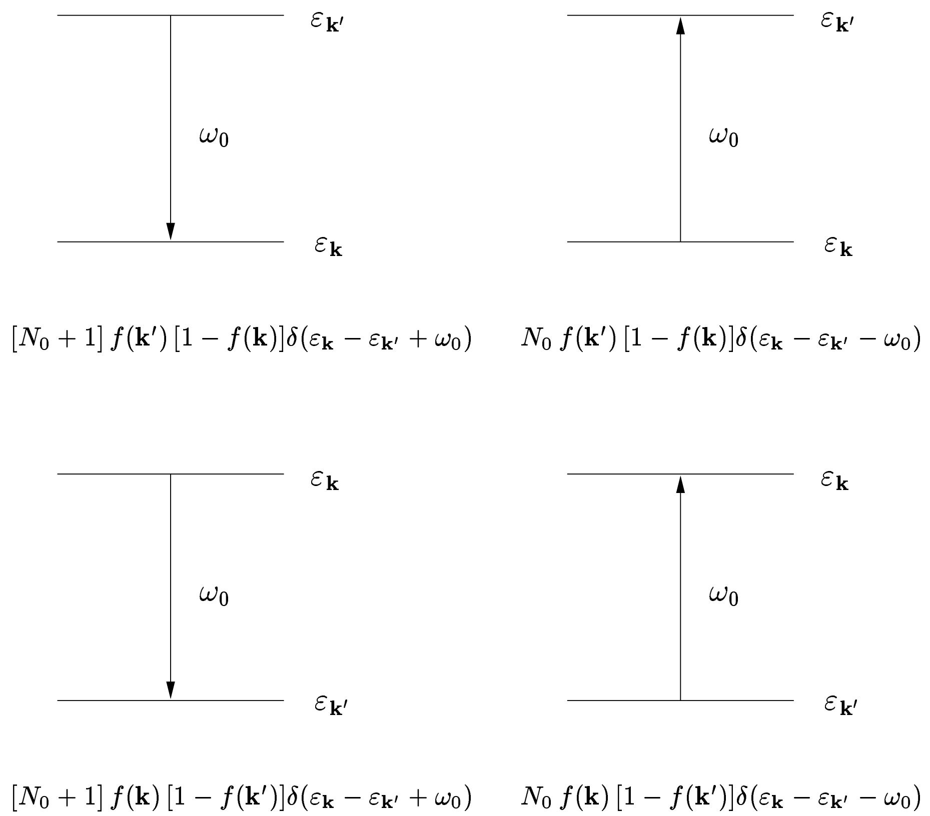


Abbildung 5.12: Schematische Darstellung der Streuprozesse mit LO–Phononen.

Absorption eines Phonons in den Endzustand gelangen ($\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \omega_0$). Dieser Vorgang ist proportional zur Besetzung des LO-Phonons N_0. Andererseits kann man unter Emission eines Phonons aus einem energetisch höher gelegenen Zustand in den Endzustand streuen ($\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} = \omega_0$), was proportional zu $(1 + N_0)$ ist. Der letztere Vorgang ist zwar unabhängig von der Besetzung der Phononen möglich, allerdings können nur solche Elektronen streuen, die eine ausreichend hohe Überschußenergie haben.

Die im vorigen Abschnitt gemachte Überlegung, daß sich das Problem auf eine in Ort und Impuls eindimensionale Verteilung reduzieren läßt, ist nun nicht mehr möglich. Für die Abhängigkeit von den Ortskoordinaten hat sich nichts geändert. Die Verteilungen können nach wie vor über die Querschnittsfläche gemittelt werden. Anders sieht es für die Abhängigkeit von der Impulskoordinate $\mathbf{k}$ aus. Ist das System innerhalb der Schichten homogen, so läßt sich zunächst nur sagen, daß die Verteilungsfunktion nur von der Longitudinalkoordinate k_z und der Radialkoordinate k abhängen kann. Da die Potentiale nur von z abhängen, sind ihre Fouriertransformierten δ-förmig in k_x und k_y, was zuvor die Eliminierung der Radialkoordinate ermöglichte. Der Streuterm hingegen mischt nun die k_z- und k-Komponenten der Verteilung. Damit erhöht sich die Dimension des Problems, was aber nach den Ergebnissen von Abschnitt 5.3.3 Schwierigkeiten bereitet.

5.5 Entwicklung im Hochtemperatur–Limes

Eine Verringerung der Dimensionalität des Problems läßt sich dann erreichen, wenn man ein geeignetes Funktionensystem findet, in dem man die Abhängigkeit von der Radialkoordinate entwickeln kann. Geeignet bedeutet, daß das Funktionensystem schnell konvergieren muß, so daß man sich auf wenige Entwicklungskoeffizienten beschränken kann und damit den numerischen Aufwand begrenzt hält. Die Frage ist natürlich, welches Funktionensystem dazu geeignet ist.

Der Leitfaden für die folgenden Überlegungen ist die Tatsache, daß sich im Hochtemperatur–Limes die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht faktorisieren läßt, denn dann wird sie immer mehr zu einer *Gausschen Verteilung*. Die Idee ist nun, das Funktionensystem so zu wählen, daß der Fall ohne Elektron–Phonon–Streuung schon durch den niedrigsten Koeffizienten der Entwicklung allein beschrieben werden soll. Es zeigt sich, daß es notwendig ist, vor der Entwicklung einen Faktor $g(k,k_z)$ aus der Verteilungsfunktion zu nehmen. Wir wählen deshalb folgenden Ansatz:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{R},T) \;=g(k,k_z)\sum_n f_n(k_z,z,T)\,\phi_n(k,k_z)\;. \tag{5.31}$$

Das Funktionensystem ϕ_n sowie der Faktor $g(k,k_z)$ sind noch zu bestimmen, f_n ist der Entwicklungskoeffizient, dessen Bewegungsgleichung schließlich zu lösen sein wird. Die Entwicklungsfunktionen ϕ_n sollen orthognonal aufeinander sein; für sie gilt:

$$\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\,\phi_n(k,k_z)\,\phi_m(k,k_z)\;=A\,\delta_{n,m}\,. \tag{5.32}$$

Für das Funktionensystem ϕ_n stellt die Variable k_z einen externen Parameter dar. Der Parameter A wurde aus Dimensionsgründen eingeführt. Würde man in dimensionslosen Koordinaten integrieren, ließe er sich zu 1 wählen.

Setzt man den Ansatz (5.31) in die Bewegungsgleichung der Verteilungsfunktion

(5.30) ein, so nimmt die linke Seite der Gleichung folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\hbar k_z}{m}\frac{\partial}{\partial z}\right] f_n(k_z, z, T) \\
&+ \frac{1}{\hbar}\sum_m \int \frac{dk_z'}{2\pi}\left[U(k_z - k_z', z) + U_{\text{ext}}(k_z - k_z', z)\, g(T)\right] \\
&\qquad \cdot a_{nm}(k_z, k_z')\, f_m(k_z', z, T) \\
&= \frac{\partial}{\partial T} f_n(k_z, z, T)\Big|_{\text{sc}}, \qquad (5.33)
\end{aligned}$$

mit

$$a_{nm}(k_z, k_z') = \frac{1}{A}\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{g(k, k_z')}{g(k, k_z)}\phi_n(k, k_z)\,\phi_m(k, k_z') \,. \qquad (5.34)$$

Hier wurde ausgenutzt, daß die Potentiale nur von der z-Komponente abhängen. Das führt dazu, daß sie δ-förmig in den Radialimpulsen sind. Aus diesem Grund tritt in der Definition der Matrix (5.34) die gestrichene Variable k' nicht auf, sondern nur k. Wenn der Fall ohne Elektron–Phonon–Streuung, also $\frac{\partial}{\partial T} f_n\big|_{\text{sc}} = 0$, schon durch den niedrigsten Koeffizienten f_0 beschrieben werden soll, dann muß gelten:

$$a_{00}(k_z, k_z') = \frac{1}{A}\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{g(k, k_z')}{g(k, k_z)}\phi_0(k, k_z)\,\phi_0(k, k_z') \equiv 1\,. \qquad (5.35)$$

Dies kann nur erreicht werden, wenn

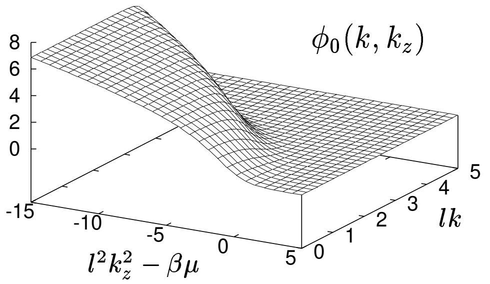
$$g(k, k_z) = \phi_0(k, k_z) \qquad (5.36)$$

gilt. An dieser Stelle wird deutlich, warum es notwendig war, einen Faktor aus der Entwicklung (5.31) zu ziehen.

Eine weitere Bedingung an den Ansatz folgt aus den Randbedingungen des Systems. Auf dem Rand soll die Verteilungsfunktion wieder in eine Fermi–Verteilung f_{F} übergehen. Es wird nämlich angenommen, daß die Reservoire, die an das System gekoppelt sind, so groß sind, daß sie durch die Dynamik des Systems nicht beeinflußt werden und folglich stets im thermischen Gleichgewicht bleiben. Diese Bedingung muß aber auch für den Fall ohne Elektron–Phonon–Streuung, also für den niedrigsten Koeffizienten alleine gelten.

$$\begin{aligned}
f_{\text{F}}(k, k_z) &\equiv f(\mathbf{k}, \mathbf{R}_{\text{B}}, T) \\
&\overset{!}{=} \phi_0(k, k_z)\,\phi_0(k, k_z)\, f_0(k_z, z_{\text{B}}, T) \\
&= \big(\phi_0(k, k_z)\big)^2 \bar{f}(k_z) \qquad (5.37)
\end{aligned}$$

Da die Randbedingung für alle Zeiten t gelten muß, ist der Entwicklungskoeffizient $f_0(k_z, z, T)$ auf dem Rand $z = z_{\text{B}}$ eine zeitunabhängige Funktion, die als $\bar{f}$ bezeichnet wird. Diese Funktion wird durch die Normierungsbedingung (5.32) festgelegt.



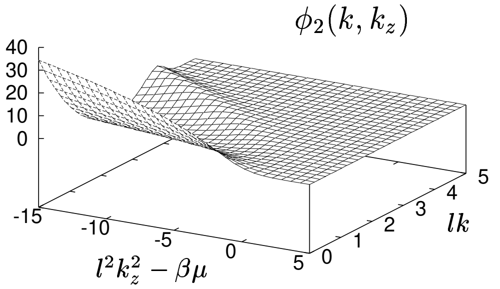


Abbildung 5.13: Entwicklungsfunktionen in Abhängigkeit von der dimensionslosen Radialkoordinate lk und dem Parameter $l^2k_z^2 - \beta\mu$.

Gleichung (5.37) stellt die Bestimmungsgleichung für die niedrigste Funktion unserer Entwicklung dar:

$$\phi_0(k,k_z) = \left(\frac{f_{\mathrm{F}}(k,k_z)}{\bar{f}(k_z)}\right)^{1/2} . \tag{5.38}$$

Setzt man dieses Ergebnis in die Orthogonalitätsrelation (5.32) ein, so erhält man:

$$\bar{f}(k_z) = \frac{1}{A}\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\, f_{\mathrm{F}}(k,k_z) . \tag{5.39}$$

Dies entspricht bis auf den Normierungsfaktor gerade der integrierten Fermiverteilung aus Gleichung (5.15). Die Normierung A wählen wir nun so, daß $\bar{f}$ dimensionslos wird:

$$A = \frac{1}{\lambda^2} = \frac{2mk_{\mathrm{B}}T}{\hbar^2} . \tag{5.40}$$

Damit ist nun ϕ_0 vollständig bestimmt. Die übrigen Entwicklungsfunktionen lassen sich nicht durch explizite Anforderungen an das Funktionensystem bestimmen. Daher wählen wir eine Entwicklung in Polynomen p_n. Effektiv entwickeln wir also in einer Polynomreihe mit der Wurzel der Fermi–Verteilung als Gewichtsfunktion. Die Polynomkoeffizienten $c_i^{(n)}$ müssen numerisch mit Hilfe des *Gram–Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens* bestimmt werden.

Insgesamt hat die Entwicklung der Verteilungsfunktion die folgende Gestalt:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{R},T) = \phi_0(k,k_z)\sum_n f_n(k_z,z,T)\,\phi_n(k,k_z) , \tag{5.41}$$

$$\begin{aligned} \phi_n(k,k_z) &= \phi_0(k,k_z)\,p_n(k,k_z) \\ &= \phi_0(k,k_z)\sum_{i=0}^{n} k^i c_i^{(n)}(k_z) . \end{aligned} \tag{5.42}$$

Abbildung 5.13 zeigt zwei ausgewählte Entwicklungsfunktionen in Abhängigkeit der dimensionslosen Koordinaten λk in Radialrichtung und $\lambda^2 k_z^2 - \beta\mu$ in Longitudinalrichtung. Für große k_z und k verlaufen die Funktionen stets gegen 0, da die Fermifunktion gegen 0 konvergiert. Die linke Abbildung zeigt die unterste Entwicklungsfunktion ϕ_0, die rechte ϕ_2. Man erkennt, daß die unterste Funktion keine Knoten in k-Richtung hat, während ϕ_2 genau zwei Knoten besitzt. Bei den Überlegungen zur Größenordnung der Funktionswerte beachte man, daß große Funktionswerte bei $k = 0$ bei der Normierung durch den Volumenfaktor $2\pi k$ wieder beschränkt werden.

Schließlich geben wir noch an, wie sich die beiden fundamentalen makroskopischen Größen Ladungsdichte und Stromdichte in dem gewählten Funktionensystem darstellen. Aus den ursprünglichen Gleichungen (5.1) und (5.2) wird unter Benutzung der Quasiteilchennäherung (2.61) und der Entwicklung (5.41):

$$n(z,T) = \frac{-e}{l^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} f_0(k_z, z, T) \tag{5.43}$$

$$j(z,T) = \frac{-e}{l^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} \frac{\hbar k_z}{m} f_0(k_z, z, T) \; . \tag{5.44}$$

In diese Größen geht also nur die niedrigste Funktion unseres Entwicklungssystems ein. Formal ist dies mit dem herausgezogenen Faktor ϕ_0 zu begründen, der bei der Integration über k gerade f_0 herausprojiziert. Durch die Streumechanismen können die höheren Koeffizienten f_n also nicht direkt in die Meßgrößen eingehen; vielmehr beeinflussen sie die Dynamik des niedrigsten Koeffizienten und gehen damit nur indirekt in die Meßgrößen ein.

Bevor die Streumatrixelemente in der nun definierten Basis entwickelt werden, soll auf einen weiteren Umstand eingegangen werden, der die Entwicklung der Verteilungsfunktion beeinflußt, nämlich die Selbstkonsistenz der Randbedingungen.

5.6 Selbstkonsistenz

In die Bewegungsgleichung für die Verteilungsfunktion (5.30) gehen zwei Größen ein, die selbst durch die Verteilungsfunktion beeinflußt werden. Das ist zum einen das Potential entlang der Struktur. Dieses besteht nämlich nicht nur aus der Struktur $U(\mathbf{R})$ und dem durch die angelegte Spannung hervorgerufene externe Potential ϕ_{ext}, sondern auch aus dem induzierten Potential der elektronischen Ladungsverteilung. Elektronen werden sich nämlich, wie schon erwähnt, vor der ersten Barriere, durch die sie tunneln, ansammeln, wohingegen hinter der zweiten Barriere ein Elektronenmangel herrschen wird. Dies führt zu einem induzierten Potential ϕ_{ind}, das das externe Potential abschwächt.

Die zweite Größe, die der Bewegungsgleichung nicht unmittelbar anzusehen ist, sind die Randbedingungen. Es wurde bereits erläutert, daß angenommen wird, daß die

Reservoire so groß sind, daß sie von der Dynamik des Systems nicht beeinflußt werden und im Gleichgewicht bleiben. Das bedeutet, daß die Verteilung der Elektronen auf dem Rand stets eine Fermiverteilung bleibt. Nach Anlegen einer äußeren Spannung stellt sich jedoch ein neuer Gleichgewichtszustand ein, bei dem ein Strom durch das Bauelement fließt. Mithin kann die Verteilung nicht mehr diejenige im spannungsfreien Fall sein. Vielmehr muß sie um den der Driftgeschwindigkeit entsprechenden Impuls $\mathbf{k}_\mathrm{D}$ verschoben sein. Die Driftgeschwindigkeit, die mit der Stromdichte zusammenhängt, ist aber gerade ein Ergebnis der elektronischen Dynamik.

Da beide Größen, induziertes Potential und Randbedingungen, sowohl Eingangsgrößen als auch Ergebnis der Lösung der Bewegungsgleichungen sind, müssen sie *selbstkonsistent* bestimmt werden.

5.6.1 Selbstkonsistenz der Randbedingungen

Die Selbstkonsistenz der Randbedingungen, wie sie in der Einleitung skizziert wurde, ist eine in der Literatur kaum diskutierte Bedingung [31, 59]. Andererseits sind korrekte Randbedingungen wesentlich für eine quantitative Beschreibung des Experimentes.

