



Universität Bremen



Fachbereich 1

Institut für Theoretische Physik

Diplomarbeit

---

# Quantenkinetische Beschreibung von Polaronen in Halbleiter-Quantenpunkten

---

vorgelegt von  
**Jan Seebeck**

Bremen, 20. Juli 2004



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Theorie der Vielteilchen-Systeme im Nicht-Gleichgewicht</b>	<b>5</b>
2.1. Modell der Halbleiter-Struktur . . . . .	6
2.2. Allgemeine quantenstatistische Beschreibung . . . . .	8
2.3. Green'sche Funktionen und Keldysh-Matrix . . . . .	9
2.4. Dynamik der Keldysh-Matrix . . . . .	12
2.5. Auswertung der Keldysh-Matrix . . . . .	18
2.6. Zweizeiten-Formalismus und Näherungs-Schemata . . . . .	20
2.7. Entwicklung nach Eigenfunktionen . . . . .	22
2.8. Selbstenergie und Fröhlich-Polaron . . . . .	24
<b>3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen</b>	<b>27</b>
3.1. Quasiteilchen-Renormierungen . . . . .	27
3.2. Berechnung der retardierten Green'schen Funktion . . . . .	29
3.3. Polaronen in Quantenfilmen . . . . .	38
3.4. Polaronen in Quantenpunkten . . . . .	45
3.5. Nichtdiagonale Beiträge . . . . .	53
<b>4. Ladungsträger Kinetik</b>	<b>61</b>
4.1. Boltzmann-Kinetik . . . . .	61
4.2. Quantenkinetische Gleichungen . . . . .	63
4.3. Kinetik in Quantenfilmen . . . . .	67
4.4. Kinetik in Quantenpunkten . . . . .	72
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>77</b>
<b>A. Matricelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung</b>	<b>81</b>
A.1. Modellierung, Zustände und Wellenfunktionen . . . . .	81
A.2. Matricelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung . . . . .	85
A.2.1. Analogie zur Coulomb-Wechselwirkung . . . . .	86
A.2.2. OPW-Überlapp-Integrale . . . . .	88

A.2.3. Numerisch berechnete Matrixelemente . . . . .	91
<b>B. Numerik und Materialparameter</b>	<b>93</b>
B.1. Einheiten . . . . .	93
B.2. Material-Parameter . . . . .	94
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>94</b>

# 1. Einleitung

Moderne optoelektronische Bauelemente sind derzeit aufgrund ihrer großen Anwendungsbreite in der Forschung von großem Interesse. Standard-Bauelemente sind dabei Laser-Dioden, Lichtemittierende Dioden (LED) und Photo-Detektoren. Anwendung finden diese Bauelemente z.B. bei der optischen Datenspeicherung (CD, DVD, Blu-ray Disk), der optischen Datenübertragung über Glasfasern oder als Leuchtmittel um Glühlampen zu ersetzen. Durch Optimierungen ist man bemüht die Effizienz dieser Bauelemente zu erhöhen, um dadurch z.B. Schaltzeiten zu verkürzen, Lichtausbeute zu steigern oder den Energieverbrauch zu senken. Diese Optimierungen erfordern ein Verständnis der zugrundeliegenden Physik.

Wesentlich für effiziente Bauelemente ist zunächst die Verfügbarkeit von Ladungsträgern in benötigten Energiezuständen. Eine Möglichkeit, die Zustandsdichte zu erhöhen, sind Quantenpunkte (QD<sup>1</sup>). Als Quantenpunkte bezeichnet man Systeme, in denen die Bewegung von Ladungsträgern in allen drei Raumrichtungen eingeschränkt ist. Derartige Systeme haben ein diskretes Energiespektrum, weswegen man sie auch als künstliche Atome bezeichnet. In Halbleitern lassen sich Quantenpunkte durch Nanostrukturen aus entsprechenden Materialien realisieren. Die epitaktische Herstellung erfolgt dabei z.B. mit der Molekularstrahlepitaxie (MBE<sup>2</sup>). Von besonderem Interesse ist dabei der Stranski-Krastanov Wachstumsmodus, in dem Quantenpunkte selbstorganisiert wachsen und dabei eine hohe Homogenität in Höhe, Durchmesser und Verteilung aufweisen. Illustriert ist dies in Abb. 1.1 durch Aufnahmen mit einem Rastertunnelmikroskop (STM<sup>3</sup>). Selbstorganisiertes Wachstum findet man bei druckverspanntem Wachstum. Die zunächst lagenweise und druckverspannt wachsenden Schichten relaxieren ab einer kritischen Schichtdicke durch Umverteilung der Atome. Dabei bilden sich auf einer verbleibenden Benetzungsschicht (WL<sup>4</sup>) zufällig verteilte Material-Inseln, deren Geometrie durch Wachstumsparameter bestimmt werden kann [35]. Die verbleibende Benetzungsschicht bildet einen Quantenfilm und die Inseln Quantenpunkte. Bei geeigneten Wachstumsparametern erhält man auf der Benetzungsschicht typischerweise Quantenpunktdichten von  $10^9 \text{ cm}^{-2}$ - $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , wobei die Größenverteilung der Quantenpunkte mit einem Durchmesser von ca. 25 nm und

---

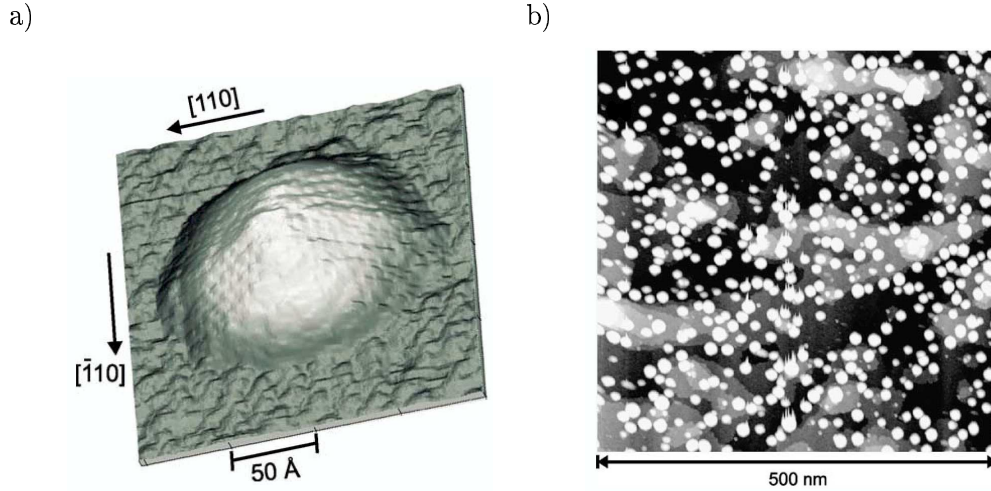
<sup>1</sup>engl.: quantum dots

<sup>2</sup>engl.: molecular beam epitaxy

<sup>3</sup>engl.: scanning tunnel microscope

<sup>4</sup>engl.: wetting layer

einer Höhe von ca. 2.2 nm sehr gleichmäßig ist [35, 19].



**Abb. 1.1:** STM-Aufnahmen von InAs Quantenpunkten auf GaAs (001) (aus [19]): (a) Einzelner Quantenpunkt. Die flache Kuppel setzt sich aus verschiedenen Hoch-Index-Oberflächen zusammen. (b) Ensemble von Quantenpunkten. Zufällige räumliche Verteilung bei annähernd gleicher Größe und einer Quantenpunktdichte von  $1,9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Ladungsträger werden in der Regel durch Anlegen einer Spannung in Bauelemente injiziert. Dabei gelangen sie durch Relaxationsprozesse über den Volumenkristall in die Benetzungsschicht und dann erst in die Quantenpunkte. Neben der Verfügbarkeit der Energiezustände ist daher die Effizienz von Streuprozessen von fundamentaler Bedeutung, da sie die Anzahl der verfügbaren Ladungsträger in den Quantenpunkten bestimmen. Zu betrachten sind dabei die Relaxation innerhalb der Benetzungsschicht ( $\text{WL} \rightarrow \text{WL}$ ), der Ladungsträger-Einfang der Quantenpunkte ( $\text{WL} \rightarrow \text{QD}$ ) und die Relaxation in den Quantenpunkten ( $\text{QD} \rightarrow \text{QD}$ ). Für niedrige Ladungsträgerdichten stellt sich heraus, dass die Streuung an Phononen dabei der effizienteste Mechanismus ist [24]. Deren Diskussion in der Literatur beschränkt sich aber meist auf die Relaxation in Quantenfilmen oder in Quantenpunkten für sich. Dies hat den Hintergrund, dass die Streuung an Phononen häufig durch Streuprozesse mit strikter Energieerhaltung beschrieben wird. Damit kann Relaxation durch Phononen nur in Quantenpunkten stattfinden, deren Abstand der Energieniveaus genau eine Phonon-Energie beträgt. Diese Einschränkung kann durch Photolumineszenz-Experimente nicht bestätigt werden, weswegen in der Literatur unter anderem auch Multiphonon-Prozesse oder Auger-Prozesse der Coulomb-Streuung untersucht wurden. All diese Prozesse führen aber bei niedrigen Ladungsträgerdichten zu Relaxationszeiten, die mit der Rekombinationszeit vergleichbar sind und damit im Gegensatz zu Experimenten nur schwache

---

Lumineszenz liefern. Für die Optimierung von optoelektronischen Bauelementen auf der Basis von Quantenpunkt-Strukturen ist daher eine genauere Untersuchung der Einfang- und Relaxationsprozesse sehr wichtig.

In dieser Arbeit wird eine quantenkinetische Beschreibung von Ladungsträgern in selbstorganisiert gewachsenen Quantenpunkt-Strukturen vorgestellt. Diese Beschreibung liefert in Quantenpunkten, deren Abstand der Energieniveaus nicht der Phonon-Energie entspricht, Relaxationszeiten im Bereich von wenigen Pikosekunden. Die Ladungsträger werden dabei als Polaronen beschrieben. Polaronen sind Quasiteilchen, die eine gekoppelte Anregung aus Elektron und Phononen darstellen. Untersucht wird das etablierte III-V Materialsystem GaAs/InAs, da diese Arbeit eine Vertiefung des wesentlichen physikalischen Verständnisses zum Ziel hat. Bei einem direkten Vergleich mit Experimenten für aktuell erforschte III-V Materialien, wie z.B. AlGaN, müssten noch zusätzliche Effekte durch Piezofelder berücksichtigt werden.

Diese Arbeit gliedert sich in drei Teile. Im ersten Teil wird zunächst die Modellierung der Quantenpunkt-Struktur und die Beschreibung eines Vielteilchen-Systems durch Green'sche Funktionen vorgestellt. Dabei werden verwendete Näherungen im Rahmen dieses Formalismus erläutert. Der zweite Teil beschäftigt sich mit den Energiezuständen in der Quantenpunkt-Struktur und beginnt mit einer Herleitung der benötigten Gleichungen. Das Energiespektrum wird dann für Quantenfilme, Quantenpunkte und gekoppelte Systeme studiert. Im abschließenden dritten Teil wird die Kinetik von Ladungsträgern untersucht. Nachdem die energieerhaltende Beschreibung von Streuprozessen mit Fermi's Goldener Regel und deren Grenzen vorgestellt wurden, folgt eine Herleitung der quantenkinetischen Gleichungen. Im Rahmen der Quantenkinetik wird dann die Relaxation in Quantenfilmen und Quantenpunkten und der Ladungsträgereinfang der Quantenpunkte studiert.





## 2. Theorie der Vielteilchen-Systeme im Nicht-Gleichgewicht

Festkörper sind ein Vielteilchen-System aus wechselwirkenden Gitterionen und Elektronen. In einer quantenmechanischen Beschreibung ist die Berechnung der exakten Eigenwerte und Eigenzustände des entsprechenden Hamilton-Operators durch Lösung der Vielteilchen-Schrödingergleichung aufgrund der Anzahl der wechselwirkenden Teilchen ( $\sim 10^{23}$ ) weder sinnvoll, noch praktisch durchführbar. Gefordert sind daher theoretische Methoden die aus dem Informationsüberschuss physikalisch relevante Größen herausfiltern und damit Aussagen über physikalische Messgrößen treffen können.

Mit der Methode der 2. Quantisierung [26, 27, 6] gelingt zunächst eine Vereinfachung der Beschreibung von Vielteilchen-Systemen. Statt eine Vielteilchen-Wellenfunktion zu betrachten führt man Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren ein, mit denen aus dem Vakuum-Zustand ein beliebiger Vielteilchen-Zustand generiert werden kann. Die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion für Fermionen und Bosonen sind dabei in fundamentalen Vertauschungs-Relationen für die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren enthalten.