Liegt an der Tunneldiode eine Spannung an, dann stellt sich eine neue Gleichgewichtsverteilung ein, die den Eintritt des Stromes in die Diode sicherstellt. Da es sich nach wie vor um ein thermisches Gleichgewicht handelt, muß es sich um eine verschobene Fermiverteilung handeln. Die Driftgeschwindigkeit hängt dabei wie folgt von der Stromdichte j ab:

$$\begin{aligned} j &= -e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \, f_\mathrm{F}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_\mathrm{D}) \\ &= -e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, \frac{\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{k}_\mathrm{D})}{m} \, f_\mathrm{F}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{-e\hbar \mathbf{k}_\mathrm{D}}{m} \, n \, . \end{aligned} \tag{5.45}$$

Gleichung (5.45) stellt einerseits die Beziehung dar, nach der die Driftgeschwindigkeit aus der Ladungsdichte und der Stromdichte bestimmt werden muß. Diese beiden Größen sind Ergebnisse der Bewegungsgleichung. Andererseits geht diese Größe bereits in die Vorgabe der Randbedingung ein. Damit ist das Selbstkonsistenzproblem beschrieben.

Löst man wirklich die Bewegungsgleichung und interessiert sich nicht nur für den stationären Endzustand, dann bietet sich aber auch eine elegante Möglichkeit, dieses Selbstkonsistenzproblem zu lösen. Startet man nämlich vom spannungsfreien Fall, dann ist die Driftgeschwindigkeit offenbar Null, denn es fließt kein Strom. Ein anderer möglicher Ausgangspunkt wäre eine bereits bekannte selbstkonsistente Lösung zu einer endlichen Spannung. Ausgehend von einem derartigen selbstkonsistenten Zustand integriert man nun die Bewegungsgleichung auf. Bei jedem Zeitschritt können nun die momentane Strom- und Ladungsdichte bestimmt und die Randbedingung entsprechend adjustiert werden. Auf diese Weise gelangt man automatisch in den selbstkonsistenten stationären Zustand. Diese Vorgehensweise entspricht im übrigen auch dem tatsächlichen Geschehen in der Tunneldiode, denn auch dort verschiebt sich ja kontinuierlich die Verteilung. In der Praxis ist es ausreichend, die Randverteilung nicht mit jedem Zeitschritt zu aktulisieren, um Rechenzeit zu sparen.

Eine verschobene Randverteilung wirft allerdings Probleme bezüglich der im vorigen Abschnitt abgeleiteten Entwicklung der Verteilungsfunktion auf. Um zu gewährleisten, daß die Randbedingungen schon mit der niedrigsten Stufe der Entwicklung erfüllt werden, müßte man für jede neue Randbedingung das Funktionensystem ϕ_n neu bestimmen, nach dem entwickelt wird, und die Entwicklungskoeffizienten f_n des alten Funktionensystems in die des neuen umrechnen. Der Aufwand dafür ist zu groß. Gleichung (5.45) legt aber bereits nahe, wie dieses Problem umgangen werden kann.

Betrachtet man nämlich statt der Verteilungsfunktion $f(\mathbf{k}, \mathbf{R}, T)$ die verschobene Verteilungsfunktion

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, T) = f(\mathbf{k} + \mathbf{k}_\mathrm{D}, \mathbf{R}, T) \;, \tag{5.46}$$

so gilt für diese offenbar stets die Randbedingung

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{R}_\mathrm{B}, T) \stackrel{!}{=} f_\mathrm{F}(\mathbf{k}) \;. \tag{5.47}$$

Damit kann stets nach dem gleichen Funktionensystem entwickelt werden. Der Preis, den man hierfür zu zahlen hat, ist die Tatsache, daß die Streumatrixelemente jetzt von $\mathbf{k}_\mathrm{D}$ abhängen.

Die Bewegungsgleichung für diese Verteilungsfunktion erhält man aus (5.30) durch die Ersetzungen $\mathbf{k} \to \mathbf{k} + \mathbf{k}_\mathrm{D}$ und (5.46):

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D})}{m}\,\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\right]\hat{f}(\mathbf{k},\mathbf{R},T)\\
&\quad + \frac{1}{\hbar}\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,\hat{f}(\mathbf{k}',\mathbf{R},T)\left[U(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R}) + U_\mathrm{ext}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{R})\,g(T)\right]\\
&= [1-\hat{f}(\mathbf{k},\mathbf{R},T)]\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,M^2_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}\,\hat{f}(\mathbf{k}',\mathbf{R},T)\;\cdot\\
&\qquad \cdot\Big[(N_0+1)\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_\mathrm{D}}+\omega_0) + N_0\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_\mathrm{D}}-\omega_0)\Big]\\
&\quad -\hat{f}(\mathbf{k},\mathbf{R},T)\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,M^2_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}\,[1-\hat{f}(\mathbf{k}',\mathbf{R},T)]\;\cdot\\
&\qquad \Big[(N_0+1)\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_\mathrm{D}}-\omega_0) + N_0\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_\mathrm{D}}+\omega_0)\Big]\,. \qquad (5.48)
\end{aligned}$$

Ohne Streuterme macht sich die Verschiebung also lediglich im Driftoperator $\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D})\partial_\mathbf{R}/m$ bemerkbar. Die Verschiebung der k-Argumente der Energien in den δ–Funktionen der Energieerhaltung führt zu der Abhängigkeit der Streumatrixelemente von der Driftgeschwindigkeit $\mathbf{k}_\mathrm{D}$. Schließlich ist noch zu berücksichtigen, daß die Randbedingungen jetzt lauten:

$$\hat{f}(\mathbf{k},0,T) = f_\mathrm{F}(\mathbf{k}) \quad \text{für} \quad k_z - k_\mathrm{D} \geq 0\,, \qquad (5.49)$$

$$\hat{f}(\mathbf{k},L,T) = f_\mathrm{F}(\mathbf{k}) \quad \text{für} \quad k_z - k_\mathrm{D} < 0\,. \qquad (5.50)$$

Insgesamt ist hiermit ein praktikabler Weg beschrieben, wie selbstkonsistente Randbedingungen erreicht werden können.

5.6.2 Selbstkonsistenz des Potentials

Auch das Potential entlang der Barrierenstruktur unterliegt einer Selbstkonsistenzbedingung. Die Elektronenverteilung ist nämlich im allgemeinen nicht gleich der Verteilung der positiven Donatorstellen, die im wesentlichen die Elektronen im System zur Verfügung gestellt haben. Infolgedessen gibt es lokal von Null verschiedene Gesamtladungsdichten, was zu einem induzierten Potential ϕ_ind führt. Dieses ist zum Stufenpotential der Barrierenstruktur $U(\mathbf{R})$ sowie dem externen Potential $\phi_\mathrm{ext}(\mathbf{R}T)$ zu addieren. Das induzierte Potential muß dabei der *Poisson–Gleichung* genügen:

$$\mathbf{\Delta}\phi_\mathrm{ind}(\mathbf{r},T) = \frac{-1}{\varepsilon_0\varepsilon}\,\rho(\mathbf{r},T)\,. \qquad (5.51)$$

Die Gesamtladung ergibt sich zu:

$$\rho(\mathbf{r},T) = e\big(p(z,T) - n(z,T)\big)\,. \qquad (5.52)$$

Hier wurde bereits berücksichtigt, daß in unserem System die Ladungsdichte nur von der z-Komponente abhängen kann. Außerdem soll für den positiven Ladungshintergrund der Donator–Ionen $p(z,T)$ keine kinetische Gleichung gelöst werden. Diese Ladungsdichte wird so gewählt, daß sie die Elektronendichte kompensiert und innerhalb der Pufferschichten vor und hinter den Barrieren homogen verteilt ist. Das bedeutet, daß insgesamt stets Ladungsneutralität gewährleistet ist. In der Poissongleichung wurde durch eine statische dielektrische Konstante außerdem der Matrialeinfluß auf die Coulomb–Wechselwirkung pauschal berücksichtigt.

Das Potential der äußeren Spannung ist nicht in (5.51) einzubeziehen. Die Ladungen, die diesen Potentialverlauf verursachen, liegen nämlich außerhalb des Systems. Es wird angenommen, daß die Spannungsquelle so stabil ist, daß sie den Spannungsabfall unabhängig von der Dynamik des Systems aufrecht erhält.

Die Lösung der Laplace–Gleichung ist im dreidimensionalen Fall gegeben durch:

$$\phi_{\text{ind}}(\mathbf{r},T) = \int d^3r' \, \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r}',T) \; . \tag{5.53}$$

Im speziellen Fall, daß die Ladungsdichten nur von den z-Komponenten abhängen, ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\phi_{\text{ind}}(\mathbf{r},T) &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon} \int d^3r' \, \frac{e(p(z',T) - n(z',T))}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \\
&= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon} \int dz' \int dk_z \, e^{ik_z(z-z')} \frac{4\pi}{k_z^2} \, e\big(p(z',T) - n(z',T)\big) \\
&= \frac{1}{2\varepsilon_0\varepsilon} \int dz' \, e\big(p(z',T) - n(z',T)\big) \lim_{\delta\to 0} \left[\frac{e^{-\delta|z-z'|}}{\delta} - \frac{1}{\delta}\right] \\
\phi_{\text{ind}}(z,T) &= -\frac{1}{2\varepsilon_0\varepsilon} \int dz' \; |z-z'| \, e\big(p(z',T) - n(z',T)\big) \, .
\end{aligned} \tag{5.54}$$

In der vorletzten Zeile wurde davon Gebrauch gemacht, daß die Gesamtladung verschwindet. Damit ist beschrieben, wie aus der elektronischen Ladungsdichte das induzierte Potential bestimmt wird. Dieses ist dann in der Bewegungsgleichung für die Verteilungsfunktion zum externen Potential $\phi_{\text{ext}}(z,T)$ zu addieren und beeinflußt wiederum die Dynamik der Verteilungsfunktion.

Das schon im vorigen beschriebene Vorgehen, die Bewegungsgleichung aufzuintegrieren, liefert auch hier die Möglichkeit, die Selbstkonsistenzbedingung zu erfüllen, indem man von einer selbstkonsistenten Lösung startet und bei jedem Zeitschritt das induzierte Feld neu bestimmt. Eine selbstkonsistente Lösung für das induzierte Potential ist aber auch im spannungsfreien Fall nicht trivial, denn, wie die Rechnungen zeigen werden, häufen sich auch in diesem Fall vor den Barrieren Elektronen an. Dieser Effekt ist aber relativ klein, so daß es zumindest eine gute Näherung darstellt, das induzierte Potential in diesem Fall zu Null zu setzen.

5.7 Bewegungsgleichungen und Ergebnisse

5.7.1 Bewegungsgleichung der Entwicklungskoeffizienten

Nachdem nun auch die Selbstkonsistenzbedingungen an die Verteilungsfunktion, das induzierte Potential sowie die Randverteilung beschrieben sind, kann die Bewegungsgleichung (5.48) im gewählten Funktionensystem (5.41) entwickelt werden. Durch Projektion auf die Basisfunktionen ϕ_n erhält man die Bewegungsgleichungen für die Koeffizienten f_n:

$$
\begin{aligned}
&\left[\frac{\partial}{\partial T}+\frac{\hbar(k_z+k_{\mathrm{D}})}{m}\frac{\partial}{\partial z}\right]f_n(k_z,z,T)\\
&\quad+\ \frac{1}{\hbar}\int\frac{dk_z'}{2\pi}\,a_{nm}(k_z,k_z')\ f_m(k_z,z,T)\\
&\qquad\qquad\cdot\left[U(k_z-k_z',z)\ +U_{\mathrm{ext}}(k_z-k_z',z)\,g(T)+U_{\mathrm{ind}}(k_z-k_z',z,T)\right]\\
&=\int\frac{dk_z'}{2\pi}\sum_m\left[(N_0+1)\,W_{nm}^{++}(k_z,k_z')\ +N_0\,W_{nm}^{+-}(k_z,k_z')\right]f_m(k_z',z,T)\\
&\quad-\ \sum_m f_m(k_z,z,T)\int\frac{dk_z'}{2\pi}\left[(N_0+1)\,W_{nm}^{--}(k_z,k_z')\ +N_0\,W_{nm}^{-+}(k_z,k_z')\right]\\
&\quad+\ \sum_l f_l(k_z,z,T)\int\frac{dk_z'}{2\pi}\sum_m\left[W_{nlm}^{-}(k_z,k_z')\ -W_{nlm}^{+}(k_z,k_z')\right]f_m(k_z',z,T)
\end{aligned}
\tag{5.55}
$$

Die Matrix ist entsprechend (5.34) gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
a_{nm}(k_z,k_z') &= \lambda^2\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\ \frac{\phi_n(k,k_z)}{\phi_0(k,k_z)}\,\phi_0(k,k_z')\,\phi_m(k,k_z')\\
&= \lambda^2\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\ \phi_0^2(k,k_z')\,p_n(k,k_z)\,p_m(k,k_z')\ .
\end{aligned}
\tag{5.56}
$$

Man beachte, daß dies nicht die Orthogonalitätsbeziehung (5.32) für die Polynome ist, denn die Polynome $p_n(k,k_z)$ und $p_m(k,k_z')$ gehören zu verschiedenen k_z und sind mithin nicht orthogonal.

Auf eine explizite Angabe der Matrixelemente für die LO–Phononstreuung wird an dieser Stelle verzichtet. Diese befinden sich einschließlich ihrer Ableitung im Anhang G. Durch die Wahl der Entwicklungsfunktionen ist klar, daß die Streuterme die angegebene Struktur haben müssen. Die beiden ersten Zeilen der rechten Seite der Bewegungsgleichung beschreiben dabei diejenigen Streuprozesse, die linear in der elektronischen Verteilungsfunktion sind. Die letzte Zeile beschreibt die quadratischen Terme. Diese hängen nicht mehr von der Phononbesetzung N_0 ab. Aus

Symmetriegründen können hier nämlich nur diejenigen Streuprozesse beitragen, die durch spontane Emission eines Photons getrieben werden.

Für den Prozeß der LO–Phonon–Emission gibt es eine energetische Schwelle. Da die Phononfrequenz ω_0 endlich ist, muß der Zustand, aus dem das Elektron unter Emission eines Phonons in einen niedrigeren Zustand übergeht, mindestens die Phononenergie $\hbar\omega_0$ besitzen, sonst ist diese Streuung verboten. Während diese Schwelle auf der Energieskala eine echte Schwelle darstellt, führt dies auf der Skala der k_z nicht zu einem Ausschluß von bestimmten k_z-Werten. Falls der Impuls k in die Radialrichtung ausreichend groß ist, ist dieser Übergang immer möglich. Allerdings nimmt die Zahl dieser Zustände mit abnehmendem k_z ab, denn dann muß k immer größere Werte annehmen. Trotzdem durchlaufen die k_z-Integrale aber tatsächlich die ganze relle Achse.

5.7.2 Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnungen

Als erstes wollen wir nun auf die selbstkonsistenten Rechnungen eingehen. Die kinetische Gleichung der Verteilungsfunktion (5.55) wurde auf der Zeitachse aufintegriert und dabei gleichzeitig die Poissongleichung für das induzierte Potential (5.54) gelöst, so daß zu jedem Zeitschritt das aktuelle induzierte Potential in die Rechnung eingeht.

Die Parameter der Tunneldiode wurden wie folgt gewählt: Die Barrieren sind 3,2 nm breit, der Topf ist 4,5 nm breit, die beiden Pufferschichten haben eine Breite von jeweils 17,5 nm. Die Barrierenhöhe beträgt 225 meV, was 60 % des Unterschiedes der Energielücke von GaAs und $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ entspricht. Die Temperatur wurde zu 300 K gewählt, die Elektronendichte am Rand beträgt $2 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$.

Bei der Aufstellung des elementaren Modells in Abschnitt 5.3 hatten wir uns von der Vorstellung leiten lassen, daß das externe Potential durch die sich vor der Barriere anhäufenden Elektronen abgeschirmt wird und deshalb im wesentlichen entlang der Barrierenstruktur abfällt. Diese Vermutung kann nun überprüft werden.

Abbildung 5.14 zeigt das selbstkonsistente Potential bei einer Spannung von 120 mV. Die durchgezogene Linie zeigt das Gesamtpotential, die gestrichelte Linie den Beitrag des induzierten Potentials. Die beschriebenen Erwartungen werden im Prinzip erfüllt. Zwar findet entlang der gesamten Struktur ein Spannungsabfall statt, jedoch ist er im Bereich der Barrieren deutlich steiler als am Rand.

Das induzierte Potential steigt vom rechten Rand her zunächst an, d. h. das externe Potential wird tatsächlich abgeschirmt. Hinter der zweiten Barriere gibt es dann nochmals einen stärkeren Spannungsabfall. Dieser ist darauf zurückzuführen, daß sich dort eine Verarmungszone der Elektronen bildet. Dadurch fällt das induzierte Potential entlang der zweiten Barriere steil ab.