Dieses Kapitel beginnt mit der Definition des untersuchten Modells. Anschließend wird die Methode der Green'schen Funktionen für Systeme im Nichtgleichgewicht vorgestellt. Die allgemeine quantenstatistische Beschreibung von wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen führt für die Berechnung von beliebigen Einteilchen-Erwartungswerten auf die Definition der Green'schen Funktionen. Betrachtet man die Dynamik der Green'schen Funktionen, so führt dies auf ein *Hierarchie-Problem*. Durch die Wechselwirkung koppeln die Bewegungsgleichungen für Green'sche Einteilchenfunktionen an die von Green'schen Zweiteilchenfunktionen, welche an Dreiteilchenfunktionen koppeln. Eine systematische Entkopplung dieser Hierarchie von Bewegungsgleichungen gelingt mit der Funktionalableitungstechnik und führt auf ein fundamentales System von Gleichungen.

## 2.1. Modell der Halbleiter-Struktur

Untersucht wird in dieser Arbeit die in der Einleitung vorgestellte Halbleiter-Struktur aus selbstorganisiert gewachsenen Quantenpunkten mit einer Benetzungsschicht. Dabei wird insbesondere der Einfluss der Elektron-Phonon Wechselwirkung auf kinetische und spektrale Eigenschaften betrachtet. Der Hamilton-Operator des Systems

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ph}} + \hat{H}_{\text{e-ph}} \quad (2.1)$$

setzt sich daher aus einem Anteil  $\hat{H}_0$  für die freien Ladungsträger, einem Anteil  $\hat{H}_{\text{ph}}$  für Phononen und einem Wechselwirkungsanteil  $\hat{H}_{\text{e-ph}}$  zusammen. In 2. Quantisierung lauten die Anteile:

$$\hat{H}_0 = \sum_{a=\text{e,h}} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha}^a \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \quad (2.2a)$$

$$\hat{H}_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} \quad (2.2b)$$

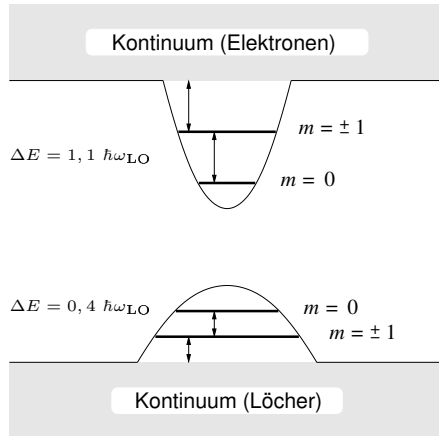
$$\hat{H}_{\text{e-ph}} = \sum_{a=\text{e,h}} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha, \alpha'}^a(\mathbf{q}) \left( \hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha'} . \quad (2.2c)$$

Dabei bezeichnet der Index  $\alpha$  einen beliebigen Zustand in einem Quantenpunkt oder der Benetzungsschicht. Eine genauere Herleitung des Hamilton-Operators der Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird in Anh. A.2 vorgestellt.

Die Energie  $\epsilon_{\mathbf{k}}^a$  der freien Ladungsträger in einem (Volumen-)Kristall ist im Allgemeinen durch eine komplexe Bandstruktur mit mehreren Bändern bestimmt. Physikalisch am interessantesten ist dabei für optische Anwendungen der Bereich um den  $\Gamma$ -Punkt (Zentrum der Brillouin-Zone). In direkten Halbleitern hat das Band oberhalb der Bandlücke (Leitungsband) am  $\Gamma$ -Punkt ein Minimum, während das Band unterhalb (Valenzband) ein Maximum hat. Dadurch ist am  $\Gamma$ -Punkt die Bandlücke am kleinsten. Für optische Übergänge zwischen Valenz- und Leitungsband wird daher der Bereich um den  $\Gamma$ -Punkt den Haupt-Beitrag liefern und eine Beschränkung auf diese zwei Bänder ist gerechtfertigt. In Effektiv-Masse-Näherung [34, 14, 6] werden die Ladungsträger dann formal wie freie Teilchen beschrieben. Dabei wird die Krümmung der parabolischen Dispersion freier Teilchen über eine, im Allgemeinen richtungsabhängige, effektive Masse  $m^*$  an die Bandstruktur am  $\Gamma$ -Punkt angepasst. Für eine isotrope Bandstruktur erhält man dann, bezüglich der Bandkante, die freien Einteilchen-Energien:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial |\mathbf{k}|^2} . \quad (2.3)$$

In Halbleiter-Quantenfilmen wird die Bandstruktur in der Wachstumsebene näherungsweise durch diejenige des Volumenkristalls beschrieben. Die freien Einteilchen-Energien sind dann durch (2.3) mit 2D Impulsen in der Wachstumsebene gegeben. In Wachstumsrichtung ist die Bewegung der Ladungsträger eingeschränkt und es bilden sich die gebundenen Zustände eines 1D Potentialtopfes aus. Dabei wird im Folgenden nur das erste Subband (Grundzustand) berücksichtigt, da der energetische Abstand der Subbänder für den betrachteten Quantenfilm groß ist. Die Quantenpunkte werden durch ein zusätzliches harmonisches Einschluss-Potential modelliert, das isotrop in der Wachstumsebene ist. Dabei werden nur die zwei untersten Zustände berücksichtigt, die s-Schale ( $m = 0$ ) und die zweifach entartete p-Schale ( $m = \pm 1$ ). In dem untersuchten Modellsystem betragen die Energieabstände zwischen beiden Schalen und zwischen p-Schale und Bandkante jeweils für Elektronen  $1,1 \hbar\omega_{\text{LO}}$  und für Löcher  $0,4 \hbar\omega_{\text{LO}}$ . Das System besteht damit aus einem Quantenfilm mit kontinuierlichen Zuständen in der Wachstumsebene und zusätzlichen Quantenpunkten mit diskreten Zuständen. Skizziert ist dies in Abb. 2.1. Da die Zustände nur bei der Berechnung von Matrixelementen benötigt werden, erfolgt eine detaillierte Diskussion und die Konstruktion orthogonaler Einteilchen-Zustände im Anhang (A.1).



**Abb. 2.1:** Energieschema des untersuchten Modellsystems.

Auch die Energien  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$  der freien Phononen weisen eine Dispersionsrelation auf, die sich aus verschiedenen optischen und akustischen Moden zusammensetzt [34]. Analog zur Bandstruktur betrachtet man auch in der Phonon-Dispersion nur Beiträge aus der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes. Während akustische Zweige linear mit dem Phonon-Impuls  $\mathbf{q}$  wachsen, sind optische Zweige näherungsweise konstant. Es ist daher gerechtfertigt sich auf dispersionslose optische Phononen ( $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\text{LO}}$ ) zu beschränken. Rücker u. a. [30] haben in Quantenfilmen die Beiträge von Oberflächenmoden und eingeschlossenen Moden untersucht. Dabei stellt sich heraus, dass die 3D Phonon-Moden des umgebenden Volumen-Materials eine gute Näherung darstellen und Korrekturen durch zusätzliche Moden klein sind. In dieser Arbeit werden daher nur die Phonon-Moden des

Volumenkristalls berücksichtigt. Für das Phonon-System des Volumenkristalls wird angenommen, dass es sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet.

## 2.2. Allgemeine quantenstatistische Beschreibung

In der Quantenmechanik werden physikalische Messgrößen durch Erwartungswerte dargestellt. Der Erwartungswert eines beliebigen Operators  $\hat{A}_S$  bezüglich eines reinen Zustandes  $|\Phi(t)\rangle$  lautet im Schrödinger-Bild

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Phi(t) | \hat{A}_S | \Phi(t) \rangle . \quad (2.4)$$

Der Hamilton-Operator des betrachteten Systems soll sich dabei aus einem wechselwirkungsfreien Anteil  $\hat{H}_0$ , einem wechselwirkenden Anteil  $\hat{H}_{\text{WW}}$  und einer explizit zeitabhängigen externen Störung  $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$  zusammensetzen:

$$\hat{H} = [\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{WW}}] + \hat{H}_{\text{ext}}(t) . \quad (2.5)$$

Der Übergang vom Schrödinger- ins Dirac-Bild [25, 27] wird so gewählt, dass die Zeitentwicklung der Zustände  $|\Phi(t)\rangle$  durch  $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$  und die der Operatoren  $\hat{A}(t)$  durch  $\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{WW}}$  bestimmt ist. Die Zeitentwicklung eines Anfangszustandes  $|\Phi_0(t_0)\rangle$  wird dann durch den Zeitentwicklungsoperator  $S(t, t_0)$  beschrieben:

$$|\Phi_0(t)\rangle = S(t, t_0) |\Phi_0(t_0)\rangle \quad \text{mit} \quad S(t, t_0) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{ext}}(t) dt} . \quad (2.6)$$

Hierbei ordnet der Zeitordnungsoperator  $T$  die Operatoren chronologisch von rechts nach links, d.h. Operatoren zu späten Zeiten stehen dann links. Für Fermionen ist durch das Vertauschen der Operatoren beim Herstellen der Zeitordnung auf die Vorzeichen zu achten. Die Zeitentwicklungsoperatoren bilden eine Gruppe und haben die Eigenschaften:

$$S(t_1, t_2) = S^{-1}(t_2, t_1) = S^\dagger(t_2, t_1) \quad (2.7a)$$

$$S(t_1, t_2) = S(t_1, t_3) S(t_3, t_2) . \quad (2.7b)$$

Für die Operatoren ist die Zeitabhängigkeit, wie im Heisenberg-Bild, gegeben durch

$$\hat{A}_D(t) = U^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S U(t, t_0) \quad \text{mit} \quad U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{WW}})(t - t_0)} . \quad (2.8)$$

Nutzt man die Halbgruppen-Eigenschaft der Zeitentwicklungsoperatoren aus, so kann man  $t_0 = -\infty$  setzen. Das Zeitargument des Grundzustandes wird daher im Folgenden fallengelassen und man erhält aus (2.4) den Erwartungswert im Dirac-Bild:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Phi_0 | S(-\infty, \infty) T \left\{ S(\infty, -\infty) \hat{A}_D(t) \right\} | \Phi_0 \rangle . \quad (2.9)$$

Der rechte Teil des Erwartungswertes ist zeitgeordnet, während der linke Teil anti-zeitgeordnet ist. Quantenfeldtheoretische Methoden wie Wick-Theorem und Störungstheorie mit Feynman'scher Diagramm-Technik erfordern aber eine einheitliche Zeitordnung der Operatoren zur Berechnung der Erwartungswerte [27].

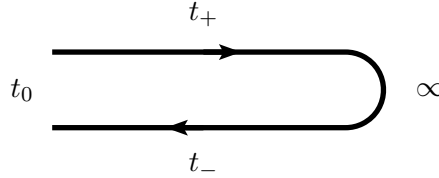
Im einfachsten Fall betrachtet man Systeme im Gleichgewicht bei  $T = 0$  K ohne externe Störung ( $\hat{H}_{\text{ext}} = 0$ ). Dafür definiert man das Dirac-Bild so, dass die Zeitabhängigkeit der Zeitentwicklungsoperatoren  $\tilde{S}(t_1, t_2)$  durch  $\hat{H}_{\text{WW}}$  und die der Operatoren durch  $\hat{H}_0$  bestimmt ist. Nach dem Theorem von Gell-Mann und Low [27] bewegt sich das System durch adiabatisches Ein- und Ausschalten der Wechselwirkung,

$$\hat{H}_{\text{WW}} \rightarrow \hat{H}_{\text{WW}} e^{-\eta|t|} \quad \text{mit } \eta \rightarrow 0, \quad (2.10)$$

nicht aus dem Grundzustand heraus. Man kann daher in (2.9) die Identität  $\mathbb{1} = \sum_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|$  einschieben, wobei nur der Grundzustand  $|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|$  beiträgt. Der Erwartungswert  $\langle\Phi_0|\tilde{S}(-\infty, \infty)|\Phi_0\rangle$  kann dann nur einen konstanten Phasenfaktor liefern und wegen der Eigenschaften (2.7) in den Nenner gebracht werden. Damit hat man wieder eine einheitliche Zeitordnung hergestellt:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\Phi_0|T \tilde{S}(\infty, -\infty)\hat{A}_D|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\tilde{S}(\infty, -\infty)|\Phi_0\rangle}. \quad (2.11)$$

Für eine explizit zeitabhängige Wechselwirkung ( $\hat{H}_{\text{ext}}(t) \neq 0$ ), die das System aus dem Gleichgewicht bringen kann, gilt diese Argumentation nicht. Um eine einheitliche Zeitordnung herzustellen führt man daher mathematisch die Keldysh-Zeit  $\underline{t}$  ein, die entlang einer doppelten Zeitkontur  $\mathcal{C}$  zeitgeordnet ist. Die Keldysh-Zeit  $\underline{t}$  ist bezüglich der physikalischen Zeit auf dem oberen Zweig  $t_+$  zeitgeordnet und auf dem unteren Zweig  $t_-$  anti-zeitgeordnet. Mit fortschreitender Keldysh-Zeit  $\underline{t}$  werden die Zeitargumente  $t_-$  auf dem unteren Zweig der Kontur also kleiner. Skizziert ist dies in Abb. 2.2.