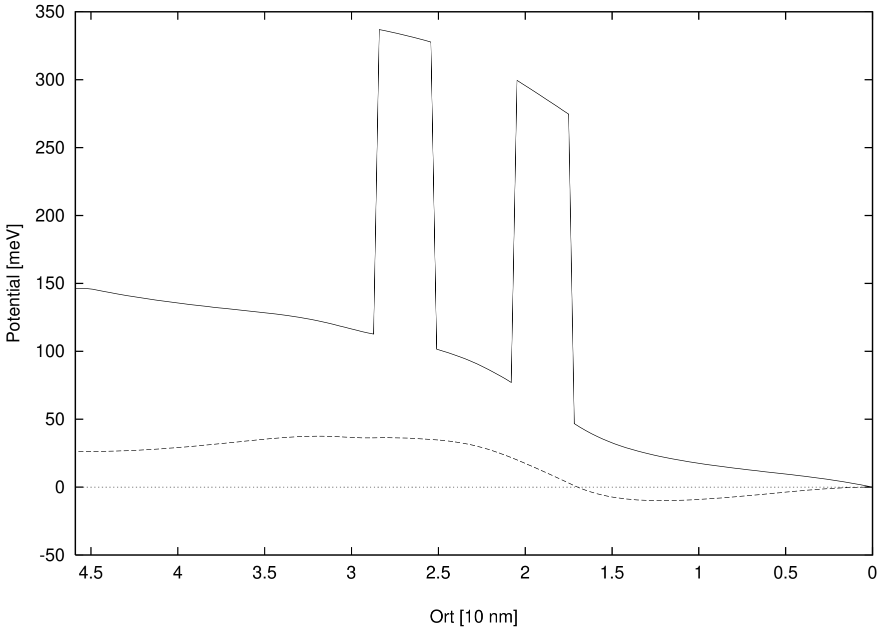


Abbildung 5.14: Selbstkonsistentes Potential bei einer externen Spannung von 120 mV entlang der Tunneldiode. Die gestrichelte Linie ist der Beitrag des induzierten Potentials.

Insgesamt ist der Potentialabfall entlang der Barriere jedoch deutlich verschieden von dem in Abbildung 5.3 angenommenen. Diese Abweichungen verstärken sich noch, wenn man zu höheren Spannungen übergeht. Zu Beginn ist das induzierte Potential im wesentlichen konstant, so daß es einen starken Potentialabfall am linken Rand gibt. Entlang der Barrierenstruktur fällt nur ein relativ kleiner Teil der Gesamtspannungsdifferenz ab.

Vergleicht man Abbildung 5.14 und Abbildung 5.15, so stellt man außerdem fest, daß im ersten Fall das induzierte Potential zu einer Erhöhung des Gesamtpotentials im Vergleich zum externen Potential führt, im zweiten Fall kommt es aber zu einer Absenkung der Gesamtpotentialdifferenz. Aufgrund des induzierten Potentials wird also der Potentialverlauf in einer nichttrivialen Weise gegenüber den Annahmen des Modells in Abschnitt 5.3 verändert. Dadurch wird die Kennlinie wesentlich beeinflußt, denn die Resonanzbedingung wird nun bei veränderten externen Spannungen angenommen.

Abbildung 5.16 zeigt eine solche Kennlinie, die unter Berücksichtigung eines selbstkonsistenten Potentials sowie selbstkonsistenter Randbedingungen berechnet wurde. Sie muß mit Abbildung 5.17 verglichen werden, der ein festes effektives Potential zugrunde liegt. Die Parameter der Tunneldiode sind gleich gewählt.

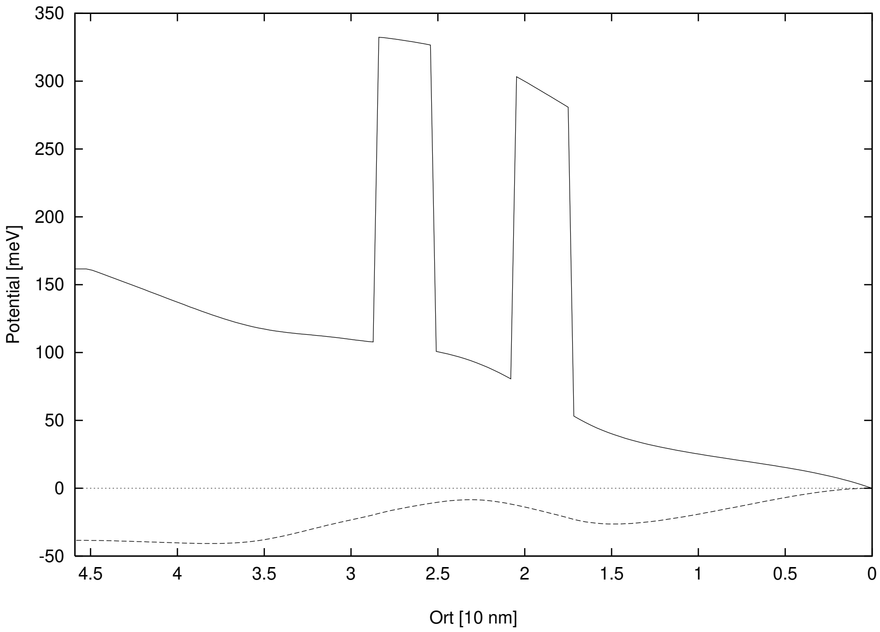


Abbildung 5.15: Selbstkonsistentes Potential bei einer externen Spannung von 220 mV entlang der Tunneldiode. Die gestrichelte Linie ist der Beitrag des induzierten Potentials.

Ein wesentlicher Effekt ist, daß die Resonanz bei sehr viel größeren externen Spannungen auftritt. Das Maximum der Strom–Spannungs–Kennlinie liegt nun bei 190 mV, wohingegen ohne selbstkonsistentes Potential das Maximum bei 125 mV liegt. Dies ist nach den obigen Betrachtungen über das selbstkonsistente Potential verständlich. Da der tatsächliche Potentialabfall entlang der Doppelbarriere deutlich kleiner ist als das externe Potential, wird die Resonanzbedingung erst bei größeren externen Feldern angenommen.

Weiterhin fällt auf, daß die Resonanz schärfer wird. Insbesondere ist der Abfall nach dem Maximum steiler als in Abbildung 5.17. Während in der Resonanz sich relativ viele Ladungsträger innerhalb des Quantentopfes befinden, häufen sie sich später wieder vor der ersten Barriere. Der Potentialabfall entlang der Doppelbarriere wird also wieder stärker, wodurch die Resonanz mit ansteigender Spannung schneller verlassen wird.

Schließlich soll noch die numerische Konvergenz diskutiert werden. Berücksichtigt man insbesondere das selbstkonsistente Potential, so hat sich gezeigt, daß bei der behandelten Barrierenstruktur mindestens 100 Stützpunkte sowohl für die Diskretisierung von k_z als auch für z benötigt werden. Andernfalls ist das Programm numerisch nicht stabil. Hier zeigt sich ein weiteres Mal, daß auf die Diskretisierung großer Wert gelegt werden muß.

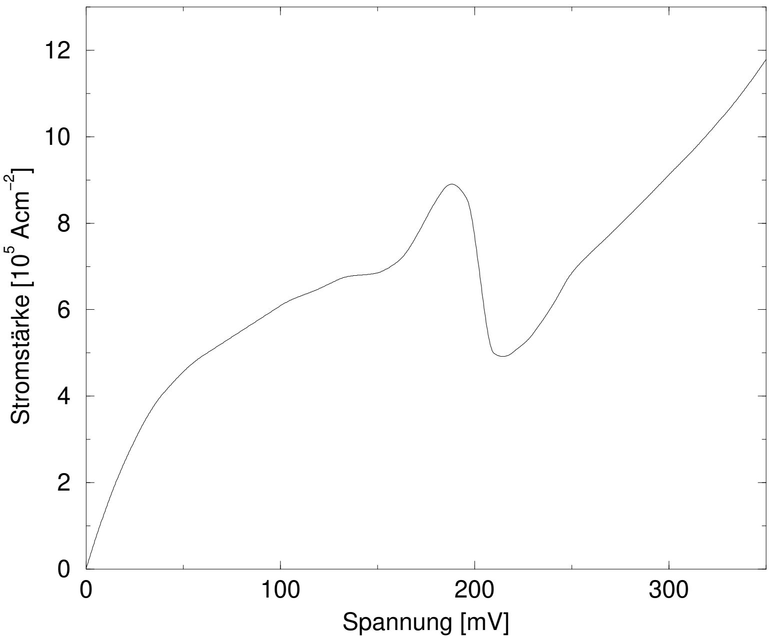


Abbildung 5.16: Strom–Spannungs–Kennlinie der resonanten Tunneldiode unter Berücksichtigung der Selbstkonsistenzbedingungen.

Weiterhin zeigt sich, daß die Wahl der Ausgangsverteilung für die Integration einen deutlichen Einfluß auf die Konvergenz in den stationären Zustand hat. Mathematisch gesehen kann man mit einer beliebigen Anfangsverteilung starten, solange die Verteilung auf den Rändern Fermi–Verteilungen sind, und gelangt zwangsläufig in den stationären Endzustand. Die Integration auf der Zeitachse liefert aber nur dann eine physikalisch sinnvolle Dynamik, wenn der Anfangszustand bereits physikalisch sinnvoll war. Die beiden unterschiedlichen Anfangszustände haben auch numerische Auswirkungen. Startet man mit einer selbstkonsistenten Verteilung und einem dazugehörigen Potential aus einer vorangehenden Rechnung, dann erreicht man den stationären Endzustand wesentlich schneller. Das bedeutet, daß nicht selbstkonsistente Anfangsbedingungen eine Relaxationszeit in den stationären Endzustand erzeugen, die über einer realistischen Zeitspanne für diesen Vorgang liegt. Realistische Relaxationszeiten, wie sie in unseren Rechnungen auftraten, lagen typischerweise bei 0,7 ps, wenn die Einschaltzeit 50 fs betrug.

Die Selbstkonsistenz der Randbedingungen spielt bei den hier verwendeten Parametrisierungen keine große Rolle. Wie man aus Gleichung (5.45) erkennt, kann man aus den erhaltenen Stromdichten und der verwendeten Ladungsdichte am Rand die Größenordnung der Driftgeschwindigkeit überschlagen. Man kommt dabei auf Werte in der Größenordung von $k_\mathrm{D} \sim 0,05/(10\mathrm{nm})$, was sehr klein ist im Vergleich zur Breite der Verteilung bei 300 K. Erst wenn man zu kleineren Dichten und ho-

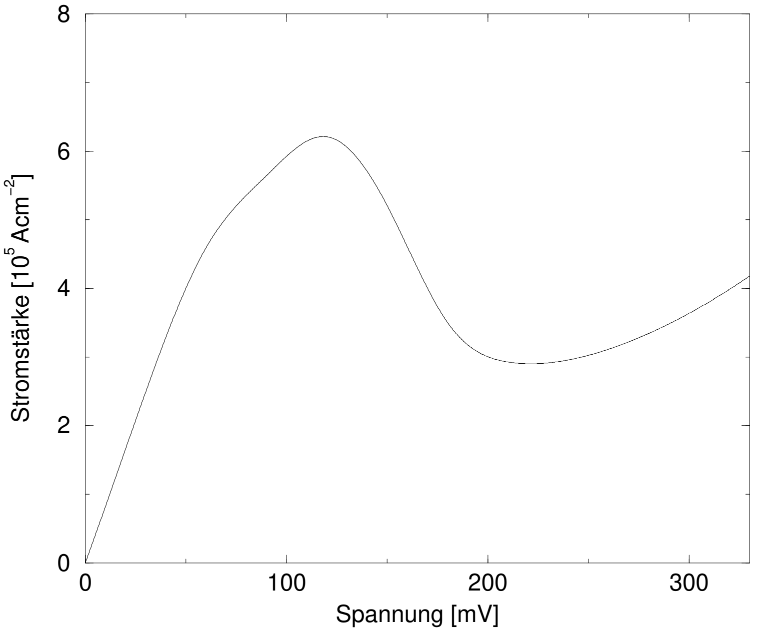


Abbildung 5.17: Kennlinie ohne Berücksichtigung von Selbstkonsistenzbedingungen. Die Parameter der Tunneldiode sind die gleichen wie für Abbildung 5.16.

hen Spannungen und damit Stromstärken übergeht, spielt die Selbstkonsistenz der Randbedingungen eine wichtigere Rolle.

5.7.3 Ergebnisse der Elektron–Phonon–Kopplung

Kommen wir nun zu den Ergebnissen, die die Elektron–Phonon–Kopplung berücksichtigen. Abbildung 5.18 zeigt die Verteilungsfunktion bei verschwindender äußerer Spannung. In der Nähe der Barrieren erhält man ein ähnliches Verhalten wie in Abbildung 5.6. Am Rand aber ergeben sich Abweichungen, die nach einer Interpretation verlangen.

Man erkennt, daß der in die Reservoire einlaufende Teil der Verteilung eine Seitenbande aufweist. Diese wird durch die Elektron–Phonon–Wechselwirkung verursacht. Da wir nur LO–Phononen–Streuung betrachten, gibt es eine energetische Schwelle, unter die die Elektronen durch Emission eines Phonons nicht gelangen können, nämlich gerade die LO–Phonon–Energie. Wie in Abschnitt 5.7.1 erläutert wurde, stellt dies auf der Skala der longitudinalen Impulse k_z keine echte Schwelle dar. Da aber die Elektronenverteilung auch entlang der radialen k-Richtung beschränkt ist, haben die meisten Elektronen in der Seitenbande einen zu kleinen Gesamtimpuls, um noch ein LO–Phonon emittieren zu können. Durch die LO–Phonon–Kopplung

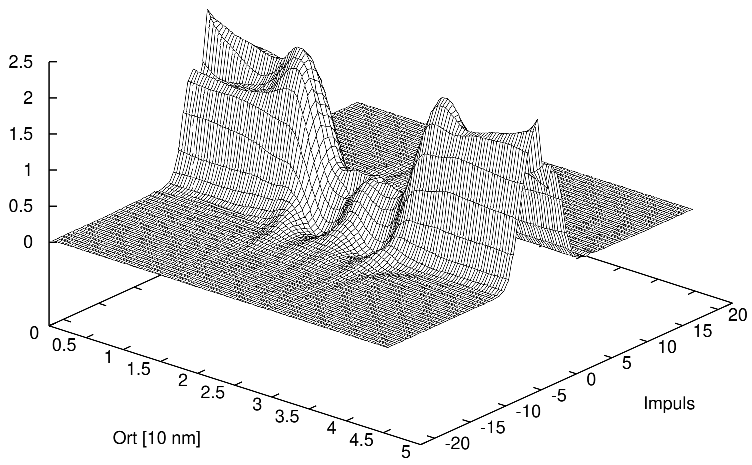


Abbildung 5.18: Verteilungsfunktion unter Berücksichtigung der Elektron–Phonon–Wechselwirkung. Es war keine externe Spannung angelegt.

können heiße Elektronen also nur bis in die Nähe der LO–Phonon–Energie abgekühlt werden.

Wie verträgt sich dies aber mit der Annahme, daß die Fermiverteilung die Gleichgewichtsverteilung auf dem Rand ist? In der Tat erfüllt auch die LO–Phonon–Kopplung die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts. Setzt man in Gleichung (5.30) für die Verteilungsfunktion eine Fermi–Verteilung ein, so verschwindet der Streuterm gerade. Die Fermiverteilung *ist* also die Gleichgewichtsverteilung. Dies gilt nicht nur für die Elektron–LO–Phonon–Kopplung sondern allgemein für die Elektron–Phonon–Kopplung und auch für die Coulomb–Streuung der Elektronen [81].

Durch die Barrierenstruktur werden jedoch hochenergetische Elektronen in der Nähe der Barrieren erzeugt, wie wir schon an unserem elementaren Modell gesehen hatten (vgl. Abbildung 5.6 und Erklärung dazu). Diese können aber durch LO–Phononen nicht zu einer Fermi–Verteilung abgekühlt werden, da diese nur einen festen Energieübertrag bei einer Streuung zuläßt. Damit die Verteilung zum Rand hin tatsächlich zu einer Fermi–Verteilung relaxiert, müssen auch Streumechanismen berücksichtigt werden, die kleine Energieüberträge ermöglichen. Hier ist insbesondere die Coulomb–Streuung zu nennen, die zwar zu keiner Abkühlung führt, aber die Impulse so umverteilt, daß durch LO–Phononstreuung eine effektive Abkühlung in die Fermi–Verteilung erfolgen kann. Anschaulich gesprochen verteilt die Coulomb–Streuung die Elektronen in der Seitenbande um und glättet damit die Verteilung.

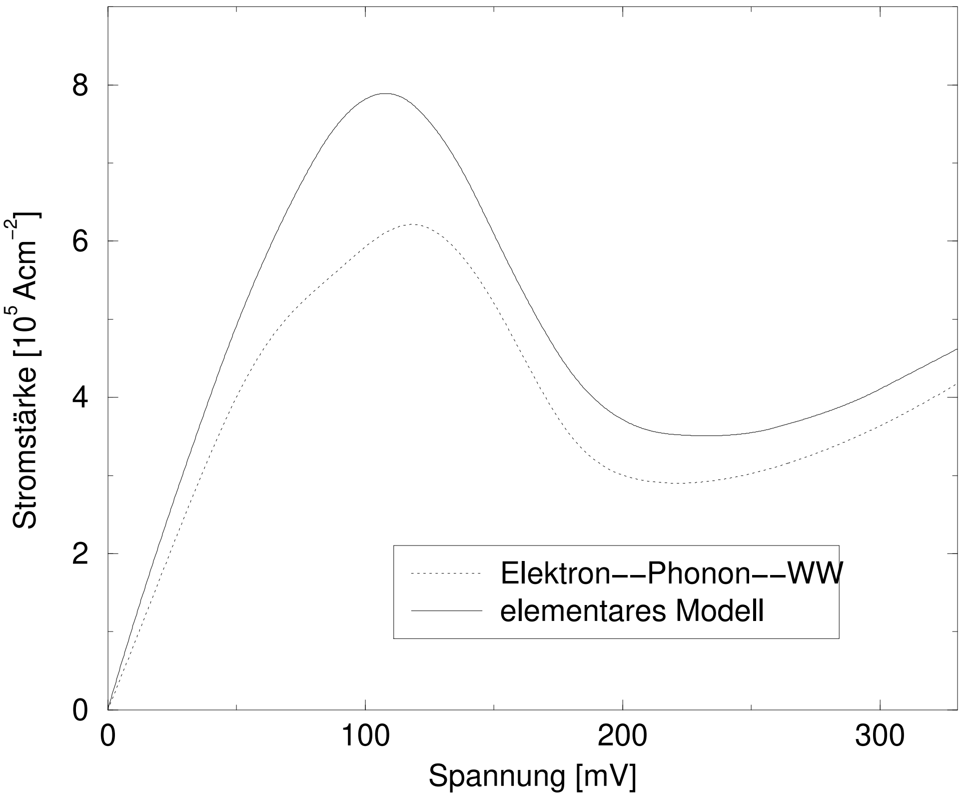


Abbildung 5.19: Vergleich der berechneten Kennlinien inklusive Elektron–Phonon–Wechselwirkung und im elementare Modell.

Diejenigen Elektronen, die durch Coulomb–Streuung zu größeren Impulsen gelangen, können dann durch die LO–Phononstreuung wieder abkühlen.

Nach dieser Erklärung ist deutlich geworden, daß das erzielte Ergebnis einer Seitenbande im Rahmen des Modells physikalisch richtig ist. Andererseits macht es auch deutlich, daß zu einer quantitativen Bestimmung des Einflusses von Streumechanismen notwendig ist, auch die Coulomb–Streuung in die Rechnungen einzubeziehen. Dies stellt eine sehr aufwendige Aufgabe dar, die in der Zukunft angegangen werden muß. Abbildung 5.19 zeigt die Kennlinie der Diode, wie sie sich in diesem Modell ergibt. Zum Vergleich ist die entsprechende Kennlinie aus dem elementaren Modell eingezeichnet. Die Resonanz ist deutlich breiter geworden. Zusätzlich steigt die Stromstärke für alle Spannungen an.

Die Verbreiterung der Resonanz ist ein grundsätzlich zu erwartender Effekt von Streumechanismen. Der Anstieg der Stromstärke in allen Bereichen erklärt sich, weil die Elektronen durch Absorption von Phononen Energie gewinnen und dann einfacher durch die Barrierenstruktur tunneln.

Obwohl das Modell, wie erklärt, noch um die Coulomb–Streuung erweitert werden sollte, können wesentliche Effekte bereits damit beschrieben werden, und die numerische Handhabbarkeit bleibt erhalten.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Nichtgleichgewichts–Vielteilchen–Dynamik in verschiedenen niederdimensionalen Halbleitersystemen untersucht. Es wurde dabei besonders auf die Unterschiede zwischen *kohärenter* und *inkohärenter* Dynamik eingegangen.

Kohärenz wird dem Vielteilchensystem im Halbleiter in optischen Experimenten durch den anregenden Laserpuls aufgeprägt. Das bedeutet, daß die Phasenbeziehungen und damit Korrelationen zwischen den angeregten Ladungsträgern für die Dynamik relevant sind. Die Korrelationen werden durch Streuprozesse abgebaut, wodurch die Dynamik nach und nach von einer kohärenten zu einer inkohärenten Dynamik übergeht. Im kohärenten Regime ist die Coulomb–Streuung der die Korrelationen dominierende Streumechanismus. Dies wurde anhand einer Rechnung demonstriert, in der nicht nur exzitonische sondern auch biexzitonische Korrelationen berücksichtigt wurden. Nur auf dieser Basis konnte ein entsprechendes Vierwellenmisch–Experiment eines Halbleiters im starken Magnetfeld qualitativ *und* quantitativ verstanden werden.

Die Verwendung eines starken Magnetfeldes macht es in diesem Experiment möglich, den Einfluß von Coulomb–Korrelationseffekten zu verstärken, da durch das Magnetfeld der Wechselwirkungsbereich der Elektronen senkrecht zum Magnetfeld kontinuierlich bis zu mesoskopischen Längenskalen eingeschränkt werden kann. Obwohl die betrachteten Anregungsbedingungen so gewählt waren, daß ein gebundenes Biexziton nicht erzeugt werden konnte, wurde belegt, daß auch das Streukontinuum der Biexzitonen einen wesentlichen Beitrag zur nichtlinearen Dynamik des Systems liefert. Das vollständige Vierteilchen–Problem eines Halbleiters im starken Magnetfeld wurde dabei erstmals gelöst.

Grundlage für die Beschreibung dieses Experimentes war der Dichtematrix–Formalismus. Die Kohärenz des Systems und die Annahme geringer Anregungsdichten erlauben es aus theoretischer Sicht, die durch die Coulomb–Wechselwirkung erzeugte unendliche Hierarchie gekoppelter Korrelations–Funktionen abzubrechen und sich durch Faktorisierung auf wenige Korrelations–Funktionen zu beschränken.

Gleichzeitig wurden damit auch die Grenzen des Dichtematrix–Formalismus aufgezeigt. Diese liegen insbesondere bei der Beschreibung hoher Anregungsdichten und des Übergangs zur inkohärenten Dynamik. Dort hat sich die Theorie der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen als geeigneter für eine Beschreibung erwiesen. Der Zusammenhang der beiden Theorien für den Fall kohärenter optischer Anregungen wurde diskutiert und Ansätze für eine einheitliche Theorie wurden auf der Grundlage der Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen gegeben.

Die inkohärente Vielteilchendynamik wurde in der vorliegenden Arbeit anhand des elektronischen Transportes in Halbleiterheterostrukturen diskutiert. Dort geschieht die äußere Anregung durch das Einschalten einer Spannung. Die relevante Dynamik ist dadurch wesentlich langsamer als die nach einer optischen Anregung, so daß von Anfang an eine inkohärente Dynamik vorliegt. Die Nichtgleichgewichts–Greenschen–Funktionen bieten hier die Methode der Wahl zur mikroskopischen Beschreibung des Systems.

Ausgehend von detaillierten numerischen Untersuchungen zur Diskretisierung der Bewegungsgleichung für die elektronische Verteilungsfunktion konnte gezeigt werden, daß es für genügend feine Diskretisierungen nicht mehr möglich ist, die stationäre Lösung des Systems aus einer Inversion der Wechselwirkungsmatrix zu bestimmen.

Vielmehr bietet das Ernstnehmen der Zeitabhängigkeit der Bewegungsgleichung und deren direkte Aufintegration in der Zeit die Möglichkeit, Konvergenz bezüglich der Diskretisierung zu erreichen. Ein weiterer Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, daß Selbstkonsistenzbedingungen, wie sie für das Potential entlang der Struktur oder für die Randbedingungen gelten, zwanglos berücksichtigt werden können. Es läßt sich auf diese Weise sogar die tatsächliche Dynamik des Systems berechnen.

Außerdem wurde gezeigt, wie die Streuung der Ladungsträger mit LO–Phononen in das Modell eingebaut werden kann. Die Elektron–LO–Phonon–Streuung erzwingt es, in der Verteilungsfunktion für ein Schichtsystem, dessen räumliche Struktur nur in der Wachstumsrichtung veränderlich ist, zusätzlich den Impuls in die Radialrichtung zu berücksichtigen. Um das Modell dennoch numerisch handhabbar zu halten, wurde ein geeignetes Funktionensystem abgeleitet, das es gestattet, die Abhängigkeit von der Radialkoordinate nur durch wenige Entwicklungskoeffizienten zu beschreiben. Dies ist ein wichtiges Ergebnis dieser Arbeit.

Folgende drei Aspekte sind für eine weitergehende Untersuchung der in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Themen von Bedeutung:

(i) Die Ergebnisse der Transport–Rechnungen unter Berücksichtigung der Phonon–Streuung zeigen, daß es außerdem nötig ist, auch die Coulomb–Streuung in die Rechnungen einzubeziehen, da ansonsten keine vollständig konsistente und quantitative Erklärung der Systeme erreicht werden kann. Das Zusammenspiel von Coulomb- und Phonon–Streuung läßt die Verteilung in den Tunnelstrukturen erst gegen die Fermiverteilung des Randes relaxieren. Hierfür muß ein geeigneter Zugang auf der Grundlage der Greenschen Funktionen entwickelt werden. Die Coulomb–Streuung durch eine Relaxationszeit–Näherung zu beschreiben, hilft dabei nur wenig, da man hierbei die Kenntnis der relaxierten Verteilung unterstellen muß. Mit einer Coulomb–Streutheorie auf der Grundlage des Green's–Funktions–Formalismus hätte man dann die wesentlichen Streuprozesse behandelt und könnte ein quantitatives Verständnis der Bauelemente erreichen.

(ii) Für den Bereich der optischen Experimente kann man auf der Grundlage der erreichten Ergebnisse zur Beschreibung anderer Anregungsgeometrien übergehen, in denen dann auch gebundene Biexzitonen angeregt werden können. Durch Anregung des gebundenen Biexzitons als neuer Resonanz ist eine Verstärkung der Vielteilchen–Effekte zu erwarten. Als interessanter Nebeneffekt eröffnet die vorgestellte Entwicklung der Vierteilchen–Korrelation auch einen alternativen Weg, die Biexziton–Bindungsenergie numerisch zu bestimmen. Das läßt interessante Vergleiche zu zahlreichen vorliegenden Experimenten und Rechnungen zu.

(iii) Wesentlich für das physikalische Verständnis des Übergangsbereiches von kohärenter zu inkohärenter Vielteilchen–Dynamik ist die Ableitung einer einheitlichen Theorie die beide Grenzfälle beschreibt und insbesondere auch Elektron–Phonon–Streuung beinhalten muß. Dies gilt sowohl für die Polarisationsfunktion als auch für die biexzitonische Korrelation. Der Nichtgleichgewichts–Green's–Funktions–Formalismus stellt dazu den geeigneten Ausgangspunkt dar. Eine solche Theorie liefert dann ein einheitliches Verständnis des Zerfalls von Kohärenz und führt auf ein theoretisches Interpolationsschema zwischen den beiden in dieser Arbeit vorgestellten Grenzfällen von kohärenter und inkohärenter Dynamik.

Anhang A

Ableitung der Einteilchen–Selbstenergie

In die Bewegungsgleichung (2.31) für die Einteilchen–Greensche–Funktion geht eine Zweiteilchenfunktion in die Bewegungsgleichungen ein, nämlich:

$$\frac{\langle T_c \left[\hat{\psi}(\bar{1})\, \hat{\psi}^\dagger(\bar{2}) + \hat{\psi}^\dagger(\bar{2})\, \hat{\psi}(\bar{1})\right] \rangle}{\langle S_-^\dagger\, S_+ \rangle} \,. \tag{A.1}$$

Würde man die Hartree-Fock–Näherung anwenden, würde man diese Funktion faktorisieren in ein Produkt von Einteilchen–Greenschen–Funktionen. Unser Ziel ist es aber, eine exakte Gleichung für die Einteilchen–Greensche–Funktion abzuleiten. Dies kann erreicht werden, wenn man die Greenschen Funktionen (2.16) als *erzeugende Funktionale* benutzt; das bedeutet, daß die Zweiteilchenfunktionen als Variationsableitungen der Einteilchenfunktionen bezüglich des externen Potentials ausgedrückt werden können. Betrachten wir z. B. die Variationsableitung von G^{++} bezüglich $\phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}_3 t_3 +) \equiv \phi_{\text{ext}}(3+)$, also eines Zeitargumentes auf dem oberen Zweig der Zeitkontur C. Per Konstruktion wirkt die Variationsableitung nur auf den S_+-Operator.

$$\begin{aligned} \frac{\delta G^{++}(12)}{\delta \phi_{\text{ext}}(3+)} &= -\frac{i}{\hbar} \langle S_-^\dagger \left[T_+ \frac{\delta S_+}{\delta \phi_{\text{ext}}(3+)}\, \bar{\psi}(1)\, \bar{\psi}^\dagger(2) \right] \rangle \frac{1}{\langle S_-^\dagger\, S_+ \rangle} \\ &- G^{++}(12) \langle S_-^\dagger \frac{\delta S_+}{\delta \phi_{\text{ext}}(3+)} \rangle \frac{1}{\langle S_-^\dagger\, S_+ \rangle} \end{aligned} \tag{A.2}$$

Aus dem analytischen Ausdruck für den Zeitentwicklungsoperator (2.7) läßt sich die Variationsableitung von S_+ bestimmen:

$$\frac{\delta S_+}{\delta \phi_{\text{ext}}(3+)} = -\frac{i}{\hbar}\, T_+\, S_+\, \bar{\psi}^\dagger(3)\, \bar{\psi}(3) \,. \tag{A.3}$$

Setzt man dieses Ergebnis in (A.2) ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\delta G^{++}(12)}{\delta\phi_{\text{ext}}(3+)} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle S_-^\dagger \left[T_+\, S_+\, \bar\psi^\dagger(3)\,\bar\psi(3)\,\bar\psi(1)\,\bar\psi^\dagger(2)\right]\rangle \frac{1}{\langle S_-^\dagger\, S_+\rangle} \\ &\quad + \frac{i}{\hbar}\, G^{++}(12)\,\langle S_-^\dagger \left[T_+\, S_+\, \bar\psi^\dagger(3)\,\bar\psi(3)\right]\rangle \frac{1}{\langle S_-^\dagger\, S_+\rangle} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{\langle T_{\text{c}}\,\bar\psi^\dagger(3^+ +)\,\bar\psi(3+)\,\bar\psi(1+)\,\bar\psi^\dagger(2+)\rangle}{\langle S_-^\dagger\, S_+\rangle}\right] \\ &\quad + G^{++}(12)\, G^{++}(33^+)\,. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Entsprechende Ergebnisse für die anderen Greenschen Funktionen erhält man unter Benutzung von:

$$\frac{\delta S_-^\dagger}{\delta\phi_{\text{ext}}(3-)} = \frac{i}{\hbar}\, T_-\, S_-^\dagger\, \bar\psi^\dagger(3)\,\bar\psi(3)\,. \tag{A.5}$$

Damit lassen sich die Beziehungen der Zweiteilchenfunktionen zusammenfassend als Funktionalableitungen von Einteilchenfunktionen schreiben:

$$\frac{\delta G(\bar 1\bar 2)}{\delta\phi_{\text{ext}}(\bar 3)} = -\frac{i}{\hbar}\, b_3\left[-\frac{i}{\hbar}\, b_2 \frac{\langle T_{\text{c}}\,\hat\psi^\dagger(\bar 3^+)\,\hat\psi(\bar 3)\,\hat\psi(\bar 1)\,\hat\psi^\dagger(\bar 2)\rangle}{\langle S_-^\dagger\, S_+\rangle}\right] + G(\bar 1\bar 2)\, G(\bar 3\bar 3^+)\,. \tag{A.6}$$

Mit diesem Ergebnis kann man die Bewegungsgleichung (2.35) jetzt schreiben als:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_1}\, G(\bar 1\bar 2) &= \delta(\bar 1 - \bar 2) + \left[\hat h(\bar 1) + \phi_{\text{eff}}(\bar 1)\right] G(\bar 1\bar 2) \\ &\quad + i\hbar b_1 \int d\bar 3\, v(\bar 1^+ - \bar 3)\,\frac{\delta G(\bar 1\bar 2)}{\delta\phi_{\text{ext}}(\bar 3)}\,. \end{aligned} \tag{A.7}$$

Dabei haben wir bereits benutzt, daß die Coulomb–Wechselwirkung diagonal in den Zweigindizes ist, und daß man deshalb ein effektives Potential wie folgt einführen kann:

$$\phi_{\text{eff}}(\bar 1) = \phi_{\text{ext}}(\bar 1) - i\hbar b_1 \int d\bar 3\, v(\bar 1 - \bar 3)\, G(\bar 3\bar 3^+)\,. \tag{A.8}$$

Da $-i\hbar e b_1 G(\bar 3\bar 3^+)$ gerade die Ladungsdichte darstellt, beschreibt der zweite Term in dieser Gleichung das durch diese Dichte induzierte Potential, das auch als *Hartree–Potential* bezeichnet wird. Austausch- und Korrelationseffekte werden durch die Funktionalableitung beschrieben. Um eine geschlossene Gleichung für die Greensche Funktion zu erhalten, muß noch ein Ausdruck für die Variationsableitung gefunden werden. Dazu geht man auf die Variationsableitung der inversen Greenschen Funktion über. Aus der trivialen Identität

$$G(\bar 1\bar 2) = \int d\bar 3\bar 4\, G(\bar 1\bar 3)\, G^{-1}(\bar 3\bar 4)\, G(\bar 4\bar 2) \tag{A.9}$$

erhält man

$$\frac{\delta G(\bar{1}\bar{2})}{\delta\phi_{\rm ext}(\bar{3})} = -\int d\bar{4}\bar{5}\, G(\bar{1}\bar{4})\, \frac{\delta G^{-1}(\bar{4}\bar{5})}{\delta\phi_{\rm ext}(\bar{3})}\, G(\bar{4}\bar{2})\,. \tag{A.10}$$

Damit ist nun klar, daß die Selbstenergie wie in Kapitel 2 eingeführt werden kann:

$$\Sigma(\bar{1}\bar{2}) = -i\hbar b_1 \int d\bar{3}\bar{4}\, v(\bar{1}^+ - \bar{3})\, G(\bar{1}\bar{4})\, \frac{\delta G^{-1}(\bar{4}\bar{2})}{\delta\phi_{\rm ext}(\bar{3})}\,. \tag{A.11}$$

Anhang B

Bloch–Elektron im Magnetfeld

Der allgemeine Hamilton–Operator für ein Bloch–Elektron im Magnetfeld ist gegeben durch

$$\hat{h} = \frac{1}{2m_0}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \equiv \hat{h}_0 + \hat{h}_{\text{int}}\,, \tag{B.1}$$

wobei $\hat{h}_0$ den ungestörten Hamilton–Operator der Bloch–Elektronen beschreibt und $\hat{h}_{\text{int}}$ die Störung durch das Magnetfeld.