**Abb. 2.2:** Keldysh-Zeitkontur  $\mathcal{C}$

## 2.3. Green'sche Funktionen und Keldysh-Matrix

Relevante physikalische Messgrößen an Halbleitern wie Verteilungsfunktionen, Polarisation und Stromdichten sind Einteilchen-Erwartungswerte. In 2. Quantisierung und

Ortsdarstellung haben Einteilchen-Operatoren allgemein die Form

$$\hat{A} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \mathbf{r}' \rangle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') . \quad (2.12)$$

Die Feldoperatoren  $\hat{\Psi}^{(\dagger)}(\mathbf{r})$  genügen dabei den fundamentalen Anti-Kommutator-Relationen für Fermionen. Für Systeme im Gleichgewicht bei  $T = 0$  K erhält man für die Erwartungswerte (2.11) von Einteilchen-Operatoren

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \mathbf{r}' \rangle \frac{\langle \Phi_0 | T \left\{ \tilde{S}(\infty, -\infty) \hat{\Psi}_D^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_D(\mathbf{r}', t) \right\} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{S}(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} , \quad (2.13)$$

wobei die Feldoperatoren gemäß (2.8) eine Zeitabhängigkeit durch  $\hat{H}_0$  tragen. Alle Feldoperatoren sind im Folgenden in dieser Darstellung zu verstehen, sofern nichts anderes angegeben ist. Zur Berechnung beliebiger Erwartungswerte definiert man nun Green'sche Funktionen (GF) als allgemeine zweizeitige Korrelationsfunktionen:

$$i\hbar G(1, 2) = \frac{\langle \Phi_0 | T \left\{ \tilde{S}(\infty, -\infty) \hat{\Psi}(1) \hat{\Psi}^\dagger(2) \right\} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{S}(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} . \quad (2.14)$$

In dieser Kurzschreibweise enthalten die Argumente  $1 = \{\mathbf{r}_1, t_1, \lambda_1, s_1\}$  der Feldoperatoren dabei neben Ort  $\mathbf{r}$  und Zeit  $t$  auch Bandindex  $\lambda$  und Spin  $s$ . Die Green'sche Funktion (2.14) beschreibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude in einem Vielteilchen-System bei 1 ein Teilchen vorzufinden, wenn bei 2 ein Teilchen erzeugt wurde. Man definiert daher die Propagatoren

$$-i\hbar G^<(1, 2) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(2) \hat{\Psi}(1) \rangle , \quad (2.15a)$$

$$i\hbar G^>(1, 2) = \langle \hat{\Psi}(1) \hat{\Psi}^\dagger(2) \rangle , \quad (2.15b)$$

wobei  $G^<(1, 2)$  die Propagation eines Lochs von 1 nach 2 und  $G^>(1, 2)$  die Propagation eines Teilchens von 2 nach 1 beschreibt. Die zeitgeordnete Green'sche Funktion (2.14) und eine anti-zeitgeordnete Green'sche Funktion  $\tilde{G}$  lassen sich damit auch durch die Propagatoren (2.15) ausdrücken. Mit der Stufenfunktion  $\Theta$  lauten diese:

$$G(1, 2) = \Theta(t_1 - t_2) G^>(1, 2) + \Theta(t_2 - t_1) G^<(1, 2) , \quad (2.16a)$$

$$\tilde{G}(1, 2) = \Theta(t_2 - t_1) G^>(1, 2) + \Theta(t_1 - t_2) G^<(1, 2) . \quad (2.16b)$$

Durch Linearkombination der Propagatoren (2.15) erhält man weiterhin eine retardierte und eine avancierte Green'sche Funktion:

$$G^R(1, 2) = \Theta(t_1 - t_2) [G^>(1, 2) - G^<(1, 2)] , \quad (2.17a)$$

$$G^A(1, 2) = -\Theta(t_2 - t_1) [G^>(1, 2) - G^<(1, 2)] . \quad (2.17b)$$

Aus der Definition der Propagatoren (2.15) erhält man durch komplexes Konjugieren die Relationen:

$$[G^{\lessgtr}(1, 2)]^* = -G^{\lessgtr}(2, 1) , \quad (2.18)$$

$$[G^R(1, 2)]^* = G^A(2, 1) . \quad (2.19)$$

Analog zu (2.14) definiert man für Systeme im Nicht-Gleichgewicht eine Green'sche Funktion auf der Keldysh-Kontur  $\mathcal{C}$ :

$$i\hbar G(\underline{1}, \underline{2}) = \frac{\langle T_{\mathcal{C}}[S_{\mathcal{C}} \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2})] \rangle}{\langle S_{\mathcal{C}} \rangle} = \frac{\text{Sp} \left\{ \rho_0 T_{\mathcal{C}}[S_{\mathcal{C}} \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2})] \right\}}{\text{Sp} \{ \rho_0 S_{\mathcal{C}} \}} . \quad (2.20)$$

Im Nichtgleichgewicht kann man sich bei der Berechnung der Erwartungswerte nicht auf den Grundzustand beschränken. Die Erwartungswerte sind daher als Spur über den statistischen Operator  $\rho_0$  für Systeme im Nichtgleichgewicht definiert, dessen Berechnung im Folgenden implizit mit erfolgt. In den Argumenten  $\underline{1}$  enthalten die Zeiten dabei zusätzlich einen Kontur-Index  $n_1 \in \{+, -\}$  der angibt, ob die Zeit auf dem oberen (+) oder unteren (−) Zweig der Keldysh-Kontur liegt. Analog zum Zeitordnungsoperator  $T$  werden mit dem Zeitordnungsoperator  $T_{\mathcal{C}}$  die Operatoren chronologisch entlang der Keldysh-Kontur geordnet. Die Zeitentwicklungsoperatoren  $S_{\mathcal{C}} = S_-^\dagger S_+$  setzen sich dabei aus der Vorwärtsentwicklung  $S_+(\infty, -\infty)$  auf dem oberen Zweig und der Rückwärtsentwicklung  $S_-^\dagger(-\infty, \infty)$  auf dem unteren Zweig zusammen. Bezüglich der Kontur-Indizes erhält man aus (2.20) eine  $2 \times 2$ -Matrix

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = \begin{pmatrix} G(1_+, 2_+) & G(1_+, 2_-) \\ G(1_-, 2_+) & G(1_-, 2_-) \end{pmatrix} , \quad (2.21)$$

die Keldysh-Matrix genannt wird. Die Diagonalelemente der Keldysh-Matrix identifiziert man als zeitgeordnete und anti-zeitgeordnete Green'sche Funktion:

$$G(1_+, 2_+) = -\frac{i}{\hbar} \langle T[\hat{\Psi}(1_+) \hat{\Psi}^\dagger(2_+)] \rangle = G(1, 2) \quad (2.22a)$$

$$G(1_-, 2_-) = -\frac{i}{\hbar} \langle \tilde{T}[\hat{\Psi}(1_-) \hat{\Psi}^\dagger(2_-)] \rangle = \tilde{G}(1, 2) . \quad (2.22b)$$

Der Zeitordnungsoperator  $\tilde{T}$  stellt dabei eine anti-chronologische Zeitordnung her. Als Nicht-Diagonalelemente identifiziert man die Propagatoren:

$$G(1_+, 2_-) = \frac{i}{\hbar} \langle \hat{\Psi}^\dagger(2_-) \hat{\Psi}(1_+) \rangle = G^<(1, 2) \quad (2.22c)$$

$$G(1_-, 2_+) = -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{\Psi}(1_-) \hat{\Psi}^\dagger(2_+) \rangle = G^>(1, 2) . \quad (2.22d)$$

Lineare Abhängigkeiten zwischen den vier einzelnen Green'schen Funktionen der Keldysh-Matrix können mit (2.18) eliminiert werden, wobei nur zwei unabhängige verbleiben. Im Folgenden beschränkt sich die Betrachtung auf  $G^<$  und  $G^R$ . Dies ist physikalisch motiviert, da in einem Vielteilchen-System Energiezustände und deren Besetzungswahrscheinlichkeit ein gekoppeltes Problem darstellen.  $G^<(t, t)$  entspricht gerade der reduzierten Einteilchen-Dichtematrix und ist damit direkt mit Besetzungsfunktionen verknüpft.  $G^R(t_1, t_2)$  hingegen erhält über die Spektralfunktion (vgl. Kap. 3.1) eine Interpretation als Energiespektrum bzw. Zustandsdichte. Die Kopplung von spektralem und kinetischem Problem ist also in der Keldysh-Matrix richtig enthalten.

## 2.4. Dynamik der Keldysh-Matrix

Die Bewegungsgleichung der Keldysh-Matrix (2.21) erhält man durch Bilden der Zeitableitung. Dazu formuliert man zunächst die Keldysh-Matrix über

$$i\hbar G(\underline{1}, \underline{2}) = n_2 \Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \langle \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \rangle - n_2 \Theta(\underline{t}_2, \underline{t}_1) \langle \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{1}) \rangle \quad (2.23)$$

mit einer verallgemeinerten Stufenfunktion

$$\Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \begin{cases} \Theta(t_1 - t_2) & n_1 = +, n_2 = + \\ 0 & n_1 = +, n_2 = - \\ 1 & n_1 = -, n_2 = + \\ 1 - \Theta(t_1 - t_2) & n_1 = -, n_2 = - \end{cases}. \quad (2.24)$$

Die Zeitableitungen der Stufenfunktion liefern dann:

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = n_2 \delta(n_1, n_2) \delta(t_1, t_2) \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = -n_2 \delta(n_1, n_2) \delta(t_1, t_2) \quad (2.26)$$

Außerdem benötigt man die Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren  $\hat{\Psi}(\underline{t})$ , welche aus der Heisenberg'schen Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi}^{(\dagger)}(\underline{t}) = [\hat{\Psi}^{(\dagger)}(\underline{t}), \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{WW}}] \quad (2.27)$$

folgen. Zu beachten ist, dass alle Zeiten auf der Keldysh-Kontur  $\mathcal{C}$  liegen. In der folgenden Herleitung beschränkt sich die Betrachtung auf freie Teilchen in einem Potential  $U(\mathbf{r})$  mit einer Zweiteilchen-Wechselwirkung. Der wechselwirkungsfreie Anteil



des Hamilton-Operators in 2. Quantisierung lautet

$$\hat{H}_0 = \iint d\underline{1} d\underline{2} \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}) h(\underline{1}, \underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{2}) \quad (2.28)$$

mit

$$h(\underline{1}, \underline{2}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + U(\underline{1}) \right) \delta(\underline{1}, \underline{2}) . \quad (2.29)$$

Als wechselwirkender Anteil wird eine Zweiteilchen-Wechselwirkung

$$\hat{H}_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \iint d\underline{1} d\underline{2} \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) V(\underline{1}, \underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{1}) \quad (2.30)$$

mit Wechselwirkungspotential  $V(\underline{1}, \underline{2})$  betrachtet, welches für  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2)$  gerade das Coulomb-Potential ist. Es wird sich zeigen, dass die in dieser Arbeit untersuchte Elektron-Phonon Wechselwirkung auch von dieser Form ist (Kap. 2.8). Die Feldoperatoren  $\hat{\Psi}^{(\dagger)}(\underline{1})$  genügen dabei für gleiche Zeiten den fundamentalen Vertauschungsrelationen für Fermionen:

$$\left[ \hat{\Psi}(\underline{1}), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \right]_+ \Big|_{t_1=t_2} = \delta(\underline{1}, \underline{2}) , \quad (2.31a)$$

$$\left[ \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \right]_+ \Big|_{t_1=t_2} = 0 , \quad (2.31b)$$

$$\left[ \hat{\Psi}(\underline{1}), \hat{\Psi}(\underline{2}) \right]_+ \Big|_{t_1=t_2} = 0 . \quad (2.31c)$$