Im allgemeinen kann die Lösung dieses Problems extrem schwierig sein, insbesondere wenn auch Zustände in hochgelegenen Bändern von Bedeutung sind. Wir interessieren uns aber lediglich für optische Übergänge in der Nähe der Absorptionsschwelle. Deshalb können wir das Problem durch die sogenannte Effektivmassen–Näherung erheblich vereinfachen. Diese besteht darin, daß in der Nähe der Bandkante die Energie–Dispersion $E_n(\mathbf{k})$ durch einen Paraboloiden genähert werden kann. Es gilt dann:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2}\sum_{ij}\left(\frac{1}{m_e}\right)_{ij} k_i\, k_j, \tag{B.2}$$

mit dem inversen Massentensor $(m_e^{-1})_{ij}$, der für eine vorgegebene Richtung eine *effektive* Elektronenmasse beschreibt. Im folgenden wollen wir annehmen, daß es sich um ein isotropes, nicht entartetes Band handelt, daß der Tensor also durch eine Zahl m_e beschrieben werden kann.

Wählen wir das Magnetfeld entlang der z-Richtung und das Vektorpotential in der Landau–Eichung, also $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, dann nimmt der Wechselwirkungs–Operator in (B.1) folgende Form an:

$$\hat{h}_{\text{int}} = \frac{eB}{m_0}\,p_y x + \frac{e^2B^2}{2m_0}\,x^2 = \omega_{c0}\,p_y x + \frac{m_0\omega_{c0}^2}{2}\,x^2 = \frac{\hbar}{m_0 l^2}\,p_y x + \frac{\hbar^2}{2m_0 l^2}\frac{x^2}{l^2}\,, \tag{B.3}$$

mit der Zyklotronfrequenz $\omega_{c0} = eB/m_0$ und der magnetischen Länge $l = \sqrt{\hbar/eB}$, die gerade den Radius der klassischen Zyklotronbahn beschreibt. Diese Länge ist auch für sehr große Magnetfelder noch in der Ordung von 10 bis 100 nm, was noch deutlich größer ist als eine typische Gitterkonstante. Das ist auch der Grund, warum die Effektivmassen–Näherung für unser Problem so gut ist, und die Gitterperiodizität nur für hochliegende Zustände eine Rolle spielt.

Innerhalb dieser Näherung läßt sich nun eine Schrödinger–Gleichung für ein Bloch–Elektron herleiten [102]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - i\hbar\omega_c x\frac{\partial}{\partial y} + \frac{m_e\omega_c^2}{2}x^2\right)\phi(\mathbf{r}) = E\,\phi(\mathbf{r})\,, \tag{B.4}$$

mit der neuen Zyklotronfrequenz $\omega_c = eB/m_e$ bezüglich der Effektivmasse. Diese ist die einzige Größe, die den Einfluß des Gitterpotentials noch widerspiegelt. Offensichtlich ist dies dieselbe Gleichung wie die für freie Elektronen mit der Masse m_e. Diese Gleichung wurde erstmals von Landau hergeleitet [68]. Gleichung (B.4) kann durch Einführung von ebenen Wellen in der y- und z-Richtung auf ein eindimensionales Problem reduziert werden. Wir schreiben also

$$\phi(\mathbf{r}) = (L_y L_z)^{-1/2} e^{i(k_y y + k_z z)}\varphi(x)\,, \tag{B.5}$$

und erhalten für $\varphi(x)$ die Schrödinger–Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m_e\omega_c^2}{2}\Big(x + \frac{\hbar}{m_e\omega_c}k_y\Big)^2\right)\varphi(x) = \Big(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}\Big)\varphi(x)\,. \tag{B.6}$$

Dies ist gerade die Schrödinger–Gleichung des harmonischen Oszillators, wobei die x-Koordinate um $\hbar k_y\ (m_e\omega_c) = l^2 k_y$ verschoben ist. Die Eigenenergien oder *Landau–Niveaus* lauten also

$$E_n(k_z) = \big(n + \frac{1}{2}\big)\,\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}\,, \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{B.7}$$

Die Wellenfunktionen φ_{nk_y} sind gegeben durch

$$\varphi_{nk_y}(x) = \Big(\sqrt{\pi}l2^n n!\Big)^{-1/2}\exp\Big(-\frac{1}{2}\big(\frac{x}{l} - lk_y\big)^2\Big)\,H_n\big(\frac{x}{l} - lk_y\big)\,, \tag{B.8}$$

mit den Hermite–Polynomen $H_n(x)$[1]. Während die Eigenfunktionen (B.8) von k_y abhängen, sind die Eigenenergien unabhängig von dieser Quantenzahl und somit hochgradig entartet. Den Entartungsgrad erhält man aus der Bedingung, daß die Wellenfunktion im Kristall lokalisiert sein muss, daß also $|l^2 k_y| \leq L_x/2$. Damit erhält man:

$$\sum_{k_y} \to \frac{L_y}{2\pi}\int\limits_{-L_x/(2l^2)}^{L_x/(2l^2)} dk_y = \frac{L_x L_y}{2\pi l^2}\,. \tag{B.9}$$

Anhang C

Verallgemeinerte Heitler–London–Entwicklung

Betrachtet man das quantenmechanische Problem des Wasserstoffmoleküls, so kann man versuchen, dieses Problem nach den Lösungen des bekannten Wasserstoffatoms zu entwickeln. Während man beim Wasserstoffmolekül die Bewegung der Kerne und damit auch ihre Wechselwirkung wegen der sehr viel größeren Masse vernachlässigen kann, ist dies beim Biexzitonproblem nicht möglich. In GaAs beträgt der Unterschied zwischen der effektiven Elektronmasse und der effektiven Masse des schweren Loches z. B. nur etwa einen Faktor 10. Hier sollen aber nur die bei der Entwicklung zu berücksichtigenden Symmetrieeigenschaften erläutert werden. Daher wollen wir uns trotzdem darauf beschränken, nur den Elektronspin zu berücksichtigen.

Die Wellenfunktion des Gesamtproblems läßt sich nach Produkten von Wasserstoffwellenfunktionen entwickeln, die jeweils mit dem einen oder anderen Kern verknüpft sind:

$$\begin{aligned}
\Phi(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{R}_2\mathbf{r}_2\sigma_2) &= \sum_{nm} c_{nm} \Big[\phi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1\sigma_1)\,\phi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_2\sigma_2) - \phi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_2\sigma_2)\,\phi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_1\sigma_1)\Big] \\
&= \sum_{nm} c_{nm} \Big[\chi_n(\sigma_1)\,\varphi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1)\,\chi_m(\sigma_2)\,\varphi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_2) \\
&\qquad -\chi_n(\sigma_2)\,\varphi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_2)\,\chi_m(\sigma_1)\,\varphi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_1)\Big]\,. \qquad \text{(C.1)}
\end{aligned}$$

Hier beschreibt n den ganzen Satz von Quantenzahlen, der ein Wasserstoffatom charakterisiert, $\mathbf{R}$ die Koordinaten des Kerns, $\mathbf{r}$ die des Elektrons und σ den Spin. Die obige Entwicklung ist bereits antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung der beiden Elektronen, wie es für ein Fermionensystem nach dem Pauli–Prinzip notwendig ist. Im einfachsten Fall beschränkt man sich bei den möglichen Quantenzahlen für die Ortsraumwellenfunktion auf den Grundzustand. Diese Beschränkung wird auch mit der *Heitler–London–Entwicklung* verknüpft [49, 119], was aber nicht notwendig ist. Insofern stellt die hier vorgestellte Entwicklung schon eine verallgemeinerte Heitler–London–Entwicklung dar.

Es ist nun sinnvoll, die Wellenfunktionen so zu wählen, daß sie auch Eigenfunktionen des Gesamtspins sind. Falls die beiden Spinquantenzahlen gleich sind, ist das bereits erfüllt. Falls sie verschieden sind, bildet man geeignete Linearkombinationen von Gesamtwellenfunktionen. Durch Addition oder Subtraktion der Gesamtwellenfunktion mit vertauschten Spins ergibt sich:

$$\begin{aligned}
&\Phi(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{R}_2\mathbf{r}_2\sigma_2) \pm \Phi(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1\sigma_2, \mathbf{R}_2\mathbf{r}_2\sigma_1) \\
&= \sum_{nm} c_{nm} \Big[\phi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1\sigma_1)\, \phi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_2\sigma_2) - \phi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_2\sigma_2)\, \phi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_1\sigma_1) \\
&\qquad\qquad \pm \phi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1\sigma_2)\, \phi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_2\sigma_1) \mp \phi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_2\sigma_1)\, \phi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_1\sigma_2) \Big] \\
&= \sum_{nm} c_{nm} \Big[\chi_n(\sigma_1)\, \chi_m(\sigma_2) \pm \chi_n(\sigma_2)\, \chi_m(\sigma_1) \Big] \cdot \\
&\qquad\qquad \cdot \Big[\varphi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_1)\, \varphi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_2) \mp \varphi_n(\mathbf{R}_1\mathbf{r}_2)\, \varphi_m(\mathbf{R}_2\mathbf{r}_1) \Big] .
\end{aligned} \tag{C.2}$$

Diese Linearkombinationen lassen sich jetzt nicht mehr nach den beiden Elektronenspins klassifizieren, sondern vielmehr nach dem Gesamtspin. Das untere Vorzeichen entspricht dabei dem Gesamtspin $S = 0$, also dem sogenannten *Singulett–Zustand*. Das obere Vorzeichen entspricht dem Gesamtspin $S = 1$, dem *Triplett–Zustand*. Genauer ist dies der Triplett–Zustand mit der z-Komponente $S_z = 0$ des Gesamtspins. Die beiden anderen Zustände zu $S_z = \pm 1$ erhält man gerade für parallele Spins der beiden Elektronen. Heitler und London [49] konnten damit die homöopolare Bindung erklären, denn es zeigt sich, daß die zum Singulett gehörige Energie niedriger ist als die zweier einzelner Atome, so daß dieser Zustand gebunden ist. Die Energie der Triplett–Zustände ist höher als die freier Atome.

Anhang D

Matrixelemente der Biexziton- und Polarisationsgleichungen

Grundsätzlich ist bei der numerischen Auswertung der Matrixelemente darauf zu achten, daß alle Summationen über einen Index in z-Richtung, also z. B. über k, mit einem Gewichtsfaktor w_k durchzuführen sind. Dieser hat die Einheit von k. Für den Fall eines äquidistanten Gitters mit Schrittweite Δk gilt also $w_k = \Delta k$. Bei Summationen über die Radialkoordinate η handelt es sich um diskretisierte zweidimensionale Integrale. Hier ist ein Gewichtsfaktor einzufügen, der mit dem Quadrat der magnetischen Länge l^2 dimensionslos zu machen ist. Natürlich kann man diesen Faktor auch auf die Matrixelemente überwälzen. Für den Fall eines äquidistanten Gitters erhält man hier also $w_\eta = l^2\eta \cdot \Delta\eta$.

Da die Exziton–Eigenfunktionen eindimensional sind, können sie alle als reelle Funktionen geschrieben werden. Die Abhängigkeit von der Radialkoordinate η ist nur eine parametrische, denn sie rührt von dem Parameter der Coulomb–Wechselwirkung, ist aber keine Koordinate des Eigenwertproblems (4.25). Obwohl die Funktionen alle reell sind, werden die Wellenfunktionen, auf die projiziert wurde, komplex konjugiert, um die Rechnung klarer zu machen.

Die Überlappmatrix ist gegeben durch:

$$S_{nm,n'm'}(q\eta, q'\eta') = w_{q'} w_{\eta'} l^2 \sum_k J_0(l^2\eta\eta')\, \varphi_n^{h\,*}(k+\alpha q, \eta)\, \varphi_m^{h'\,*}(k+\beta q+q', \eta) \cdot \varphi_{n'}^{h}(k+\alpha q', \eta')\, \varphi_{m'}^{h'}(k+\beta q'+q, \eta') \quad \text{(D.1)}$$

Das Matrixelement der direkten Coulomb–Wechselwirkung und das der Austausch–Wechselwirkung sind definiert als:

$$V^{\mathrm{c}}_{nm,n'm'}(q\eta) \;=\; V_q^{\mathrm{b}\eta}\, M^{h}_{nn'}(q\eta)\, M^{h'}_{mm'}(-q\eta) \quad \text{(D.2)}$$

$$
\begin{aligned}
V^{\mathrm{xc}}_{nm,n'm'}(q\eta) \;=\; & \sum_{kk'} V^{\mathrm{ex}\,\eta}_{k-k'}\, \varphi^{h\,*}_{n}(k+\alpha q,\eta)\, \varphi^{h'\,*}_{m}(k'+\beta q,\eta) \\
& \cdot \Big[\varphi^{h}_{n'}(k,0) \;-\; \varphi^{h}_{n'}(k',0)\Big] \Big[\varphi^{h'}_{m'}(k'+q,0) \;-\; \varphi^{h'}_{m'}(k+q,0)\Big]
\end{aligned} \tag{D.3}
$$

Die auftretenden Coulomb–Matrixelemente werden gesammelt am Schluß dieses Anhangs definiert. In die direkte Coulomb–Wechselwirkung gehen exzitonische Übergangsmatrixelemente ein:

$$
M^{h}_{nn'}(q\eta) \;=\; \sum_{k} \varphi^{h\,*}_{n}(k,0) \Big[\varphi^{h}_{n'}(k+\alpha q,\eta) \;-\; \varphi^{h}_{n'}(k-\beta q,\eta)\Big] \,. \tag{D.4}
$$

Im folgenden wird noch das Überlappmatrixelement gebraucht:

$$
\mathcal{M}^{h\,\eta\eta'}_{nn'}(q) \;=\; \sum_{k} \varphi^{h\,*}_{n}(k,\eta)\, \varphi^{h}_{n'}(k+q,\eta') \;. \tag{D.5}
$$

Der Anteil der direkten Coulomb–Wechselwirkung an der Exziton–Wechselwirkungsmatrix ist gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
H^{\mathrm{c}}_{nm,n'm'}(q\eta,q'\eta') \;=\; & V^{(1)\eta\eta'}_{qq'} \Big[\mathcal{M}^{h\,\eta\eta'}_{nn'}(\beta(q-q'))\, \mathcal{M}^{h'\,\eta\eta'}_{mm'}(\alpha(q-q')) \\
& \qquad + \mathcal{M}^{h\,\eta\eta'}_{nn'}(-\alpha(q-q'))\, \mathcal{M}^{h'\,\eta\eta'}_{mm'}(-\beta(q-q'))\Big] \\
- \; & V^{(2)\eta\eta'}_{qq'} \Big[\mathcal{M}^{h\,\eta\eta'}_{nn'}(-\alpha(q-q'))\, \mathcal{M}^{h'\,\eta\eta'}_{mm'}(\alpha(q-q')) \\
& \qquad + \mathcal{M}^{h\,\eta\eta'}_{nn'}(\beta(q-q'))\, \mathcal{M}^{h'\,\eta\eta'}_{mm'}(-\beta(q-q'))\Big] \,.
\end{aligned} \tag{D.6}
$$

Der entsprechende Beitrag der Austausch–Wechselwirkung erfordert wieder eine Doppelsumme in k und k', die sich nicht entkoppeln läßt:

$$
\begin{aligned}
H^{\mathrm{xc}}_{nm,n'm'}(q\eta,q'\eta') \;=\; & \sum_{kk'} \varphi^{h\,*}_{n}(k+\alpha(q-q'),\eta)\, \varphi^{h'\,*}_{m}(k'+\beta(q+q'),\eta) \Big\{ \\
- \; & V^{(3)\eta\eta'}_{kk'} \Big[\varphi^{h}_{n'}(k',\eta')\, \varphi^{h'}_{m'}(k'+\beta(q+q')+\alpha(q-q'),\eta') \\
& \qquad + \varphi^{h}_{n'}(k,\eta')\, \varphi^{h'}_{m'}(k+\beta(q+q')+\alpha(q-q'),\eta')\Big] \\
- \; & V^{(4)\eta\eta'}_{kk'} \Big[\varphi^{h}_{n'}(k,\eta')\, \varphi^{h'}_{m'}(k'+\beta(q+q')+\alpha(q-q'),\eta') \\
& \qquad + \varphi^{h}_{n'}(k',\eta')\, \varphi^{h'}_{m'}(k+\beta(q+q')+\alpha(q-q'),\eta')\Big]\Big\}
\end{aligned} \tag{D.7}
$$

In der Bewegungsgleichung der Übergangsamplitude werden noch das Blocking–Matrixelement b und das der statischen Coulomb–Wechselwirkung V^{st} sowie die

Fouriertransformierte der Wellenfunktion $\hat{\varphi}_n^h$ benötigt.

$$\begin{aligned}
b_{nml}^{hh'h''} &= \sum_k \varphi_n^{h\,*}(k,0)\,\varphi_m^{h'\,*}(k,0)\,\varphi_l^{h''}(k,0) && \text{(D.8)}\\
V_{nm,n'm'}^{\mathrm{st}} &= [V_{n'm',nm}^{\mathrm{xc}}(00)]^* && \text{(D.9)}\\
\hat{\varphi}_n^h(0,0) &= \sum_k \varphi_n^{h\,*}(k,0) && \text{(D.10)}
\end{aligned}$$