Die verallgemeinerte  $\delta$ -Funktion mit Keldysh-Argumenten ist dabei definiert als

$$\delta(\underline{1}, \underline{2}) = \delta(n_1, n_2) \delta(1, 2) . \quad (2.32)$$

Aus (2.27), (2.28) und (2.30) erhält man damit die Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\Psi}(\underline{1}) = h(\underline{1}) \hat{\Psi}(\underline{1}) + \int d\underline{2} V(\underline{1}, \underline{2}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{1}) , \quad (2.33a)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}) = h(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}) + \int d\underline{2} V(\underline{1}, \underline{2}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \hat{\Psi}(\underline{2}) . \quad (2.33b)$$

Einsetzen dieser Bewegungsgleichungen in die Bewegungsgleichung für (2.23) ergibt dann

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G(\underline{1}, \underline{2}) &= \delta(\underline{1} - \underline{2}) + h(\underline{1}) G(\underline{1}, \underline{2}) \\ &\quad - \frac{n_2}{i\hbar} \int d\underline{3} V(\underline{1}, \underline{3}) \langle T_C \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}(\underline{3}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{3}^+) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2}) \rangle \\ &= \delta(\underline{1} - \underline{2}) + h(\underline{1}) G(\underline{1}, \underline{2}) - i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) , \end{aligned} \quad (2.34)$$

wobei zur Herstellung der richtigen Zeitordnung  $\underline{t}_1^+ = \underline{t}_1 + n_1\eta$  mit  $\eta \rightarrow 0$  infinitesimal später ist als  $\underline{t}_1$ . Weiterhin wurde die Zweiteilchen Green'sche Funktion

$$G(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) = \frac{n_2 n_3}{(i\hbar)^2} \frac{\langle T_C [S_C \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}(\underline{3}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{3}^+) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2})] \rangle}{\langle S_C \rangle} \quad (2.35)$$

eingeführt. Die Bewegungsgleichung für eine Einteilchen Green'sche Funktion koppelt durch die Wechselwirkung an eine Zweiteilchen Green'sche Funktion, deren Bewegungsgleichung an eine Dreiteilchen Green'sche Funktion koppelt, usw.. So entsteht eine unendliche Hierarchie von Gleichungen. Um ein geschlossenes System von Gleichungen zu erhalten, könnte man nun auf kohärente Entkopplungsschemata zurückgreifen. Man bricht dabei die Hierarchie auf einer bestimmten Stufe ab und schließt das System von Gleichungen dann durch Faktorisierung von Erwartungswerten höherer Ordnung. Allerdings ist man auf gute physikalische Argumente angewiesen, die Hierarchie überhaupt abbrechen zu können und sich auf bestimmte Klassen von Erwartungswerten zu beschränken. Bei der Untersuchung kohärenter optischer Phänomene wird dies beispielsweise mit der DCT-Theorie erfolgreich angewandt. Dort wird durch Beschränkung auf Terme einer bestimmten Ordnung in der Feldstärke  $\mathbf{E}$  des optischen Feldes die Hierarchie abgebrochen. Systematischer ist jedoch die im Folgenden vorgestellte formale Entkopplung der Bewegungsgleichung (2.34) mit der Funktionalableitungstechnik. Diese führt auf eine Dyson-Gleichung und ermöglicht damit Näherungs-Methoden aus der Diagrammtechnik zu übernehmen.

### Funktionalableitung und Diagramm-Technik

Mit der Funktionalableitungstechnik wird die Antwort des wechselwirkenden Vielteilchen-Systems  $\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{WW}}$  auf eine explizit zeitabhängige Störung  $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$  getestet. Im Folgenden wird der Grenzfall verschwindender Störung ( $\hat{H}_{\text{ext}}(t) \rightarrow 0$ ) betrachtet. Die Funktionalableitungstechnik generiert dabei Zweiteilchen Green'sche Funktionen aus erzeugenden Funktionalen durch Funktionalableitung nach der externen Störung. Als erzeugende Funktionale  $\mathcal{G}[\hat{H}_{\text{ext}}(t)]$  nimmt man die Einteilchen Green'sche Funktion im Nichtgleichgewicht:

$$i\hbar \mathcal{G}(\underline{1}, \underline{2}) = \frac{\langle T_C [S_C \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{2})] \rangle}{\langle S_C \rangle}, \quad (2.36)$$

Diese stimmen im Grenzfall  $\hat{H}_{\text{ext}}(\underline{t}) \rightarrow 0$  mit den Green'schen Funktionen (2.20) überein ( $\mathcal{G} \rightarrow G$ ). Die Abhängigkeit von der externen Störung  $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$  ist dabei nur implizit über die Zeitentwicklungs-Operatoren

$$S_C = T_C \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_C d\underline{t} \hat{H}_{\text{ext}}(\underline{t}) \right) \quad (2.37)$$

gegeben. Formal wird so zwischen einer Störung auf dem oberen und dem unteren Zweig der Keldysh-Kontur unterschieden. Physikalisch macht dies keinen Sinn und ist nur im physikalischen Limes ( $\hat{H}_{\text{ext}}(t_+) = \hat{H}_{\text{ext}}(t_-)$ ) oder im betrachteten Grenzfall  $\hat{H}_{\text{ext}}(\underline{t}) \rightarrow 0$  gültig. Als externe Störung wird ein durch externe Ladungen gebildetes Einteilchen-Potential  $U_{\text{ext}}(t)$  angenommen:

$$\hat{H}_{\text{ext}}(\underline{t}) = \int d\underline{1} U_{\text{ext}}(\underline{t}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}) \hat{\Psi}(\underline{1}) . \quad (2.38)$$

Durch Funktionalableitung der Zeitentwicklungsoperatoren (2.37) erhält man

$$\frac{\delta S_{\mathcal{C}}}{\delta U_{\text{ext}}(\underline{1})} = n_1 \frac{i}{\hbar} T_{\mathcal{C}} S_{\mathcal{C}} \hat{\Psi}(\underline{1}) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{1}^+) , \quad (2.39)$$

$$\frac{\delta}{\delta U_{\text{ext}}(\underline{1})} \frac{1}{\langle S_{\mathcal{C}} \rangle} = \frac{1}{\langle S_{\mathcal{C}} \rangle} \mathcal{G}(\underline{1}, \underline{1}^+) . \quad (2.40)$$

Damit kann nun die Funktionalableitung von (2.36) gebildet werden und man erhält die gesuchte Beziehung zwischen Ein- und Zweiteilchen Green'schen Funktionen:

$$\mathcal{G}(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) = -\frac{\delta \mathcal{G}(\underline{1}, \underline{2})}{\delta U_{\text{ext}}(\underline{3})} + \mathcal{G}(\underline{3}, \underline{3}^+) \mathcal{G}(\underline{1}, \underline{2}) . \quad (2.41)$$

Durch Einsetzen in (2.34) erkennt man zunächst, dass der rechte Summand aus (2.41) gerade die Wechselwirkung mit einer mittleren Verteilung beschreibt. Aus der Coulomb-Wechselwirkung in Hartree-Fock-Näherung kennt man dies als Hartree-Potential. Zusammen mit  $U_{\text{ext}}(\underline{1})$  liefert dies ein effektives Potential

$$U_{\text{eff}}(\underline{1}) = U_{\text{ext}}(\underline{1}) - i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{3}^+) . \quad (2.42)$$

Mit dem linken Summanden aus (2.41) definiert man nun über die Funktionalableitung die Selbstenergie  $\Sigma$ :

$$i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) \frac{\delta \mathcal{G}(\underline{1}, \underline{2})}{\delta U_{\text{ext}}(\underline{3})} \equiv \int d\underline{3} \Sigma(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) . \quad (2.43)$$

Damit hat man (2.34) in eine Dyson-Gleichung überführt:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(\underline{1}) - U_{\text{eff}}(\underline{1}) \right] G(\underline{1}, \underline{2}) - \int d\underline{3} \Sigma(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) = \delta(\underline{1}, \underline{2}) . \quad (2.44)$$

Mit der allgemeinen Definition der Inversen Green'schen Funktion

$$\int d\underline{3} G(\underline{1}, \underline{3}) G^{-1}(\underline{3}, \underline{2}) = \int d\underline{3} G^{-1}(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) = \delta(\underline{1}, \underline{2}) \quad (2.45)$$

erkennt man daraus die Inverse Green'sche Funktion  $G^{-1}$  und für den wechselwirkungsfreien Fall ( $\Sigma = 0$ ) die freie Inverse Green'sche Funktion  $G_0^{-1}$ :

$$G_0^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) = \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(\underline{1}) - U_{\text{eff}}(\underline{1}) \right] \delta(\underline{1}, \underline{2}) , \quad (2.46)$$

$$G^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) = G_0^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) - \Sigma(\underline{1}, \underline{2}) . \quad (2.47)$$

Durch wiederholten Variablenwechsel und Anwendung der Kettenregel bei der Funktionalableitung lässt sich nun ein geschlossenes System von Gleichungen konstruieren. Die wesentlichen Schritte sind im Folgenden skizziert. Eine detaillierte Herleitung ist der Literatur [34, 2] zu entnehmen. Aus (2.43) findet man für die Selbstenergie

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = \iint d\underline{4} d\underline{5} W(\underline{5}, \underline{1}^+) G(\underline{1}, \underline{4}) \Gamma(\underline{4}, \underline{2}, \underline{5}) . \quad (2.48)$$

Hierbei wurden die Vertex-Funktion

$$\Gamma(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) = \frac{\delta G^{-1}(\underline{1}, \underline{2})}{\delta U_{\text{eff}}(\underline{3})} \quad (2.49)$$

und die abgeschirmte Wechselwirkung

$$W(\underline{1}, \underline{2}) = \int d\underline{3} V(\underline{1}, \underline{3}) \varepsilon^{-1}(\underline{2}, \underline{3}) \quad (2.50)$$

mit der inversen Dielektrischen Funktion

$$\varepsilon^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) = \frac{\delta U_{\text{eff}}(\underline{1})}{\delta U_{\text{ext}}(\underline{2})} \quad (2.51)$$

eingeführt. Zur Konstruktion der analogen Ausdrücke für die abgeschirmte Wechselwirkung und die Polarisationsfunktion leitet man (2.42) gemäß (2.51) nach  $U_{\text{ext}}$  ab. Mit (2.50) erhält man dann für die abgeschirmte Wechselwirkung die Dyson-Gleichung (2.54b), wenn man die Polarisationsfunktion

$$P(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 \frac{\delta G(\underline{1}, \underline{1}^+)}{\delta U_{\text{eff}}(\underline{2})} \quad (2.52)$$

eingeführt. Mit

$$\frac{\delta}{\delta U_{\text{eff}}(\underline{2})} \int d\underline{3} G^{-1}(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) = 0 \quad (2.53)$$

kann man die Funktionalableitung auf  $G^{-1}$  überwälzen und erhält für die Polarisationsfunktion den Ausdruck (2.54d). Für ein geschlossenes System von Gleichungen muss die Vertex-Funktion (2.49) noch umgeschrieben werden. Hierzu leitet man (2.47) nach  $U_{\text{eff}}$  ab und erhält (2.54e) für die Vertex-Funktion.

Zusammenfassend ergibt sich folgendes geschlossene System von Gleichungen:

Dyson-Gleichung

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = G_0(\underline{1}, \underline{2}) + \iint d\underline{3} d\underline{4} G_0(\underline{1}, \underline{3}) \Sigma(\underline{3}, \underline{4}) G(\underline{4}, \underline{2}) \quad (2.54a)$$

$$W(\underline{1}, \underline{2}) = V(\underline{1}, \underline{2}) + \iint d\underline{3} d\underline{4} V(\underline{1}, \underline{3}) P(\underline{3}, \underline{4}) W(\underline{4}, \underline{2}) \quad (2.54b)$$

Selbstenergie und Polarisationsfunktion

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 \iint d\underline{3} d\underline{4} G(\underline{1}, \underline{3}) \Gamma(\underline{3}, \underline{2}, \underline{4}) W(\underline{4}, \underline{1}) \quad (2.54c)$$

$$P(\underline{1}, \underline{2}) = i\hbar n_1 \iint d\underline{3} d\underline{4} G(\underline{1}, \underline{3}) \Gamma(\underline{3}, \underline{4}, \underline{2}) G(\underline{4}, \underline{1}) \quad (2.54d)$$

Vertex-Funktion

$$\begin{aligned} \Gamma(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) &= -\delta(\underline{1}, \underline{2}) \delta(\underline{1}, \underline{3}) \\ &+ \iiint d\underline{4} d\underline{5} d\underline{6} d\underline{7} \frac{\delta \Sigma(\underline{1}, \underline{2})}{\delta G(\underline{4}, \underline{5})} G(\underline{4}, \underline{6}) \Gamma(\underline{6}, \underline{7}, \underline{3}) G(\underline{7}, \underline{5}) \end{aligned} \quad (2.54e)$$

Dieses Gleichungssystem ist aus der Diagramm-Technik bekannt [27], mit dem Unterschied dass alle Zeitargumente Keldysh-Zeiten sind. Die entsprechende Darstellung der Gleichungen (2.54a)-(2.54e) durch Feynman-Diagramme ist in Abb. 2.3 gezeigt. Dabei entspricht eine einfach-durchgezogene Linie einer freien Green'schen Funktion und eine doppelt-durchgezogene der vollen Green'schen Funktion. Analoges gilt für die geschlängelten Wechselwirkungslinien.

### Random-Phase-Approximation (RPA)

In einfachster Näherung wird die Vertex-Funktion (2.54e) durch eine  $\delta$ -Funktion

$$\Gamma^{\text{RPA}}(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) = -\delta(\underline{1}, \underline{2}) \delta(\underline{1}, \underline{3}) \quad (2.55)$$

genähert, d.h. Vertex-Korrekturen (2.Term in (2.54e)) werden vernachlässigt. Damit erhält man für Selbstenergie und Polarisationsfunktion:

$$\Sigma^{\text{RPA}}(\underline{1}, \underline{2}) = i\hbar n_1 G(\underline{1}, \underline{2}) W(\underline{2}, \underline{1}), \quad (2.56)$$

$$P^{\text{RPA}}(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 G(\underline{1}, \underline{2}) G(\underline{2}, \underline{1}). \quad (2.57)$$

$$\underline{1} \Rightarrow \underline{2} = \underline{1} \rightarrow \underline{2} + \underline{1} \rightarrow \overset{\underline{3}}{\bullet} \textcircled{\Sigma} \overset{\underline{4}}{\bullet} \Rightarrow \underline{2} \quad (2.54a')$$

$$\underline{1} \rightsquigarrow \underline{2} = \underline{1} \rightsquigarrow \underline{2} + \underline{1} \rightsquigarrow \overset{\underline{3}}{\bullet} \boxed{P} \overset{\underline{4}}{\bullet} \rightsquigarrow \underline{2} \quad (2.54b')$$

$$\overset{\underline{1}}{\bullet} \textcircled{\Sigma} \overset{\underline{2}}{\bullet} = \underline{1} \begin{array}{c} \overset{\underline{3}}{\bullet} \\ \nearrow \quad \searrow \\ \text{---} \Gamma \text{---} \\ \nwarrow \quad \nearrow \\ \underset{\underline{4}}{\bullet} \end{array} \underline{2} \quad (2.54c')$$

$$\overset{\underline{1}}{\bullet} \boxed{P} \overset{\underline{2}}{\bullet} = \underline{1} \begin{array}{c} \overset{\underline{3}}{\bullet} \\ \nearrow \quad \searrow \\ \text{---} \Gamma \text{---} \\ \nwarrow \quad \nearrow \\ \underset{\underline{4}}{\bullet} \end{array} \underline{2} \quad (2.54d')$$

$$\begin{array}{c} \underline{1} \\ \bullet \\ \text{---} \Gamma \text{---} \\ \bullet \\ \underline{2} \end{array} \underline{3} = - \begin{array}{c} \bullet \\ \underline{1} = \underline{2} = \underline{3} \end{array} + \begin{array}{c} \underline{1} \quad \underline{4} \quad \underline{6} \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \text{---} \delta \Sigma / \delta G \text{---} \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \underline{2} \quad \underline{5} \quad \underline{7} \end{array} \begin{array}{c} \nearrow \quad \searrow \\ \text{---} \Gamma \text{---} \\ \nwarrow \quad \nearrow \end{array} \underline{3} \quad (2.54e')$$

**Abb. 2.3:** Diagrammatische Darstellung des fundamentalen Systems von Gleichungen: (a) Dyson-Gleichung für Propagatoren, (b) Dyson-Gleichung für Wechselwirkungslinien, (c) Selbstenergie, (d) Polarisationsfunktion und (e) Vertex-Funktion.

## 2.5. Auswertung der Keldysh-Matrix

Die Keldysh-Kontur wurde eingeführt, um bei der Berechnung von Erwartungswerten die richtige Zeitordnung sicherzustellen. Dies führt auf das fundamentale Gleichungssystem (2.54) für die Keldysh-Matrix. Im Folgenden werden daraus die entsprechenden Gleichungen für die einzelnen Green'schen Funktionen der Keldysh-Matrix abgeleitet. Mit den Langreth-Wilkins Theoremen [13] gelingt dies in einfacher Weise und man erhält damit direkt die Kadanoff-Baym Gleichungen.

### Langreth-Wilkins Theoreme

Zunächst erhält man durch Wahl der Konturindizes für die Keldysh-Zeiten  $\underline{1}$  und  $\underline{2}$  in der Dyson-Gleichung (2.54a) die Dyson-Gleichung der entsprechenden Green'schen

Funktion. Die Integrationen entlang der Zeitkontur  $\mathcal{C}$  kann man dann aufspalten in zwei Integrationen über die beiden Zeitzeige:

$$\int_{\mathcal{C}} d\underline{t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt_+ - \int_{-\infty}^{+\infty} dt_- . \quad (2.58)$$

Im einfachsten Fall betrachtet man Ausdrücke der Form

$$X(\underline{1}, \underline{2}) = \int d\underline{3} \ A(\underline{1}, \underline{3}) \ B(\underline{3}, \underline{2}) . \quad (2.59)$$

Für die Terme unter dem Integral erhält man daraus mit den Definitionen (2.17) für retardierte und avancierte Green'sche Funktion die Relationen

$$(AB)^{<} = A^R B^{<} + A^{<} B^A , \quad (2.60a)$$

$$(AB)^{>} = A^R B^{>} + A^{>} B^A , \quad (2.60b)$$

$$(AB)^R = A^R B^R , \quad (2.60c)$$

$$(AB)^A = A^A B^A . \quad (2.60d)$$

Dies lässt sich leicht erweitern auf Ausdrücke mit zwei Zeitintegrationen, wie sie in der Dyson-Gleichung (2.54a) vorkommen. Für die Integranden in Integralen der Form

$$X(\underline{1}, \underline{2}) = \iint d\underline{3} d\underline{4} \ A(\underline{1}, \underline{3}) \ B(\underline{3}, \underline{4}) \ C(\underline{4}, \underline{2}) \quad (2.61)$$

erhält mit (2.60) die Beziehungen:

$$(ABC)^{<} = A^R B^R C^{<} + A^R B^{<} C^A + A^{<} B^A C^A , \quad (2.62a)$$

$$(ABC)^{>} = A^R B^R C^{>} + A^R B^{>} C^A + A^{>} B^A C^A , \quad (2.62b)$$

$$(ABC)^R = A^R B^R C^R , \quad (2.62c)$$

$$(ABC)^A = A^A B^A C^A . \quad (2.62d)$$

Gesondert betrachtet werden muss der Fall, dass Integranden singulär in der Konturzeit sind ( $A^\delta(\underline{1}, \underline{2}) \propto \delta(\underline{t}_1, \underline{t}_2)$ ). Da die Zeitargumente von Propagatoren  $A^{\gtrless}(\underline{1}, \underline{2}) = A(1_{\mp}, 2_{\pm})$  immer unterschiedliche Konturindizes haben, verschwinden diese Terme für alle Zeiten:

$$\left( A^\delta(\underline{1}, \underline{2}) \right)^{\gtrless} = A^\delta(1_{\mp}, 2_{\pm}) \ \delta(n_1, n_2) \ \delta(t_1, t_2) = 0 . \quad (2.63)$$

In retardierten und avancierten Termen liegen die Zeitargumente jeweils auf dem gleichen Zweig der Kontur und liefern daher Beiträge. Singuläre Terme in der Zeit sind also in den Relationen (2.60) und (2.62) nur noch in retardierten Größen enthalten. Damit kann die Dyson-Gleichung nun direkt von Konturzeiten in physikalische Zeiten umgeschrieben werden.

### Kadanoff-Baym Gleichungen

Aus der Dyson-Gleichung (2.54a) erhält man durch Anwenden der freien Inversen  $G_0^{-1}(\underline{1}, \underline{2})$  von links:

$$G_0^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) G(\underline{1}, \underline{2}) = \delta(\underline{1}, \underline{2}) + \int d\underline{3} \Sigma(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) . \quad (2.64)$$

Beachtet man, dass die freie Inverse instantan ist, so erhält man daraus mit den Langreth-Wilkins Theoremen (2.60) direkt die Kadanoff-Baym Gleichungen (KBE<sup>1</sup>):

$$\left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(t_1) - U_{\text{eff}}(t_1) \right] G^{\lessgtr}(1, 2) = \int d3 \left[ \Sigma^{\text{R}}(1, 3) G^{\lessgtr}(3, 2) + \Sigma^{\lessgtr}(1, 3) G^{\text{A}}(3, 2) \right] \quad (2.65a)$$

$$\left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(t_1) - U_{\text{eff}}(t_1) \right] G^{\text{R/A}}(1, 2) = \delta(1, 2) + \int d3 \Sigma^{\text{R/A}}(1, 3) G^{\text{R/A}}(3, 2) . \quad (2.65b)$$

Dies sind die Gleichungen, die im Folgenden zur Beschreibung der kinetischen und spektralen Eigenschaften gelöst werden sollen.

Mit den Kadanoff-Baym Gleichungen hat man eine nichtlineare und nichtlokale Integro-Differentialgleichung zu lösen. Je nach betrachteter Selbstenergie enthält diese wiederum die gesuchten Green'schen Funktionen und liefert damit Nichtlinearitäten. Aufgrund der Integrale ist eine Abhängigkeit vom gesamten Raum bzw. der gesamten Zeitachse gegeben und es entsteht ein nicht-lokales Problem. Darüber hinaus hängen alle Größen von zwei Zeiten ab. Außerdem entsteht über die Selbstenergie eine Kopplung der beiden Kadanoff-Baym Gleichungen für  $G^{\text{R}}$  und  $G^{\lessgtr}$ . Die entsprechenden Kadanoff-Baym Gleichungen mit Ableitungen nach dem zweiten Zeitargument ergeben sich aus (2.65) mit den Relationen (2.18) durch komplexes Konjugieren.

## 2.6. Zweizeiten-Formalismus und Näherungs-Schemata

Die Lösung der Kadanoff-Baym Gleichungen (2.65) in voller Allgemeinheit ist sehr komplex und praktisch nicht durchführbar. In diesem Abschnitt wird daher eine Transformation der zwei Zeitargumente vorgestellt, die eine physikalische Interpretation ermöglicht. Diese dient dann als Ausgangspunkt für Näherungen.

---

<sup>1</sup>engl.: Kadanoff-Baym equations



Die Zeitebene, welche von den allgemeinen Zeiten  $t_1$  und  $t_2$  aufgespannt wird, betrachtet man am anschaulichsten in Schwerpunkt-Zeit  $t$  und Relativzeit  $t_r$ . Die Transformation dafür ist:

$$\begin{aligned} t &= \frac{t_1 + t_2}{2} & \text{bzw.} & & t_1 &= t + \frac{t_r}{2} \\ t_r &= t_1 - t_2 & & & t_2 &= t - \frac{t_r}{2} \end{aligned} \quad (2.66)$$

Entsprechend transformieren in den Kadanoff-Baym Gleichungen (2.65) die Differential-Operatoren:

$$\frac{\partial}{\partial t_1} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t_r} \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial t_2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t_r} . \quad (2.67)$$

Die Schwerpunkt-Zeit  $t$  beschreibt dabei eine makroskopische Zeitabhängigkeit wie sie z.B. durch externe Störungen gegeben ist, während die Relativ-Zeit  $t_r$  die mikroskopische Zeitabhängigkeit durch interne Wechselwirkungsprozesse beschreibt. Durch Addition oder Subtraktion der Kadanoff-Baym Gleichungen (2.65) zu Ableitungen nach  $t_1$  bzw.  $t_2$  legt man nun fest, ob man die Bewegungsgleichung im mikroskopischen oder makroskopischen Zeitregime betrachten möchte.