Nun sind noch die verschiedenen Coulomb–Matrixelemente zu definieren. Der Vollständigkeit halber wird auch die Definition des Matrixelementes V^{ex} angegeben, das in die Eigenwertgleichung des Exzitons eingeht.

$$\begin{aligned}
V_q^{\mathrm{b}\eta} &= \frac{1}{\pi}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\,\frac{1}{l^2}\,\frac{e^{-l^2\eta^2/2}}{\eta^2+q^2} && \text{(D.11)}\\
V_q^{\mathrm{ex}\,\eta} &= \frac{1}{\pi}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\int_0^\infty d\eta'\,\eta'\,\frac{e^{-l^2\eta'^2/2}}{\eta'^2+q^2}\,J_0(l^2\eta\eta') && \text{(D.12)}\\
V^{(1)\eta\eta'}_{\;qq'} &= \frac{1}{\pi}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\,\frac{1}{l^2}\,\frac{\exp[-l^2(\eta^2+\eta'^2-2\eta\eta'\cos\theta)/2]}{\eta^2+\eta'^2-2\eta\eta'\cos\theta+(q-q')^2} && \text{(D.13)}\\
V^{(2)\eta\eta'}_{\;qq'} &= \frac{1}{\pi}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\,\frac{1}{l^2}\,\frac{\exp[-l^2(\eta^2+\eta'^2-2\eta\eta'\cos\theta)/2]}{\eta^2+\eta'^2-2\eta\eta'\cos\theta+(q-q')^2}\,e^{il^2\eta\eta'\sin\theta} && \text{(D.14)}\\
V^{(3)\eta\eta'}_{\;qq'} &= J_0(l^2\eta\eta')\,V_{q-q'}^{\mathrm{ex}\,\eta} && \text{(D.15)}\\
V^{(4)\eta\eta'}_{\;qq'} &= \int_0^\infty d\eta''\,\eta'' l^2\,V^{(2)\eta\eta''}_{\;qq'}\,J_0(l^2\eta'\eta'') && \text{(D.16)}
\end{aligned}$$

Anhang E

Hebung einer integrablen Singularität

Bei der numerischen Auswertung von Integralen, die die Coulomb–Wechselwirkung enthalten, tritt häufig das Problem auf, daß man die Wechselwirkung an ihrer Singularität auswerten muß. Die relevanten Koordinaten werden nämlich diskretisiert und die Integrale in gewichtete Summen überführt. Bei den im Kapitel 4 benötigten Summen handelt es sich in der Regel um Doppelsummen über die Indizes η und q. Typischerweise werden Größen der folgenden Struktur benötigt:

$$I = \int_0^\infty d\eta'\, \eta' \int_{-\infty}^\infty dq'\, V_{qq'}^{\eta\eta'}\ B_{q'}^{\eta'}\ , \tag{E.1}$$

wobei die Coulomb–Wechselwirkung V von $q-q'$ abhängt. Die Funktion ist singulär für $q = q'$ und $\eta = \eta'$, wie man sich anhand der verschiedenen Definitionen in Anhang D überzeugt. Aber auch für $\eta \neq \eta'$ ist die Funktion für $q = q'$ sehr viel größer als bei anderen q-Argumenten. Die Singularitäten sind jedoch alle integrabel, d. h. das Integral über q' oder η' existiert.

In einem solchen Fall läßt sich die Singularität heben. Betrachten wir dazu zunächst den eindimensionalen Fall einer beschränkten, stetigen Funktion $b(q)$ und einer integrablen Funktion $v(q-q')$, die bei $q = q'$ singulär ist. Das Integral läßt sich zerlegen in einen hinreichend kleinen Bereich $U(q)$ um die Singularität und den Rest des Integrationsbereiches:

$$\begin{aligned} i(q) &= \int dq'\, v(q-q')\, b(q') \\ &= \int_{q' \notin U(q)} dq'\, v(q-q')\, b(q') + \int_{q' \in U(q)} dq'\, v(q-q')\, b(q') \end{aligned} \tag{E.2}$$

Außerhalb der Umgebung kann das Integral durch eine geeignete diskrete Summe berechnet werden, da dort beide Funktionen beschränkt und stetig sein sollen. Die Umgebung sei nun so klein gewählt, daß man die Funktion $b(q')$ als konstant annehmen und durch $b(q)$ nähern kann. Dann erhält man:

$$\begin{aligned} i(q) &\approx \int_{q'\notin U(q)} dq'\, v(q-q')\, b(q') \; + b(q) \int_{q'\in U(q)} dq'\, v(q-q') \\ &= \int_{q'\notin U(q)} dq'\, v(q-q')\, b(q') \; + b(q) \left[\int dq'\, v(q-q') \; - \int_{q'\notin U(q)} dq'\, v(q-q') \right] . \end{aligned} \tag{E.3}$$

Damit aber kann man jetzt problemlos die Integrale über die Bereiche außerhalb der Umgebungen $U(q)$ diskretisieren. Für das Integral $\int dq'\, v(q-q')$ muß in der Praxis angenommen werden, daß es entweder analytisch berechnet werden kann oder aber durch einen Algorithmus, der die Funktion nicht an der Singularität auswertet, hinreichend genau numerisch bestimmt wird.

Insgesamt erhält man für den eindimensionalen Fall:

$$\begin{aligned} i(q) &\rightarrow i(q_i) \\ &= \sum_{j\neq i} w_j v(q_i-q_j)\, b(q_j) \; + b(q_i) \left[\int dq'\, v(q_i-q') \; - \sum_{j\neq i} w_j v(q_i-q_j) \right] \\ &= \sum_j \hat{v}_{ij}\, b(q_j) \; , \end{aligned} \tag{E.4}$$

mit

$$\hat{v}_{ij} = \begin{cases} w_j\, v(q_i-q_j) & \text{für } i\neq j, \\ \int dq'\, v(q_i-q') \; - \sum_{j\neq i} w_j v(q_i-q_j) & \text{für } i=j. \end{cases} \tag{E.5}$$

Vom numerischen Standpunkt bietet dieses Vorgehen auch dann einen Vorteil, wenn die Funktion $v(q-q')$ nicht singulär, sondern lediglich ein starkes Extremum an dieser Stelle hat und sich das Integral analytisch bestimmen läßt.

Die beschriebene Vorgehensweise muß nun auf zwei Dimensionen übertragen werden.

Das Integral (E.1) geht also über in:

$$
\begin{aligned}
I \quad \rightarrow \quad & \sum_{j\neq i} w_j \int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq_j}^{\eta\eta'}\, B_{q_j}^{\eta'} + \int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta' B_{q_i}^{\eta'} \Big[\int\limits_{-\infty}^\infty dq'\, V_{q_iq'}^{\eta\eta'} - \sum_{j\neq i} w_j\, V_{q_iq_j}^{\eta\eta'} \Big] \\
\rightarrow \quad & \sum_{j\neq i} \sum_{l\neq k} w_j\, w_k\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l}\, B_{q_j}^{\eta_l} \\
& + \sum_{j\neq i} w_j\, B_{q_j}^{\eta_k} \Big[\int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta'} - \sum_{l\neq k} w_l\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} \Big] \\
& + \sum_{l\neq k} w_l\, B_{q_i}^{\eta_l} \Big[\int\limits_{-\infty}^\infty dq'\, V_{q_iq'}^{\eta_k\eta_l} - \sum_{j\neq i} w_i\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} \\
& + B_{q_i}^{\eta_k} \Big[\int\limits_{-\infty}^\infty dq' \int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq'}^{\eta_k\eta'} - \sum_{j\neq i} w_j \int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta'} \\
& - \sum_{l\neq k} w_l \int\limits_{-\infty}^\infty dq'\, V_{q_iq'}^{\eta_k\eta_l} + \sum_{j\neq i} \sum_{l\neq k} w_j\, w_l\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} \Big] \\
= \quad & \sum_{j\neq i} \sum_{l\neq k} \hat{V}_{ij}^{kl}\, B_{q_l}^{\eta_k} \;,
\end{aligned} \tag{E.6}
$$

mit

$$
\hat{V}_{ij}^{kl} = \begin{cases}
w_j\, w_k\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} & \text{für } j \neq i \text{ und } l \neq k, \\
\int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta'} - \sum\limits_{l\neq k} w_l\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} & \text{für } j \neq i \text{ und } l = k, \\
\int\limits_{-\infty}^\infty dq'\, V_{q_iq'}^{\eta_k\eta_l} - \sum\limits_{j\neq i} w_i\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} & \text{für } j = i \text{ und } l \neq k, \\
\int\limits_{-\infty}^\infty dq' \int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq'}^{\eta_k\eta'} - \sum\limits_{j\neq i} w_j \int\limits_0^\infty d\eta'\, \eta'\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta'} & \text{für } j = i \text{ und } l = k. \\
\qquad - \sum\limits_{l\neq k} w_l \int\limits_{-\infty}^\infty dq'\, V_{q_iq'}^{\eta_k\eta_l} + \sum\limits_{j\neq i} \sum\limits_{l\neq k} w_j\, w_l\, V_{q_iq_j}^{\eta_k\eta_l} &
\end{cases} \tag{E.7}
$$

Der bei der Integration über die Radialkoordinate η auftretende Faktor η ist bei der zugehörigen Summe im Gewichtsfaktor w_l enthalten.

Anhang F

Formale Summation der Gradientenentwicklung

Beim Übergang auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten treten Integrale der folgenden Form auf (siehe Kapitel 5.2):

$$I(q,X) = \int dz \int dy\, e^{-iq(z+y)} \Sigma(y, X+\frac{z}{2})\, G(z, X-\frac{y}{2}) \ . \tag{F.1}$$

Die Orts- und Zeitkoordinaten sind in der Variabeln $x = (\mathbf{r}, t)$ zusammengefaßt, die Kleinbuchstaben bezeichnen Relativvariabeln, die Großbuchstaben Schwerpunktsvariabeln. Die konjugierten Variabeln Wellenzahl und Frequenz sind in $q = (\mathbf{k}, -\omega)$ zusammengefaßt. Entwickelt man die Greensche Funktion G und die Selbstenergie in den Schwerpunktskoordinaten, so erhält man

$$\begin{aligned} I(q,X) \;\; = \;\; & \int dz \int dy \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \Big(\frac{i}{2}\Big)^n \left[\frac{\partial^n}{\partial X^n} \Sigma(y,X)\right] \left[\frac{\partial^n}{\partial q^n} e^{-iqz}\right] \\ & \Big(\frac{-i}{2}\Big)^m \left[\frac{\partial^m}{\partial X^m} G(z,X)\right] \left[\frac{\partial^m}{\partial q^m} e^{-iqy}\right] . \end{aligned} \tag{F.2}$$

Führt man nun die Fouriertransformierten Größen $G(k,X)$ und $\Sigma(k',X)$ ein, so lassen sich die Integrale über y und z durchführen und es ergibt sich:

$$\begin{aligned} I(q,X) \;\; = \;\; & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \Big(\frac{i}{2}\Big)^n \left[\frac{\partial^m}{\partial q^m} \frac{\partial^n}{\partial X^n} \Sigma(z,X)\right] \cdot \\ & \cdot \frac{1}{m!} \Big(\frac{i}{2}\Big)^m \left[\frac{\partial^n}{\partial q^n} \frac{\partial^m}{\partial X^m} G(z,X)\right] . \end{aligned} \tag{F.3}$$

Wird die Doppelsumme nun über $k = m+n$ und $l = m$ durchgeführt, so erhält man das Endergebnis:

$$\begin{aligned} I(q,X) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{i}{2}\right)^k \sum_{l=0}^{k} \binom{l}{k} (-1)^l \left[\frac{\partial^l}{\partial q^l} \frac{\partial^{k-l}}{\partial X^{k-l}} \Sigma(q,X)\right] \left[\frac{\partial^{k-l}}{\partial q^{k-l}} \frac{\partial^l}{\partial X^l} G(q,X)\right] \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{i}{2}\right)^k \left[\hat{K}(q,X)\right]^k \Sigma(q,X)\, G(q,X) \\ &= \exp\left[\frac{i}{2} \hat{K}(q,X)\right] \Sigma(q,X)\, G(q,X)\ , \end{aligned} \tag{F.4}$$

wobei die Wirkung des Operators $\hat{K}$ definiert ist durch:

$$\hat{K}(q,X)\, \Sigma(q,X)\, G(q,X) = \frac{\partial}{\partial X} \Sigma(q,X) \frac{\partial}{\partial q} G(q,X) - \frac{\partial}{\partial q} \Sigma(q,X) \frac{\partial}{\partial X} G(q,X)\ . \tag{F.5}$$

Ausgehend von (5.7) und (5.8) erhält man damit für die Wignerfunktion die neue Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} &\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial T} + i\hbar \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\right] G^{+-}(q,X) \\ &\quad + \int dq'\, G^{+-}(q',X) \cdot \\ &\quad \cdot \int dx\, e^{i(k-q)x} \left[U(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}) + \phi_{\text{ext}}(X + \frac{x}{2}-) U(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}) - \phi_{\text{ext}}(X - \frac{x}{2}\Big)\right] \\ &= \exp\left[\frac{i}{2} \hat{K}(q,X)\right] \Sigma^{-+}(q,X) G^{+-}(q,X) \\ &\quad - \exp\left[\frac{-i}{2} \hat{K}(q,X)\right] \Sigma^{+-}(q,X) G^{-+}(q,X) \\ &\quad + \Big[\exp\left[\frac{i}{2} \hat{K}(q,X)\right] - \exp\left[\frac{-i}{2} \hat{K}(q,X)\right]\Big] \cdot \\ &\quad \cdot \Big[\Sigma^{--}(q,X) G^{+-}(q,X) + \Sigma^{+-}(q,X) G^{--}(q,X) - \Sigma^{+-}(q,X) G^{+-}(q,X)\Big] \end{aligned} \tag{F.6}$$

Hierbei wurde außerdem noch von den Beziehungen zwischen den Greenschen Funktionen (2.23) und (2.24) sowie den entsprechenden Beziehungen zwischen den Selbstenergien Gebrauch gemacht.

Anhang G

Matrixelemente der Elektron–Phonon–Streuung

Wie im Kapitel 5 abgeleitet, wird die Elektron–Phonon–Streuung in unserem System durch die folgenden Terme beschrieben:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}(\mathbf{k},\mathbf{R},t)\bigg|_{\mathrm{ph}} \\
&\quad = \; [1-\hat{f}(\mathbf{k},\mathbf{R},t)]\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,M^2_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}\,\hat{f}(\mathbf{k}',\mathbf{R},t)\;\cdot \\
&\qquad\quad \cdot\Big[(N_0+1)\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}+\omega_0)+N_0\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}-\omega_0)\Big] \\
&\quad -\hat{f}(\mathbf{k},\mathbf{R},t)\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,M^2_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}\,[1-\hat{f}(\mathbf{k}',\mathbf{R},t)]\,\cdot \\
&\qquad\quad \Big[(N_0+1)\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}-\omega_0)+N_0\,\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}_{\mathrm{D}}}+\omega_0)\Big]\,. \qquad \text{(G.1)}
\end{aligned}$$

Die Verteilungsfunktion soll entsprechend (5.41) in einem System gelöst werden, in dem die Entwicklungskoeffizienten nur noch von der longitudinalen Impulskomponente k_z abhängen sollen. Die Integration über diese Koordinate wird also nach der Entwicklung übrigbleiben. Die Deltafunktionen können dazu benutzt werden, die Integrale über die Radialkoordinate k auszuführen. Diese hängen nicht vom Radialwinkel θ ab; aus diesem Grunde kann diese Integration über das Matrixelement

$M^2_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$, definiert in (2.58), vorab ausgeführt werden:

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} d\theta\, M^2_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} &= \int_0^{2\pi} d\theta\, \frac{\alpha}{k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta + (k_z - k'_z)^2} \\
&= \int_0^{2\pi} d\theta\, \frac{\alpha}{A - B\cos\theta} \\
&= \frac{2\pi\alpha}{\sqrt{A^2 + B^2}}\,, \qquad \text{(G.2)}
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
A &= k^2 + k'^2 + (k_z - k'_z)^2 \qquad \text{(G.3)} \\
B &= -2kk'\,. \qquad \text{(G.4)}
\end{aligned}$$

Die Größen A und B sind als Funktionen von k, k', k_z und k'_z zu betrachten. Nun wird die δ-Funktion ausgenutzt, um die k'-Integration auszuführen.

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_\mathrm{D}} \pm \omega_0 \\
&= k^2 + (k_z + k_\mathrm{D})^2 - k_0^{\pm\,2} + (k'_z + k_\mathrm{D})^2 \pm \frac{2m\omega_0}{\hbar} \\
\Rightarrow k_0^\pm &= \Big(k^2 + k_z^2 - k_z'^2 + 2k_\mathrm{D}(k_z - k'_z) \pm \frac{2m\omega_0}{\hbar}\Big)^{1/2} \qquad \text{(G.5)}
\end{aligned}$$

Dies gilt natürlich nur, wenn das Argument der Wurzel auch positiv ist. Damit ist eine Einschränkung an k gegeben, die die noch durchzuführende k-Integration bei der Projektion auf die Entwicklungsfunktionen einschränkt. Denn durch einen ausreichend großen Wert von k kann stets erreicht werden, daß $k_0^\pm$ wohldefiniert ist:

$$k \geq k_1^\pm = \Big[\max\Big\{0, k_z'^2 - k_z^2 - 2k_\mathrm{D}(k_z - k'_z) \mp \frac{2m\omega_0}{\hbar}\Big\}\Big]^{1/2}. \qquad \text{(G.6)}$$

Diese Einschränkung spiegelt die Tatsache wider, daß es für die Streuung mit LO–Phononen die durch die Energieerhaltung beschriebene Einschränkung gibt. Man kann von einem energetisch hoch gelegenen Zustand nur dann unter Emission eines Phonons in einen tiefer gelegenen gelangen, wenn die Energie des Elektrons größer als die LO–Phonon–Energie $\hbar\omega_0$ ist. Diese Einschränkung der Energie wird durch die Definition von $k_1^\pm$ wiedergegeben, die sicherstellt, daß diese Überschußenergie stets vorhanden ist. Im Impulsraum ist diese Bedingung aber keine scharfe Einschränkung für alle Impulskomponenten einzeln. Während wir hier also eine untere Grenze für die Radialkomponente k gefunden haben, durchläuft die k'_z-Komponente noch den ganzen Wertebereich. Für kleine k'_z wird aber der Bereich der k-Integration kleiner und beschränkt die möglichen Zustände.

Die Absorption eines Phonons wird nicht durch die Energieerhaltung eingeschränkt, sondern nur durch die Phononenbesetzung. Diese Tatsache spiegelt sich darin wider, daß k_1^+ bei kleinen Werten der Impulse $k_z + k_\mathrm{D}$ und $k_z' + k_\mathrm{D}$ stets 0 ist, also keine Beschränkung des k-Bereiches liefert. Aus dem Zustand $(k, k_z + k_\mathrm{D})$ kann immer absorbiert werden, solange Phononen vorhanden sind.

Mit den Definitionen (G.5) und (G.6) nimmt (G.1) die Form an:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\,\hat{f}(\mathbf{k}, z, t)\Big|_\mathrm{ph} \\
&= \left[1 - \hat{f}(k, k_z, z, t)\right] \int \frac{dk_z'}{2\pi}\,\frac{m\alpha}{\hbar 2\pi}\,\cdot \\
&\quad \cdot \left[(N_0+1)\frac{\theta(k-k_1^+)}{\sqrt{A^{+2}+B^{+2}}}\,f(k_0^+, k_z, z, t) + N_0\frac{\theta(k-k_1^-)}{\sqrt{A^{-2}+B^{-2}}}\,f(k_0^-, k_z, z, t)\right] \\
&- \hat{f}(k, k_z, z, t) \int \frac{dk_z'}{2\pi}\,\frac{m\alpha}{2\pi\hbar}\,\cdot \\
&\quad \cdot \left[(N_0+1)\frac{\theta(k-k_1^-)}{\sqrt{A^{-2}+B^{-2}}}\,f(k_0^-, k_z, z, t) + N_0\frac{\theta(k-k_1^+)}{\sqrt{A^{+2}+B^{+2}}}\,f(k_0^+, k_z, z, t)\right].
\end{aligned}
\tag{G.7}
$$

Hier bezeichnen $A^\pm$ und $B^\pm$ die in (G.3) und (G.4) definierten Funktionen, die bei $k' = k_0^\pm$ ausgewertet werden. Trennt man nach Termen, die linear und quadratisch in der Verteilungsfunktion sind, so erkennt man, daß die quadratischen Terme nicht mehr von der Besetzung N_0 der Phononen abhängen.

Setzt man nun die Entwicklung (5.41) ein und projiziert auf ϕ_n, indem man den Operator $\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\, l^2 \phi_n(k, k_z) / \phi_0(k, k_z)$ von links auf die Gleichung anwendet, so erhält man für die Streuung des Beitrages f_n die in (5.55) gegebene Form:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\,f_n(k_z, z, t)\Big|_\mathrm{ph} \\
&= \int \frac{dk_z'}{2\pi} \sum_m \left[(N_0+1)\,W_{nm}^{++}(k_z, k_z') + N_0\,W_{nm}^{+-}(k_z, k_z')\right] f_m(k_z', z, t) \\
&- \sum_m f_m(k_z, z, t) \int \frac{dk_z'}{2\pi} \left[(N_0+1)\,W_{nm}^{--}(k_z, k_z') + N_0\,W_{nm}^{-+}(k_z, k_z')\right] \\
&+ \sum_l f_l(k_z, z, t) \int \frac{dk_z'}{2\pi} \sum_m \left[W_{nlm}^{-}(k_z, k_z') - W_{nlm}^{+}(k_z, k_z')\right] f_m(k_z', z, t)\,.
\end{aligned}
\tag{G.8}
$$

Die Matrixelemente sind gegeben durch:

$$W_{nm}^{+\pm}(k_z, k_z') = \frac{m\alpha l^2}{4\pi^2\hbar} \int\limits_{k_1^\pm}^{\infty} dk \, \frac{k}{\sqrt{A^{\pm 2} - B^{\pm 2}}} \, \phi_0^2(k_0^\pm, k_z') \, p_n(k, k_z) \, p_m(k_0^\pm, k_z') \quad \text{(G.9)}$$

$$W_{nm}^{-\pm}(k_z, k_z') = \frac{m\alpha l^2}{4\pi^2\hbar} \int\limits_{k_1^\pm}^{\infty} dk \, \frac{k}{\sqrt{A^{\pm 2} - B^{\pm 2}}} \, \phi_0^2(k, k_z) \, p_n(k, k_z) \, p_m(k, k_z) \quad \text{(G.10)}$$

$$W_{nlm}^{\pm}(k_z, k_z') = \frac{m\alpha l^2}{4\pi^2\hbar} \int\limits_{k_1^\pm}^{\infty} dk \, \frac{k}{\sqrt{A^{\pm 2} - B^{\pm 2}}} \, \phi_0^2(k, k_z) \, \phi_0^2(k_0^\pm, k_z') \; \cdot$$
$$\cdot p_n(k, k_z) \, p_l(k, k_z) \, p_m(k_0^\pm, k_z') \; . \quad \text{(G.11)}$$

Man beachte, daß bei der Berechnung von $W_{nm}^{+\pm}$ die Entwicklungsfunktionen teilweise bei $k_0^\pm$ ausgewertet werden, während dies bei $W_{nm}^{-\pm}$ nicht der Fall ist. Hier kommt die Abhängigkeit von k_z' über die Funktionen $A^\pm$ und $B^\pm$ zustande. Dieser Unterschied liegt darin begründet, daß die lineare Streurate in den Zustand $\mathbf{k}$ proportional zur Besetzung der Ausgangszustände $\mathbf{k}'$ ist, wohingegen die Streurate aus diesem Zustand proportional zur Besetzung des Zustandes $\mathbf{k}$ selbst ist und nicht von $\mathbf{k}'$ abhängt.

Abbildungsverzeichnis

2.1 Zeitkontur C der Greenschen Funktion 10

3.1 RPA–Beiträge zur Elektron–Elektron–Wechselwirkung 26
3.2 Dritter Ordnungsdiagramme zur Exziton–Exziton–Wechselwirkung . . 27

4.1 Schematischer Aufbau des Vierwellenmisch–Experimentes 36
4.2 Bandschema für GaAs 50
4.3 Gemessene Abhängigkeit des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals von der Anregungsdichte 53
4.4 Zeitintegriertes Vierwellenmisch–Signal, berechnet im Rahmen der Halbleiter–Bloch–Gleichungen und in zweiter Bornscher Näherung. . . 54
4.5 Gemessene Abhängigkeit des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals vom Magnetfeld 56
4.6 Berechnete zeitintegrierte Vierwellenmisch–Signale zu verschiedenen Magnetfeldern 57
4.7 Zeitintegriertes Vierwellenmisch–Signal mit vollständiger Exziton–Exziton–Wechselwirkung 58
4.8 Normiertes Frequenzspektrum des zeitintegrierten Vierwellenmisch–Signals 60
4.9 Berechnete zeitaufgelöste Vierwellenmisch–Signale 62
4.10 Berechnete zeitaufgelöste VWM–Signale unter Einschluß der Exziton–Exziton–Wechselwirkung. 63

5.1 Schichtstruktur eines Quantentopfes aus [103] 66
5.2 Experimentelle Kennlinien verschiedener Dioden. 68
5.3 Skizze des effektiven Potentialverlaufes 77
5.4 Berechnete Kennlinie einer resonanten Tunneldiode 78

5.5 Ladungsverteilung innerhalb des Quantentopfes. 79
5.6 Verteilungsfunktion im Gleichgewicht. 80
5.7 Stationäre Verteilungsfunktion bei einer Spannung von 120 mV, der Resonanzspannung. 81
5.8 Vergleich der Kennlinien aus Matrixinversion und Zeitintegration . . 82
5.9 Berechnete Stromdichte als Funktion von Zeit t und Ort z. Es wurde von einer Spannung von 100 mV auf 150 mV geschaltet. 83
5.10 Zeitentwicklung der Verteilungsfunktion. 84
5.11 Kennlinien für verschiedene Stützstellenzahlen. 85
5.12 Schematische Darstellung der Streuprozesse mit LO–Phononen. . . . 87
5.13 Entwicklungsfunktionen in Abhängigkeit von der dimensionslosen Radialkoordinate lk und dem Parameter $l^2k_z^2 - \beta\mu$. 90
5.14 Selbstkonsistentes Potential und induziertes Potential bei mittlerer Spannung 98
5.15 Selbstkonsistentes Potential und induziertes Potential bei hoher Spannung 99
5.16 Selbstkonsistente Kennlinie einer resonanten Tunneldiode 100
5.17 Vergleichskennlinie zu Abbildung 5.16 ohne selbstkonsistentes Potential 101
5.18 Verteilungsfunktion unter Berücksichtigung der Elektron–Phonon–Wechselwirkung. Es war keine externe Spannung angelegt. 102
5.19 Vergleich der Kennlinien mit Elektron–Phonon–Wechselwirkung und des elementaren Modells. 103

Literaturverzeichnis

[1] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, S. 775 (Dover Publications Inc., New York, 1972), 9. Aufl.

[2] B. L. Al'tshuler, *Fluctuations in the extrinsic conductivity of disordered conductors*, JETP Lett. **648**, 41 (1985).

[3] B. L. Al'tshuler, A. G. Aronov und B. Z. Spivak, *The Aaronov–Bohm effect in disordered conductors*, JETP Lett. **34**, 94 (1981).

[4] B. L. Al'tshuler und P. A. Lee, *Disordered electronic systems*, Physics Today S. 36 (1988).

[5] D. V. Averin und Y. V. Nazarov, *Virtual electron diffusion during quantum tunneling of the electric charge*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2446 (1990).

[6] D. V. Averin und A. A. Odintsov, *Macroscopic quantum tunneling of the electric charge in small tunnel junctions*, Phys. Lett. A **140** (5), 251 (1989).

[7] V. M. Axt, *Dynamische Dichtematrixtheorie kohärent erzeugter Korrelationen an der Halbleiterbandkante*, Doktorarbeit, Rheinisch–Westfälische Technische Hochschule Aachen (1994).

[8] V. M. Axt und A. Stahl, *A dynamics controlled truncation scheme for the hierarchy of density matrices in semiconductor optics*, Z. Phys. B **93**, 195 (1994).

[9] V. M. Axt und A. Stahl, *The role of the biexciton in a dynamic density matrix theory of the semiconductor band edge*, Z. Phys. B **93**, 205 (1994).

[10] V. M. Axt, A. Stahl, E. J. Mayer, P. H. Bolivar, S. Nüsse, K. Ploog und K. Köhler, *Four-wave-mixing theory beyond the semiconductor Bloch equations*, phys. stat. sol. (b) **188**, 447 (1995).

[11] I. Balslev und E. Hanamura, *The role of biexcitons in induced absorption and the dynamical Stark effect*, Solid State Commun. **72**, 843 (1989).

[12] G. Bartels, V. M. Axt, K. Victor, A. Stahl, P. Leisching und K. Köhler, $\chi^{(5)}$ *signature in the four-wave-mixing signal from a* $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ *superlattice*, Phys. Rev. B **51**, 11217 (1995).

[13] G. Baym, *Field-theoretic approach to the properties of the solid state*, Ann. of Physics (NY) **14**, 1 (1961).

[14] P. C. Becker, H. L. Fragnito, C. H. B. Cruz, R. L. Fork, J. E. Cunningham, J. E. Henry und C. V. Shank, *Femtosecond photon echoes from band-to-band transitions in GaAs*, Phys. Rev. Lett. S. 1647 (1988).

[15] G. Bergmann, *Weak localization in thin films: a time-of-flight experiment with conduction electrons*, Phys. Rep. **107**, 1 (1984).

[16] R. Binder und S. W. Koch, *Nonequilibrium semiconductor dynamics*, Prog. Quant. Electr. **19**, 307 (1995).

[17] D. Bohm, *Quantum Theory* (Prentice Hall, Englewood Cliffs, New York, 1951).

[18] M. Bonitz *et al.*, in: *Physics of Strongly Coupled Coulomb Systems*, hrsg. von G. Kalman (Plenum Press, New York, 1998).

[19] W. Buckel, *Supraleitung* (Physik Verlag, Weinheim, 1972).

[20] F. A. Buot und K. L. Jensen, *Lattice Weyl-Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices*, Phys. Rev. B **42** (15), 9429 (1990).

[21] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer und S. Pinhas, *Generalized many-channel conductance formula with application to small rings*, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).

[22] L. L. Chang, L. Esaki und R. Tsu, *Resonant tunneling in semiconductor double barriers*, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).

[23] R. Cingolani, Y. Chen und K. Ploog, *Biexciton formation in* $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ *quantum wells: An optical investigation*, Phys. Rev. B **38**, 13478 (1988).

[24] P. Danielewicz, *Quantum theory of nonequilibrium processes, I*, Ann. Phys. **152**, 239 (1984).

[25] S. Datta, *A simple kinetic equation for steady-state quantum transport*, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 8023 (1990).

[26] D. F. DuBois, *Nonequilibrium Quantum Statistical Mechanics of Plasmas and Radiation* (Gordon and Breach, New York, 1967).

[27] T. M. Eiles, J. M. Martinis und M. H. Devoret, *Even-odd asymmetry of a superconductor revealed by the Coulomb blockade of Andreev reflection*, Phys. Rev. Lett. **70**, 1862 (1993).

[28] L. Esaki, *New phenomenon in narrow Germanium $p-n$ junctions*, Phys. Rev. **109**, 603 (1958).

[29] J. Feldmann, *Bloch oscillations in a semiconductor superlattice*, Adv. in Solid State Physics **32**, 81 (1992).

[30] S. Feng, P. A. Lee und A. D. Stone, *Sensitivity of the conductance of a disordered metal to the motion of a single atom: Implication for 1/f noise*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1960 (1986).

[31] D. K. Ferry und C. Jacoboni (Hrsg.), *Quantum Transport in Semiconductors* (Plenum Press, New York, 1992).

[32] A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems* (McGraw-Hill, 1971).

[33] G. Finkelstein, S. Bar-Ad, O. Carmel, I. Bar-Joseph und Y. Levinson, *Biexcitonic effects in transient nonlinear optical experiments in quantum wells*, Phys. Rev. B **47**, 12964 (1993).

[34] W. R. Frensley, *Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device*, Phys. Rev. B **36** (3), 1570 (1987).

[35] W. R. Frensley, *Quantum transport modeling of resonant tunneling devices*, Solid State Electr. **31**, 739 (1988).

[36] W. R. Frensley, *Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium*, Rev. Mod. Phys. **62** (3), 745 (1990).

[37] T. A. Fulton und G. J. Dolan, *Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions*, Phys. Rev. Lett. **59**, 109 (1987).

[38] G. M. Gale und A. Mysyrowicz, *Direct creation of excitonic molecules in CuCl by giant two-photon absorption*, Phys. Rev. Lett. **32** (13), 727 (1974).

[39] I. Giaever, *Energy gap in superconductors measured by electron tunneling*, Phys. Rev. Lett. **5**, 147 (1960).

[40] D. C. Glattli, C. Pasquier, U. Meirav, F. I. B. Williams, Y. Jin und B. Etienne, *Co-tunneling of the charge through a 2-D electron island*, Z. Phys. B **85**, 375 (1991).

[41] H. Grabert, *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1982).

[42] H. Grabert, *Special issue on single charge tunneling*, Z. Phys. B **85**, 317 (1991).

[43] E. Hanamura, *Giant two-photon absorption due to excitonic molecule*, Solid State Commun. **12**, 951 (1973).

[44] A. E. Hanna, M. T. Tuominen und M. Tinkham, *Observation of elastic macroscopic quantum tunneling of the charge variable*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3228 (1992).

[45] M. Hartmann und W. Schäfer, *Real time approach to relaxation and dephasing processes in semiconductors*, phys. stat. sol. (b) **173**, 165 (1992).

[46] H. Haug und S. W. Koch, *Quantum Theory of Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, Singapore, 1993), 2. Aufl.

[47] L. Hedin und S. Lundqvist, *Effects of Electron-Electron and Electron-Phonon Interactions on the One-Electron States of Solids*, in: *Solid State Physics*, hrsg. von F. Seitz, D. Turnbull und H. Ehrenreich, Bd. 23 (Academic Press, New York, 1969).

[48] M. Heiblum, M. I. Nathan, D. C. Thomas und C. M. Knoedler, *Direct observation of ballistic transport in GaAs*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2200 (1985).

[49] W. Heitler und F. London, *Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik*, Z. Phys. **44**, 455 (1927).