Die Wechselwirkungsterme der Kadanoff-Baym Gleichungen (2.65) haben die Form

$$I(t_1, t_{1'}) = \int dt_2 A(t_1, t_2) B(t_2, t_{1'}) . \quad (2.68)$$

Transformation auf Schwerpunkt- und Relativ-Zeiten liefert

$$I\left(t_1 - t_{1'}, \frac{t_1 + t_{1'}}{2}\right) = \int dt_2 A\left(t_1 - t_2, \frac{t_1 + t_2}{2}\right) B\left(t_2 - t_{1'}, \frac{t_2 + t_{1'}}{2}\right) . \quad (2.69)$$

Für ein System im thermodynamischen Gleichgewicht entfällt die makroskopische Zeitabhängigkeit und es verbleibt nur die Abhängigkeit von der Relativ-Zeit. Nach einer Transformation  $t_1 - t_{1'} = \tau$  und  $t_2 - t_{1'} = \tau'$  erhält man ein Faltungs-Integral und es bietet sich eine Fourier-Transformation an. Im Allgemeinen aber besteht aufgrund des Zeit-Integrals eine komplizierte Zeitabhängigkeit. Da sich das Zeitintegral über die komplette Vergangenheit des Systems erstreckt, hängen Größen zur aktuellen Zeit von ihren Werten zu früheren Zeiten ab und es entstehen sogenannte Gedächtnis-Effekte.

### Verallgemeinerter Kadanoff-Baym Ansatz

In kinetischen Rechnungen ist nur die Kadanoff-Baym Gleichung (2.65a) für den zeit-diagonalen Propagator  $G^<(t_1 = t_2)$  von Bedeutung, da dieser gerade die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Energiezustände des Systems beschreibt. Aber auch in diesem Fall stehen in (2.65a) unter dem Zeitintegral noch zweizeitige Propagatoren und

es ist weiterhin das volle Zweizeiten-Problem zu lösen. Mit dem Verallgemeinerten Kadanoff-Baym Ansatz (GKBA<sup>2</sup>)

$$G^{\lessgtr}(t_1, t_2) = i\hbar \left[ G^R(t_1, t_2) G^{\lessgtr}(t_2, t_2) - G^{\lessgtr}(t_1, t_1) G^A(t_1, t_2) \right] \quad (2.70)$$

lässt sich dies deutlich vereinfachen [13, 34, 2, 20]. Der GKBA rekonstruiert zweizeitige Propagatoren  $G^{\lessgtr}(t_1, t_2)$  aus ihren Zeit-Diagonalelementen  $G^{\lessgtr}(t_1 = t_2)$  und zweizeitigen Spektralfunktionen  $G^{R/A}(t_1, t_2)$ . Hilfreich ist dabei eine besonders einfache Zeitabhängigkeit der zweizeitigen Spektralfunktionen wie z.B.  $G^{R/A}(t_1, t_2) = G^{R/A}(t_1 - t_2)$ .

P. Gartner u. a. [9] haben die volle Zweizeiten-Rechnung mit Ergebnissen in GKBA Näherung verglichen. Untersucht wird dort die LO-Phonon-Streuung in Volumen-Materialien mit demselben Modell für die retardierte Green'sche Funktion, wie es auch in dieser Arbeit verwendet wird (vgl. Kap. 3.2). Für schwache LO-Phonon-Kopplung ( $\alpha \ll 1$ ) stimmen die Ergebnisse sehr gut überein, während für mittlere LO-Phonon-Kopplung ( $\alpha \approx 1$ ) Abweichungen auftreten. Die LO-Phonon-Kopplung für das in dieser Arbeit betrachtete Materialsystem beträgt  $\alpha = 0,06$ , weswegen der GKBA eine gute Näherung ist.

## 2.7. Entwicklung nach Eigenfunktionen

Die Dyson-Gleichung (2.54a) mit der RPA-Selbstenergie (2.56) soll nach Einteilchen-Eigenfunktionen  $\Phi_n(\mathbf{r}, s)$  entwickelt werden. Für Keldysh-Matrix und Selbstenergie ergibt eine Entwicklung nach Eigenfunktionen allgemein:

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = \sum_{n_1, n_2} \Phi_{n_1}(\mathbf{r}_1, s_1) G_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \Phi_{n_2}^*(\mathbf{r}_2, s_2) , \quad (2.71)$$

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = \sum_{n_1, n_2} \Phi_{n_1}(\mathbf{r}_1, s_1) \Sigma_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \Phi_{n_2}^*(\mathbf{r}_2, s_2) . \quad (2.72)$$

Als orthogonale Einteilchen-Basis werden die in Kap. A.1 diskutierten Einteilchen-Zustände verwendet. Diese setzen sich aus diskreten Quantenpunkt-Zuständen  $\{\mathbf{R}, m\}$  und kontinuierlichen Zuständen  $\{\mathbf{k}\}$  der Benetzungsschicht zusammen. Zusätzlich tragen alle Zustände einen Bandindex  $\lambda \in \{c, v\}$ . Nicht berücksichtigt wird der Spin  $s$ , da die Elektron-Phonon-Wechselwirkung keine unterschiedlichen Spins koppelt. Die folgende Betrachtung beschränkt sich daher auf Teilchen einer Spinausrichtung. Für die Entwicklungsindizes  $n$  gilt dabei  $n \in \{\alpha, \lambda\}$  mit  $\alpha \in \{\mathbf{k}\} \cup \{\mathbf{R}, m\}$  und Summationen

---

<sup>2</sup>engl.: generalized Kadanoff-Baym ansatz

sind gemäß

$$\sum_n \Longleftrightarrow \sum_\lambda \left[ \int d^2\mathbf{k} + \sum_m \sum_{\mathbf{R}} \right] \quad (2.73)$$

zu lesen. Aus der Dyson-Gleichung (2.54a) und der Selbstenergie (2.56) erhält man:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{t}_1} - h_{n_1}(\underline{t}_1) \right] G_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \delta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) + \sum_{n_3} \int d\underline{t}_3 \Sigma_{n_1, n_3}(\underline{t}_1, \underline{t}_3) G_{n_3, n_2}(\underline{t}_3, \underline{t}_2) , \quad (2.74)$$

$$\Sigma_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \sum_{n_3, n_4} W_{n_1, n_2, n_3, n_4}(\underline{t}_2, \underline{t}_1) G_{n_3, n_4}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) . \quad (2.75)$$

Diese Gleichungen enthalten nichtdiagonale Kopplungen in allen Entwicklungsindizes. Durch physikalische Annahmen kann die Anzahl der Kopplungen verringert werden. Für eine hinreichend kleine Quantenpunkt-Dichte ist der Einfluss der Quantenpunkte auf die Ladungsträger in der Benetzungsschicht gering. Die Benetzungsschicht ist damit in guter Näherung in der Wachstumsebene räumlich homogen. Aufgrund der damit verbundenen Translationsinvarianz tragen nur diagonale Elemente im Impuls  $\mathbf{k}$  bei:

$$G_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \longrightarrow G_{\lambda_1, \lambda_2}(\mathbf{k}_1; \underline{t}_1, \underline{t}_2) \cdot \delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) , \quad (2.76)$$

$$\Sigma_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \longrightarrow \Sigma_{\lambda_1, \lambda_2}(\mathbf{k}_1; \underline{t}_1, \underline{t}_2) \cdot \delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) . \quad (2.77)$$

Für diskrete Quantenpunkt-Zustände  $\{\mathbf{R}, m\}$  verschwinden bei geringer Dichte der Quantenpunkte die Korrelationen zwischen Quantenpunkten an verschiedenen Positionen  $\mathbf{R}$ . Betrachtet man dabei nur Terme die diagonal in  $m$  sind, so erhält man

$$G_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \longrightarrow G_{\lambda_1, \lambda_2}(\mathbf{R}_1, m_1; \underline{t}_1, \underline{t}_2) \cdot \delta(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \delta(m_1, m_2) , \quad (2.78)$$

$$\Sigma_{n_1, n_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \longrightarrow \Sigma_{\lambda_1, \lambda_2}(\mathbf{R}_1, m_1; \underline{t}_1, \underline{t}_2) \cdot \delta(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \delta(m_1, m_2) . \quad (2.79)$$

Eine weitere Möglichkeit sind Kreuz-Korrelationen, d.h. Green'sche Funktionen die einen Quantenpunkt-Zustand mit einem Zustand der Benetzungsschicht verknüpfen. Auch derartige Korrelationen werden als vernachlässigbar angesehen. Die Gültigkeit dieser Annahmen wird durch genauere Untersuchungen von nichtdiagonalen Beiträgen zur retardierten Green'schen Funktion in Kap. 3.5 bestätigt. Zusammenfassend betrachtet man nur Green'sche Funktionen, die diagonal in  $\alpha$  sind. Die Wechselwirkung koppelt dabei nur innerhalb der Selbstenergie verschiedene Zustände:

$$\Sigma_{\lambda_1, \lambda_2}(\alpha; \underline{t}_1, \underline{t}_2) = \sum_{\lambda_3, \lambda_4, \beta} W_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4}(\alpha, \beta; \underline{t}_2, \underline{t}_1) G_{\lambda_3, \lambda_4}(\beta; \underline{t}_1, \underline{t}_2) . \quad (2.80)$$

In dieser Näherung erhält man die Dyson-Gleichung

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_{\lambda_1}(\alpha; t_1) \right] G_{\lambda_1, \lambda_2}(\alpha; t_1, t_2) = \delta(t_1, t_2) + \sum_{\lambda_3} \int dt_3 \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}(\alpha; t_1, t_3) G_{\lambda_3, \lambda_2}(\alpha; t_3, t_2) . \quad (2.81)$$

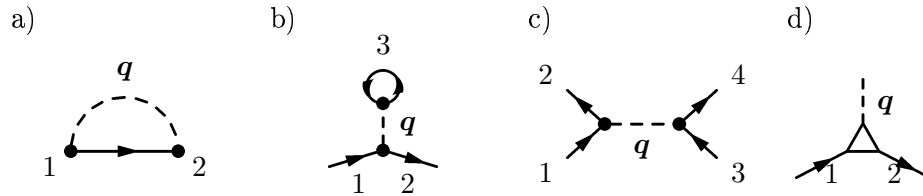
Die diagonalen Beiträge im Bandindex  $\lambda$  beschreiben dabei Intraband-Prozesse, während die nichtdiagonalen Beiträge Interband-Prozesse beschreiben.

## 2.8. Selbstenergie und Fröhlich-Polaron

Durch Auswahl von Selbstenergie-Diagrammen bestimmt man die Näherung der exakten Dyson-Gleichung (2.54a). In dieser Arbeit wird die polaronische Selbstenergie in RPA-Näherung verwendet:

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = G(\underline{1}, \underline{2}) D(\underline{2}, \underline{1}) . \quad (2.82)$$

Diese ist in Abb. 2.4 (a) dargestellt und entspricht formal gerade dem abgeschirmten Austausch-Term der Coulomb-Wechselwirkung. Dabei ist die Wechselwirkungsline  $W(\underline{2}, \underline{1})$  der Coulomb-Wechselwirkung durch eine Linie der Elektron-Phonon Wechselwirkung  $D(\underline{2}, \underline{1})$  zu ersetzen. Diese Wechselwirkungsline besteht aus zwei Elektron-Phonon-Vertizes, verbunden durch einen Phonon-Propagator (Abb. 2.4 (c)). Ein Vertex der Elektron-Phonon Wechselwirkung koppelt dabei zwei Einteilchen-Zustände mit einer Phonon-Mode  $\mathbf{q}$  (Abb. 2.4 (d)). Abgebildet ist dies in Abb. 2.4, wobei Phonon-Propagatoren durch eine gestrichelte Linie dargestellt sind.



**Abb. 2.4:** Feynman-Diagramme zur Elektron-Phonon Wechselwirkung: (a) RPA Selbstenergie-Diagramm mit Phonon-Wechselwirkungsline (Austausch-Term), (b) RPA Selbstenergie-Diagramm mit Phonon-Wechselwirkungsline (Direkter Term), (c) Phonon-Wechselwirkungsline aus zwei Elektron-Phonon-Wechselwirkungsvertizes, verbunden durch einen Phonon-Propagator, (d) Wechselwirkungsvertex der Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

Im Folgenden wird die Selbstenergie mit der Diagramm-Technik hergeleitet [22, 29]. Eine gleichwertige Herleitung mit der Funktionalableitungstechnik findet man in [34].