[50] B. Hönerlage, R. Levy, J. B. Grun, C. Klingshirn und K. Bohnert, *The dispersion of excitons, polaritons and biexcitons in direct-gap semiconductors*, Phys. Rep. **124**, 161 (1985).

[51] K. L. Jensen und F. A. Buot, *Numerical aspects on the simulation of $i - v$ characteristics and switching times of resonant tunneling diodes*, J. Appl. Phys. **67** (4), 2153 (1990).

[52] M. Joffre, D. Hullin und A. Antonetti, J. Phys. C **5**, 537 (1987).

[53] B. D. Josephson, *Possible new effects in superconductive tunneling*, Phys. Lett. **1**, 251 (1962).

[54] L. P. Kadanoff und G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (W. A. Benjamin, New York, 1962).

[55] L. V. Keldysh, *Diagram technique for nonequilibrium processes*, Sov. Phys. JEPT **20**, 1018 (1965).

[56] D. S. Kim, J. Shah, J. E. Cunningham, T. C. Damen, W. Schäfer, M. Hartmann und S. Schmitt-Rink, *Giant excitonic resonance in time-resolved four-wave mixing in quantum wells*, Phys. Rev. Lett. **68**, 1006 (1992).

[57] D. S. Kim, J. Shah, T. C. Damen, W. Schäfer, F. Jahnke, S. Schmitt-Rink und K. Köhler, *Unusually slow temporal evolution of femtosecond four-wave-mixing signals in intrinsic GaAs quantum wells: Direct evidence for the dominance of interaction effects*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2725 (1992).

[58] M. Kira, F. Jahnke und S. W. Koch, *Microscopic theory of excitonic signatures in semiconductor photoluminescence*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3263 (1998).

[59] N. C. Kluksdahl, A. M. Kriman, D. K. Ferry und C. Ringhofer, *Self-consistent study of the resonant-tunneling diode*, Phys. Rev. B **39** (11), 7720 (1989).

[60] P. Kner, S. Bar-Ad, M. V. Marquezini, D. S. Chemla, R. Lövenich und W. Schäfer, *Effect of magneto–exciton correlations on the coherent emission of semiconductors*, Phys. Rev. B **60**, 4731 (1999).

[61] P. Kner, W. Schäfer, R. Lövenich und D. S. Chemla, *Coherence of four particle correlations in semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5386 (1998).

[62] W. H. Knox, D. S. Chemla, D. A. B. Miller, J. B. Stark und S. Schmitt-Rink, *Femtosecond ac stark effect in semiconductor quantum wells: Extreme low- and high-intensity limits*, Phys. Rev. Lett. **62**, 1189 (1989).

[63] W. Kohn und J. M. Luttinger, *Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors*, Phys. Rev. **529**, 96 (1954).

[64] J. Kuhl, A. Honold, L. Schultheis und C. W. Tu, *Optical dephasing and orientational relaxation of Wannier excitons and free carriers in GaAs GaAs/AlGaAs quantum wells*, Advances in Solid State Physics **29**, 157 (1989).

[65] D. V. A. L. J. Geerlings und J. E. Mooij, *Observation of macroscopic quantum tunneling through the Coulomb energy barrier*, Phys. Rev. Lett. **65**, 3037 (1990).

[66] P. Lafarge, H. Pothier, E. R. Williams, D. Esteve, C. Urbina und M. H. Devoret, *Direct observation of macroscopic charge quantization*, Z. Phys. B **85**, 327 (1991).

[67] R. Lake und S. Datta, *Nonequilibrium Green's-function method applied to double-barrier resonant-tunneling diodes*, Phys. Rev. B **45** (12), 6670 (1992).

[68] L. D. Landau, *Diamagnetismus der Metalle*, Z. Phys. **64**, 629 (1930).

[69] R. Landauer, *Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices*, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).

[70] P. A. Lee und A. D. Stone, *Universal conductance fluctuations in metals*, Phys. Rev. Lett. **55**, 1622 (1985).

[71] K. Leo, *Dynamics of wavepackets in GaAs/AlGaAs heterostructures*, Adv. in Solid State Physics **32**, 97 (1992).

[72] K. Leo, O. Göbel, T. C. Dahmen, J. Shah, S. Schmitt-Rink, W. Schäfer, J. F. Müller, K. Köhler und P. Ganser, *Subpicosecond four-wave mixing in GaAs/AlGaAs quantum wells*, Phys. Rev. B **44**, 5726 (1991).

[73] K. Leo, J. Shah, E. O. Göbel, T. C. Damen, K. Köhler und P. Ganser, *Tunneling in semicondutor heterostructures studied by subpicosecond four-wave mixing*, Appl. Phys. Lett. **56**, 2031 (1990).

[74] K. Leo, M. Wegener, J. Shah, D. S. Chemla, E. O. Göbel, T. C. Damen, S. Schmitt-Rink und W. Schäfer, *Effects of coherent polarization interactions on time-resolved degenerate four-wave-mixing*, Phys. Rev. Lett. **65**, 1340 (1990).

[75] P. Lipavský, V. Spicka und B. Velický, *Generalized Kadanoff-Baym ansatz for deriving quantum transport equations*, Phys. Rev. B **34**, 6933 (1986).

[76] R. Lövenich, W. Schäfer, P. Kner und D. S. Chemla, *Theory of coherently driven biexcitons in strong magnetic fields*, phys. stat. sol. (a) **164**, 347 (1997).

[77] R. Lövenich, W. Schäfer, P. Kner und D. S. Chemla, *Magnetically enhanced exciton-exciton correlations in semiconductors*, J. Lum. **76**, 104 (1998).

[78] D. J. Lovering, R. T. Phillips, G. J. Denton und G. W. Smith, *Resonant generation of biexcitons in a GaAs quantum well*, Phys. Rev. Lett. **68**, 1880 (1992).

[79] J. M. Luttinger, *Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory*, Phys. Rev. **1030**, 102 (1956).

[80] J. M. Luttinger und W. Kohn, *Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields*, Phys. Rev. **869** (4), 97 (1955).

[81] G. D. Mahan, *Quantum transport equation for electric and magnetic fields*, Phys. Rep. **145** (5), 251 (1987).

[82] G. D. Mahan, *Many Particle Physics* (Plenum Press, New York, 1990), 2. Aufl.

[83] A. Maruani, J. L. Oudar, E. Batifol, D. S. Chemla und S. Nikitine, *Nonlinear spectroscopy of biexcitons in CuCl by resonant Raman scattering*, Phys. Rev. Lett. **41**, 1372 (1978).

[84] Y. Masumoto, S. Shinonoya und T. Takagahara, *Optical dephasing of excitonic polaritons in cucl studied by time-resolved, nondegenerate four-wave mixing*, Phys. Rev. Lett. **51**, 923 (1983).

[85] R. C. Miller, D. A. Kleinman, A. C. Gossard und O. Munteanu, *Biexcitons in GaAs quantum wells*, Phys. Rev. B **25**, 6545 (1982).

[86] A. Mysyrowicz, J. B. Grun, R. Levy, A. Bivas und S. Nikitine, *Excitonic molecule in CuCl*, Phys. Lett. A **26**, 615 (1969).

[87] A. Mysyrowicz, D. Hulin, A. Antonetti, A. Migus, W. T. Masselink und H. Morkoç, *"Dressed excitons" in a multiple-quantum-well structure: Evidence for an optical Stark effect with femtosecond response time*, Phys. Rev. Lett. **56**, 2748 (1986).

[88] S. Nakajima, *On the theory of transport phenomena*, Prog. Theor. Phys. **20**, 948 (1958).

[89] K. H. Pantke, D. Oberhauser, V. G. Lyssenko, J. M. Hvam und G. Weimann, *Coherent generation and interference of excitons and biexcitons in* $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ *quantum wells*, Phys. Rev. B **47**, 2413 (1993).

[90] R. T. Phillips (Hrsg.), *Coherent Optical Interactions in Semiconductors*, New York (1994), Plenum Press.

[91] R. T. Phillips, D. J. Lovering, G. J. Denton und G. W. Smith, *Biexciton creation and recombination in a GaAs quantum well*, Phys. Rev. B **45**, 4308 (1992).

[92] P. C. M. Planken, M. C. Nuss, I. Brener, K. W. Goossen, M. S. C. Luo, S. L. Chuang und L. Pfeiffer, *Terahertz emission in single quantum wells after coherent optical excitation of light hole and heavy hole excitons*, Phys. Rev. B **69**, 3800 (1992).

[93] E. I. Rashba, *Springer tracts in modern physics*, Bd. 73 (Springer–Verlag, Berlin, 1975).

[94] B. Robertson, *Equations of motion in nonequilibrium statistical mechanics*, Phys. Rev. **144**, 151 (1966).

[95] H. G. Roskos, M. C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D. A. B. Miller, A. M. Fox, S. Schmitt-Rink und K. Köhler, *Coherent submillimeter-wave emission from charge oscillations in a double-well potential*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2216 (1992).

[96] W. Schäfer, nicht veröffentlicht.

[97] W. Schäfer, *Exzitonische Effekte im Band–Band–Kontinuum – Thalliumchlorid als Beispiel*, Doktorarbeit, Universität Dortmund (1980).

[98] W. Schäfer, *Manybody-effects in nonlinear optics of semiconductor structures*, in: *Optics of Semiconductors Nanostructures*, hrsg. von F. Henneberger, S. Schmitt-Rink und E. O. Göbel, S. 21 (Akademie Verlag, Berlin, 1993).

[99] W. Schäfer, I. Brener und W. Knox, in: *Coherent Optical Interactions in Semiconductors*, hrsg. von R. T. Philipps, S. 343 (Plenum Press, New York, 1994).

[100] W. Schäfer, D. S. Kim, J. Shah, T. C. Damen, J. E. Cunningham, K. W. Goossen, L. N. Pfeiffer und K. Köhler, *Femtosecond coherent fields induced by many-particle correlations in transient four-wave mixing*, Phys. Rev. B **53**, 16429 (1996).

[101] W. Schäfer und J. Treusch, *An approach to the nonequilibrium theory of highly excited semiconductors*, Z. Phys. B **63**, 407 (1986).

[102] W. Schäfer und M. Wegener, *Semiconductor Optics and Transport Phenomena – From Fundamentals to Current Topics* (Springer-Verlag, Berlin, 1999).

[103] T. Schmidt, M. Tewordt, R. H. Blick, R. J. Haug, D. Pfannkuche, K. v. Klitzing, A. Förster und H. Lüth, *Quantum-dot ground states in a magnetic field by single-electron tunneling spectroscopy on double-barrier heterostructures*, Phys. Rev. B **51** (8), 5570 (1995).

[104] S. Schmitt-Rink und D. S. Chemla, *Collective excitations and the dynamical Stark effect in a coherently driven exciton systems*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2752 (1986).

[105] L. Schultheis, J. Kuhl, A. Honold und C. W. Tu, *Picosecond phase coherence and orientational relaxation of excitons in GaAs*, Phys. Rev. Lett. **57**, 1797 (1986).

[106] L. Schultheis, M. D. STurge und J. Hegarty, *Photon echoes from two-dimensional excitons in GaAs-AlGaAs quantum wells*, Appl. Phys. Lett. **47**, 995 (1985).

[107] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices* (Springer–Verlag, Wien, 1984).

[108] J. Shah, *Photoexcited hot carriers: From cw to 6 fs in 20 years*, Solid State Electron. **32**, 1051 (1989).

[109] D. Y. Sharvin und Y. V. Sharvin, *Magnetic flux quantization in a cylindrical film of a normal metal*, JETP Lett. **34**, 272 (1981).

[110] A. Stahl, *RPA-dynamics of the electronic density matrix in a two-band semiconductor*, Z. Phys. B **72**, 371 (1988).

[111] A. Stahl, *Coupled two–level systems and the dynamics of semiconductor electrons*, phys. stat. sol. (b) **159**, 327 (1990).

[112] H. Stolz, V. Langer, E. Schreiber, S. Permogorov und W. von der Osten, *Picosecond quantum-beat spectroscopy of bound excitons in CdS*, Phys. Rev. Lett. **67**, 679 (1991).

[113] A. D. Stone und A. Szafer, *What is measured when you measure resistance? — the Landauer formula revisited*, IBM J. Res. Dev. **32**, 384 (1988).

[114] A. Szafer und A. D. Stone, *Theory of quantum conduction through a constriction*, Phys. Rev. Lett. **62**, 300 (1989).

[115] B. N. Taylor und E. R. Cohen, *How accurate are the Josephson and quantum Hall effects and QED?*, Phys. Lett. A **153**, 308 (1991).

[116] R. Tsu und L. Esaki, *Tunneling in a finite superlattice*, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).

[117] K. v. Klitzing, Festkörperprobleme **30**, 25 (1990).

[118] K. v. Klitzing, G. Dorda und M. Pepper, *New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance*, Phys. Rev. Lett. **45** (6), 494 (1980).

[119] L. Valenta und E. Jäger, *Vorlesungen über Festkörpertheorie*, Bd. I (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1977).

[120] A. von Lehmen, D. S. Chemla, J. E. Zucker und J. P. Heritage, *Optical Stark effect on excitons in GaAs quantum wells*, Opt. Lett. **11** (10), 609 (1986).

[121] C. Wascke, H. G. Roskos, R. Schwedler, K. Leo, H. Kurz und K. Köhler, *Coherent submillimeter-wave emission from Bloch oscillations in a semiconductor superlattice*, J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960).

[122] M. Wegener, D. S. Chemla, S. Schmitt-Rink und W. Schäfer, *Line shape of time-resolved four-wave-mixing*, Phys. Rev. A **42**, 5675 (1990).

[123] C. Weisbuch und B. Vinter, *Quantum semiconductor structures* (Academic, San Diego, 1991).

[124] S. Weiss, M.-A. Mycek, J.-Y. Bigot, S. Schmitt-Rink und D. S. Chemla, *Do semiconductors and atoms emit coherent light in different ways?*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2685 (1992).

[125] H. Weyl, *The Theory of Groups in Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1931).

[126] E. Wigner, *On the quantum correlation for thermodynamic equilibrium*, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).

[127] E. R. Williams, R. N. Ghosh und J. M. Martinis, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **97**, 1 (1992).

[128] U. Woggon, *Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).

[129] R. Zimmermann, *Theory of dephasing in semiconductor optics*, phys. stat. sol. (b) **173**, 129 (1992).

[130] R. Zwanzig, *Ensemble method in the theory of irreversibility*, J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während meiner Arbeit auf vielfältige Weise unterstützt haben und dadurch auch zum Zustandekommen dieses Werkes beigetragen haben.

Zuerst ist es mir ein Bedürfnis, Herrn Prof. W. Schäfer meinen Dank auszusprechen. Er hat mir die Möglichkeit gegeben, diese Arbeit in seiner Gruppe anzufertigen, er hat in vielen Diskussionen mein physikalisches Verständnis wesentlich erweitert. Vor allem aber hat er auch während seiner Krankheit mich wenn immer möglich und mehr als man erwarten darf unterstützt. Auch bei seiner Familie möchte ich mich bedanken, deren Haus mir immer offen stand.

Dann danke ich:

Herrn Prof. W. Weber für die Übernahme des Zweitgutachtens dieser Arbeit und die organisatorische Hilfe beim Promotionsverfahren.

Herrn Dr. U. Wenschuh für die vielfältige und umfassende Unterstützung während der Zeit unserer Zusammenarbeit und Freundschaft. Ich freue mich, daß wir uns begegnet sind.

Frau H. Frank für die tatkräftige Hilfe bei allen Verwaltungsangelegenheiten und ihr herzliches Interesse.

Frau M. Kamps für ihre Tips im Umgang mit den Rechnern und ihre stete gute Laune.

Herrn U. Müssel für seine Hilfe beim Erstellen einiger Bilder dieser Arbeit.

den übrigen Mitarbeitern des NIC für ihre Freundschaft und den Spaß, den wir bei Feiern hatten, insbesondere Herrn E. Gerstner, der mir gerne mit seiner Erfahrung behilflich war.

etlichen Mitarbeitern des ZAM, die mir bei schwierigen Programmierfragen behilflich waren.

den Freunden, die nichts mit meiner täglichen Arbeit zu tun haben, aus dem Akkordeon–Orchester, dem Chor und aus Lamersdorf und vor allem aus Langerwehe. Durch ihr Interesse und ihre Ermutigung haben auch sie zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

meinen Verwandten für ihr Interesse, ihre aufmunternden Worte und ihre Gebete.

Schließlich danke ich meinen Eltern und meinem Bruder, die zu mir gehalten haben und durch ihr Verständnis und ihre Sorge mir den nötigen Rückhalt gegeben haben.

Zuletzt bedanke ich mich bei meiner Frau Charlote, die mich durch ihr Verständnis und durch ihre Fürsorge verwöhnt und ermutigt.

Lebenslauf

Reinhold Lövenich

geboren	22.02.1970 in Jülich
verheiratet mit	Charlote Guloy Lövenich, geb. Guloy
Eltern	Paul Lövenich Josefine Lövenich, geb. Bardenheuer
1976 - 1980	Gemeinschaftsgrundschule Inden Süd
1980 - 1989	Gymnasium Haus Overbach, Jülich–Barmen
05/89	Abitur
1990 - 1996	Studium der Physik an der RWTH Aachen
06/96	Diplom Diplomarbeit: „Theorie des dynamischen elektro–optischen Effektes in Halbleitern“, bei Prof. Dr. A. Stahl, Institut für Theoretische Physik B, RWTH Aachen
seit 09/96	Doktorand am John–von–Neumann–Institut für Computing, bei Prof. Dr. W. Schäfer