Durch entsprechende Wahl der Konturindizes  $t_{\pm}$  in (2.82) ergibt sich zunächst

$$\Sigma^{\gtrless}(1, 2) = G^{\gtrless}(1, 2) D^{\lessgtr}(2, 1) . \quad (2.83)$$

Aus den Feynman-Regeln [27, 22] erhält man dann

$$\Sigma^{\gtrless}(1, 1') = \int d2 \int d3 \sum_{\mathbf{q}} M_{1,2}(\mathbf{q}) d^{\lessgtr}(\mathbf{q}; t_2, t_3) M_{3,1'}(-\mathbf{q}) G^{\gtrless}(2, 3) . \quad (2.84)$$

In dem Modellsystem werden Phononen im thermodynamischen Gleichgewicht betrachtet. Für den freien Phonon-Propagator gilt daher

$$\begin{aligned} d^{\gtrless}(\mathbf{q}; t_2, t_1) &= \langle [\hat{b}_{\mathbf{q}}(t_2) + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}(t_2)] [\hat{b}_{-\mathbf{q}}(t_3) + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}(t_3)] \rangle \\ &= (1 + N_{\mathbf{q}}) e^{\pm i\omega_{\mathbf{q}}(t_1 - t_2)} + N_{\mathbf{q}} e^{\mp i\omega_{\mathbf{q}}(t_1 - t_2)} , \end{aligned} \quad (2.85)$$

wobei die Phonon-Moden gemäß der Bose-Verteilung

$$N_{\mathbf{q}} = \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mathbf{q}}/kT} - 1} \quad (2.86)$$

besetzt sind. An dieser Stelle müsste eigentlich der volle Phonon-Propagator zur Beschreibung des Phononen-Systems eingehen. Für das Phonon-System wäre dabei ein zum Elektronen-System analoges Gleichungssystem (2.54a)-(2.54e) zu lösen. Dies ist natürlich ein numerisch nicht zu bewältigender Aufwand und auch gar nicht Gegenstand dieser Arbeit. Da die betrachtete Halbleiter-Nanostruktur nur einen kleinen Teil des Volumen-Kristalls ausmacht, ist der renormierende Einfluss vernachlässigbar. Der Phonon-Propagator des Volumen-Kristalls wird daher eine gute Näherung sein. Außerdem ist die Phonon-Energie sehr viel kleiner als die Bandlücke, wodurch ein Phonon kein Elektron-Loch-Paar erzeugen kann. Die Näherung durch den freien Phonon-Propagator ist daher gerechtfertigt. Damit kann die Wechselwirkungslinie der Elektron-Phonon Wechselwirkung für band-diagonale Beiträge in die Form

$$D^{\gtrless}(\alpha, \beta; t_2, t_1) = \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) M_{\beta,\alpha}(-\mathbf{q}) d^{\gtrless}(t_2, t_1) \quad (2.87)$$

gebracht werden, welche der abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung aus (2.80) entspricht. Die formale Analogie zu einer abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung ist damit hergestellt. Explizit sichtbar wird dies noch einmal bei der Diskussion der Matrixelemente in Anh. A.2.1. In der nach Eigenfunktionen entwickelten RPA-Selbstenergie (2.80) ist daher für die Elektron-Phonon Wechselwirkung die Wechselwirkung gemäß

$$W(\alpha, \beta; \underline{t}_2, \underline{t}_1) \longrightarrow D(\alpha, \beta; \underline{t}_2, \underline{t}_1) = \sum_{\mathbf{q}} |M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q})|^2 d^{\gtrless}(\underline{t}_2, \underline{t}_1) \quad (2.88)$$

zu ersetzen. Berücksichtigt man, wie in Abschn. 2.7 diskutiert, nur diagonale Green'sche Funktionen, so gilt in (2.84) für die inneren Vertizes  $2 = 3$ . Vernachlässigt man noch die Dispersion der Phononen,  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\text{LO}}$ , so erhält man die Selbstenergie

$$\begin{aligned} \Sigma^{\lessgtr}(1, 1') = \int d2 \sum_{\mathbf{q}} M_{1,2}(\mathbf{q}) M_{2,1'}(\mathbf{q}) G^{\lessgtr}(2, 2) \\ \times \left[ (1 + N_{\text{LO}}) e^{\pm i\omega_{\text{LO}}(t_1 - t_2)} + N_{\text{LO}} e^{\mp i\omega_{\text{LO}}(t_1 - t_2)} \right]. \quad (2.89) \end{aligned}$$

Nicht diskutiert wurde bislang das zweite Selbstenergie-Diagramm erster Ordnung (Abb. 2.4 (b)), welches in dem betrachteten Modellsystem vernachlässigt werden kann. Für das Modellsystem wird ein unangeregter Kristall angenommen, d.h. es befinden sich keine Elektronen im Leitungsband und keine Löcher im Valenzband. Eine Einteilchen-Selbstenergie beschreibt dann die Wechselwirkung eines einzelnen Ladungsträgers mit Phononen. In dem betrachteten System hat das Elektron bzw. Loch keinen Partner mit dem es ein Phonon austauschen kann, womit anschaulich klar ist, dass das Selbstenergie-Diagramm Abb. 2.4 (b) keinen Beitrag liefert. Mit Zweizeiten-Rechnungen konnte gezeigt werden, dass die Annahme eines unangeregten Kristalls auch für mittlere Ladungsträger-Dichten eine gute Näherung ist und die spektralen Eigenschaften (retardierte Green'sche Funktion) nur eine geringe Abhängigkeit von der Ladungsträger-Dichte aufweisen [9]. Die Berücksichtigung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung durch eine Einteilchen-Selbstenergie für einen unangeregten Kristall entspricht gerade dem Polaron-Bild. Näheres zu Polaronen wird in Kap. 3 diskutiert.

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

Die theoretischen Methoden zur Beschreibung der betrachteten Struktur aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht (Kap. 1) wurden im letzten Kapitel erläutert. In diesem Kapitel sollen die spektralen Eigenschaften, d.h. die Eigenenergien des Systems untersucht werden. Dazu wird zunächst die retardierte Green'sche Funktion und deren Interpretation als Spektralfunktion näher betrachtet. Nach der Herleitung der Kadanoff-Baym Gleichung für die retardierte Green'sche Funktion wird diese Integro-Differentialgleichung in der Zeit gelöst und diskutiert. Anschließend werden die Eigenenergien des Systems im Frequenzraum untersucht. Es wird zunächst die Energiedispersion von Ladungsträgern in der Benetzungsschicht und deren Renormierung betrachtet. Die Ladungsträger werden dabei als Polaronen beschrieben, welche eine gekoppelte Anregung aus Ladungsträgern und Phononen darstellen. Auch in diskreten Quantenpunktzuständen besteht eine starke Kopplung der Energie-Niveaus, weswegen sich das Konzept des Polarons auf Quantenpunkte übertragen lässt. Abschließend wird das Energiespektrum des vollständigen Systems aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht vorgestellt.

#### 3.1. Quasiteilchen-Renormierungen

Bei der Interpretation der retardierten Green'schen Funktion ist es hilfreich, zunächst die retardierte Green'sche Funktion  $G_0^R$  eines freien Teilchens zu betrachten. Die grundlegende Struktur und das Konzept von Quasiteilchen ist daran leicht einsehbar. Aus (2.81) erhält man für ein freies Teilchen ( $W = 0$ ,  $\lambda_1 = \lambda_2$ ,  $\tau = t_1 - t_2$ ) die Dyson-Gleichung

$$\left( i\hbar \frac{d}{d\tau} - \epsilon_\alpha \right) G_0^R(\alpha; \tau) = \delta(\tau) . \quad (3.1)$$

Als Lösung dieser inhomogenen Differentialgleichung erhält man

$$G_0^R(\alpha; \tau) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_\alpha \tau} . \quad (3.2)$$

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

---

Im wechselwirkungsfreien Fall ergibt die retardierte Green'sche Funktion eine ungedämpfte Oszillation, deren Frequenz die freien Einteilchen-Energien sind:  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\alpha^0$ . Für wechselwirkende Systeme erhält man im einfachsten Fall eine Renormierung  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\alpha^0 + (\Delta_\alpha - i\Gamma_\alpha)$  der freien Einteilchen-Energien. Die Renormierung bewirkt eine Frequenzverschiebung  $\Delta_\alpha$  und eine Dämpfung  $\exp(-\Gamma_\alpha/\hbar)$  der Oszillationen. Lässt sich eine kompliziertere Green'sche Funktion  $G^R(\alpha; \omega)$  als Überlagerung gedämpfter Oszillationen darstellen, so wird jede Oszillation als ein Quasiteilchen interpretiert. Die Dämpfung der Oszillationen beschreibt dabei die Lebensdauer der Quasiteilchen. Überlagerungen von Oszillationen analysiert man am besten im Frequenzraum. Stellt man die Stufenfunktion durch  $\Theta(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \frac{e^{i\omega\tau}}{\omega - i\eta}$  mit  $\eta \rightarrow +0$  dar, so erhält man aus (3.2) die Fourier-Transformierte

$$G_0^R(\alpha; \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_\alpha + i\eta} . \quad (3.3)$$

Die freie Green'sche Funktion hat also infinitesimal unterhalb der reellen Achse einen Pol, deren Realteil der freien Einteilchen-Energie entspricht. Aufgrund der Stufenfunktion in der Definition (3.2) haben auch renormierte Green'sche Funktionen Pole in der unteren komplexen Halbebene, die gerade den Energie-Eigenwerten des Systems entsprechen. Eine einfache Renormierung  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\alpha^0 + (\Delta_\alpha - i\Gamma_\alpha)$  der freien Einteilchen-Energien verschiebt die Pole in der komplexen Ebene, wobei der Imaginärteil die Lebensdauer der Quasiteilchen beschreibt. In allgemeiner Form sind die Renormierungen durch die Selbstenergie gegeben. Diese kann von der Zeit bzw. Frequenz abhängen und verschiedene Zustände  $\alpha$  koppeln. Es ist also im Allgemeinen eine komplizierte Polstruktur bzw. Überlagerung von Oszillationen zu erwarten und durch die Renormierung können so aus freien Einteilchen-Zuständen ein oder mehrere Quasiteilchen mit endlicher Lebensdauer entstehen.

#### Spektralfunktion und Zustandsdichte

Die retardierte Green'sche Funktion  $G^R(\alpha; \hbar\omega)$  kann als spektrale Dichte des Zustandes  $\alpha$  interpretiert werden. Hierzu definiert man durch Linearkombination der Propagatoren  $G^\lessgtr(\alpha; \hbar\omega)$  die Spektralfunktion:

$$\hat{G}(\alpha; \hbar\omega) \equiv \frac{i}{2\pi} [G^>(\alpha; \hbar\omega) - G^<(\alpha; \hbar\omega)] \quad (3.4a)$$

$$= \frac{i}{2\pi} [G^R(\alpha; \hbar\omega) - G^A(\alpha; \hbar\omega)] \quad (3.4b)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im } G^R(\alpha; \hbar\omega) . \quad (3.4c)$$

Für freie Teilchen (nicht-wechselwirkendes System) erhält man die Spektralfunktion aus (3.3) mit der Dirac-Identität. Die Spektralfunktion besteht dann aus  $\delta$ -



Resonanzen an den freien Einteilchen-Energien:

$$\hat{G}(\alpha; \hbar\omega) = \delta(\hbar\omega - \epsilon_\alpha^0) . \quad (3.5)$$

Bezeichnet  $\alpha$  einen kontinuierlichen Zustand in einem Quantenfilm, so beschreibt die Spektralfunktion  $\hat{G}(\alpha; \hbar\omega)$  für freie Einteilchen-Energien in Effektiv-Masse-Näherung gerade eine parabolische Dispersion. Sie liefert also die Energie  $\hbar\omega$  des Zustandes  $\alpha$ . In wechselwirkenden Systemen erhält man eine Verbreiterung der  $\delta$ -förmigen Resonanzen. Für den Fall einer einfachen Renormierung  $\epsilon_\alpha = \epsilon_\alpha^0 + (\Delta_\alpha - i\Gamma_\alpha)$  erkennt man durch Erweiterung von (3.3) mit dem komplex-konjugierten Nenner eine Lorentz-Funktion:

$$\hat{G}(\alpha; \hbar\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_\alpha}{(\hbar\omega - \epsilon_\alpha^0 - \Delta_\alpha)^2 + \Gamma_\alpha^2} . \quad (3.6)$$

Die Breite der Resonanzen ist dabei durch den Imaginärteil der Renormierung bestimmt. Eine wichtige Eigenschaft der Spektralfunktion (3.4) ist ihre Normierung für jeden Zustand  $\alpha$ :

$$\int d(\hbar\omega) \hat{G}(\alpha; \hbar\omega) = 1 . \quad (3.7)$$

Damit erhält die Spektralfunktion die Interpretation als spektrale Dichte des Zustandes  $\alpha$  bei der Energie  $\hbar\omega$ . Umgekehrt ergibt sich durch eine Summation über alle Zustände  $\alpha$  direkt die Zustandsdichte  $D(\hbar\omega)$  des Systems:

$$D(\hbar\omega) = \sum_{\alpha} \hat{G}(\alpha; \hbar\omega) . \quad (3.8)$$

## 3.2. Berechnung der retardierten Green'schen Funktion

Nachdem im letzten Abschnitt die Interpretation der retardierten Green'schen Funktion als spektrale Dichte erläutert wurde, folgt nun deren Berechnung. Dazu wird die Kadanoff-Baym Gleichung (2.65b) für die retardierte Green'sche Funktion mit der Selbstenergie aus Kap. 2.8 gelöst. Die in Kap. 2.5 beschriebene Kopplung von spektralem und kinetischem Problem wird dabei durch Annahme eines unangeregten Kristalls aufgehoben. Nach einer Herleitung der Bewegungsgleichung und deren numerischer Lösung werden die Ergebnisse vorgestellt.

### Kadanoff-Baym Gleichung

Mit den Langreth-Wilkins Theoremen (2.60) ergibt sich aus der allgemeinen Dyson-Gleichung (2.81) die entsprechende Kadanoff-Baym Gleichung für die retardierte

Green'sche Funktion:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_{\lambda_1}(\alpha; t_1) \right) G_{\lambda_1, \lambda_2}^R(\alpha; t_1, t_2) = \delta(t_1, t_2) + \sum_{\lambda_3} \int dt_3 \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^R(\alpha; t_1, t_3) G_{\lambda_3, \lambda_2}^R(\alpha; t_3, t_2) . \quad (3.9)$$

Dabei beschränkt sich, gemäß den Modell-Annahmen aus Kap. 2.1, das System auf Valenz- und Leitungsband ( $\lambda \in \{c, v\}$ ). Da Phononen (36 meV) keine Ladungsträger über die Bandlücke (1,52 eV) anregen können, tragen nur Intraband-Prozesse bei. Es verbleiben also nur diagonale Beiträge im Bandindex  $\lambda$ . Über die Selbstenergie  $\Sigma^R$  sind, wie in Kap. 2.5 erläutert, spektrales und kinetisches Problem gekoppelt. Für eine Entkopplung nimmt man einen unangeregten Kristall an, d.h. es befinden sich keine Elektronen im Leitungsband und keine Löcher im Valenzband. Da ein unangeregtes System keine Ladungsträger enthält, befindet sich das elektronische System immer im Gleichgewicht. Bei einer Transformation auf Schwerpunktzeit und Relativzeit verbleibt daher nur die Abhängigkeit von der Relativzeit  $\tau = t_1 - t_2$  (vgl. Kap. 2.6). Nach einer Transformation  $t_3 - t_2 \rightarrow \tau'$  der Zeitargumente erhält man damit aus (3.9) die Gleichung

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \epsilon_\alpha \right) G^R(\alpha; \tau) = \delta(\tau) + \int_0^\tau d\tau' \Sigma^R(\alpha; \tau - \tau') G^R(\alpha; \tau') . \quad (3.10)$$

Durch eine weitere Transformation

$$G^R(\alpha; \tau) = G_0^R(\alpha; \tau) \mathcal{G}(\alpha; \tau) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-i/\hbar \epsilon_\alpha \tau} \mathcal{G}(\alpha; \tau) \quad (3.11)$$

stellt man  $G^R(\alpha; \tau)$  als ein Produkt aus freier retardierter Green'scher Funktion  $G_0^R(\alpha; \tau)$  und einer komplexen Renormierungsfunktion  $\mathcal{G}(\alpha; \tau)$  dar. Einsetzen in (3.10) liefert für diese Renormierungsfunktion die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(\alpha; \tau) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau d\tau' \Sigma^R(\alpha; \tau - \tau') \mathcal{G}(\alpha; \tau') e^{i/\hbar \epsilon_\alpha (\tau - \tau')} . \quad (3.12)$$

Die Anfangsbedingung erhält man dabei aus der Definition (2.17) der retardierten Green'schen Funktion, da diese für gleiche Zeiten  $t_1 = t_2$  gerade einen Kommutator enthält:

$$G^R(\alpha; 0) = -\frac{i}{\hbar} \left[ \langle \hat{\Psi}(1) \hat{\Psi}^\dagger(2) \rangle + \langle \hat{\Psi}^\dagger(2) \hat{\Psi}(1) \rangle \right]_{t_1=t_2} = -\frac{i}{\hbar} . \quad (3.13)$$

Mit (3.11) folgt daraus für die Anfangsbedingung der Renormierungsfunktion:

$$\mathcal{G}^R(\alpha; 0) = 1 . \quad (3.14)$$

Zu frühen Zeiten ( $\tau \approx 0$ ) erfahren die Teilchen also keine Renormierung. Die Renormierung bildet sich dann erst mit fortschreitender Zeit aus.

Für kinetische Rechnungen mit Besetzungswahrscheinlichkeiten  $f \neq 0$  gilt die Annahme eines unangeregten Kristalls strenggenommen nicht mehr. Da sich aber die spektralen Eigenschaften bei geringen Ladungsträger-Dichten nicht ändern, ist ein unangeregter Kristall eine gute Näherung [9].

### Selbstenergie

Benötigt wird noch die retardierte Selbstenergie  $\Sigma^R(\alpha; \tau)$ . Diese ergibt sich aus der in Abschn. 2.8 erläuterten RPA-Selbstenergie (2.89). Analog zu (2.17) erhält man daraus die retardierte Selbstenergie

$$\begin{aligned}\Sigma^R(1, 2) &= \Theta(t_1 - t_2) [\Sigma^>(1, 2) - \Sigma^<(1, 2)] \\ &= \Theta(t_1 - t_2) [G^>(1, 2)D^<(2, 1) - G^<(1, 2)D^>(2, 1)] ,\end{aligned}\quad (3.15)$$

in der spektrales und kinetisches Problem über die Propagatoren  $G^{\lessgtr}$  gekoppelt sind. In einem unangeregten Kristall ist im cv-Bild das Leitungsband leer ( $f_c = 0$ ) und das Valenzband voll besetzt ( $f_v = 1$ ). Im Gleichgewicht hängen die Propagatoren nur von der Zeitdifferenz  $\tau = t_1 - t_2$  ab und können mit der Besetzung des Leitungsbandes ( $-i\hbar G_{c,c}^<(\tau) = f_c = 0$ ) und der des Valenzbandes ( $i\hbar G_{v,v}^>(\tau) = 1 - f_v = 0$ ) identifiziert werden. Nach (2.17) können damit in (3.15) Propagatoren gemäß

$$G_{c,c}^R(\alpha; \tau) = \Theta(\tau) G_{c,c}^>(\alpha; \tau) \quad (3.16)$$

$$G_{v,v}^R(\alpha; \tau) = -\Theta(\tau) G_{v,v}^<(\alpha; \tau) \quad (3.17)$$

durch retardierte Green'sche Funktionen ersetzt werden. Dadurch entkoppeln spektrales und kinetisches Problem:

$$\Sigma_{c,c}^R(\alpha; \tau) = \Theta(\tau) \sum_{\beta} G_{c,c}^R(\beta; \tau) D^<(\alpha, \beta; -\tau) \quad (3.18)$$

$$\Sigma_{v,v}^R(\alpha; \tau) = \Theta(\tau) \sum_{\beta} G_{v,v}^R(\beta; \tau) D^>(\alpha, \beta; -\tau) . \quad (3.19)$$

Gemäß den Annahmen aus Abschn. 2.7 werden dabei nur diagonale Beiträge berücksichtigt. Zum gleichen Ergebnis gelangt man, wenn in (3.15) für zweizeitige Propagatoren der verallgemeinerte Kadanoff-Baym Ansatz (2.70) benutzt und dabei die Bedingung des leeren Kristalls berücksichtigt wird. Der Wechsel vom cv-Bild in das Elektron-Loch Bild erfolgt für Valenzband-Elektronen durch Adjungieren:  $[G_{v,v}]^* = G_h$ . Die Bewegungsgleichung (3.12) ist dann für Elektronen und Löcher identisch. Mit der Transformation (3.11) und der Elektron-Phonon-Wechselwirkungslinie (2.87) erhält man damit die retardierte Selbstenergie für Elektronen und Löcher:

$$\begin{aligned} \Sigma^{\text{R}}(\alpha; \tau) = \sum_{\beta} \sum_{\mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 \mathcal{G}(\beta; \tau) e^{-i/\hbar \epsilon_{\beta} \tau} \\ \times \left[ (N_{\text{LO}} + 1) e^{-i\omega_{\text{LO}} \tau} + N_{\text{LO}} e^{i\omega_{\text{LO}} \tau} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

#### Asymptotische Lösung

Die asymptotische Lösung der Kadanoff-Baym Gleichung (3.12) mit der Selbstenergie (3.20) kann man analytisch verstehen [4, 12]. Unter der Annahme, dass in (3.12) die Selbstenergie  $\Sigma^{\text{R}}$  hinreichend schnell verschwindet gilt für  $\tau \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(\alpha; \tau) &\approx -\frac{i}{\hbar} \mathcal{G}(\alpha; \tau) \int_0^{\infty} d\tau' \Sigma^{\text{R}}(\alpha; \tau') e^{i/\hbar \epsilon_{\alpha}(\tau')} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{G}(\alpha; \tau) \tilde{\Sigma}^{\text{R}}(\epsilon_{\alpha}). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Für späte Zeiten erhält man also eine Energieverschiebung  $\Delta_{\alpha} = \text{Re } \tilde{\Sigma}^{\text{R}}(\epsilon_{\alpha})$  und eine exponentielle Dämpfung  $\Gamma_{\alpha} = \text{Im } \tilde{\Sigma}^{\text{R}}(\epsilon_{\alpha})$ :

$$\mathcal{G}(\alpha; \tau) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[ \text{Re } \tilde{\Sigma}^{\text{R}}(\epsilon_{\alpha}) + i \text{Im } \tilde{\Sigma}^{\text{R}}(\epsilon_{\alpha}) \right] \tau \right\}. \quad (3.22)$$

Im Grenzfall langer Zeiten liefert die exponentielle Dämpfung gerade lorentzförmig verbreiterte Resonanzen in der Spektralfunktion (vgl. Abschn. 3.1).

#### Numerische Lösung

Für die numerische Lösung der Differentialgleichung für die Renormierungsfunktion  $\mathcal{G}(\alpha; \tau)$  wird im Folgenden das gekoppelte System aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht betrachtet um exemplarisch alle Eigenschaften der Renormierungsfunktion diskutieren zu können. Eine getrennte Untersuchung von Quantenpunkten und Benetzungsschicht erfolgt zusammen mit der physikalischen Interpretation in den folgenden Abschnitten 3.3 und 3.4. Zur numerischen Integration der Differentialgleichung (3.12) wurden Relativzeiten  $\tau$  sowie die kontinuierlichen Zustände  $\mathbf{k}$  der Benetzungsschicht diskretisiert. Die verwendeten Materialparameter sind in Anh. B.2 angegeben.

Zur weiteren Diskussion der Renormierungsfunktion  $\mathcal{G}(\alpha; \tau)$  wird diese in Polardarstellung  $\mathcal{G} = |\mathcal{G}| e^{i\phi}$  betrachtet. Man identifiziert mit (3.11) leicht den Betrag als eine Dämpfungsfunktion ( $\Gamma(\alpha; \tau) = |\mathcal{G}(\alpha; \tau)|$ ) und die Phase als Energie-Verschiebung ( $\Delta(\alpha; \tau) = \hbar \phi(\alpha; \tau)$ ):

$$G^{\text{R}}(\alpha; \tau) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-i/\hbar \epsilon_{\alpha} \tau} e^{i\phi(\alpha; \tau)} \Gamma(\alpha; \tau). \quad (3.23)$$

Numerische Ergebnisse für den Betrag  $|\mathcal{G}(\alpha; \tau)|$  der komplexen Renormierungsfunktion sind für eine Temperatur von 300 K in Abb. 3.1 dargestellt. Abgebildet sind die kontinuierlichen Zustände  $\alpha \in \{\mathbf{k}\}$  der Benetzungsschicht für Elektronen (a) und Löcher (b). Dabei sind die Zustände als freie Einteilchen-Energien  $\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$  in Einheiten der Phonon-Energie  $\hbar\omega_{\text{LO}}$  aufgetragen. Schnitte entlang der Zeitachse liefern die Dämpfung jedes einzelnen Zustandes. Vergleicht man die Dämpfung verschiedener Zustände zu einer festen Zeit, so erkennt man eine Schwelle bei  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx \hbar\omega_{\text{LO}}$ . Zustände unterhalb dieser Schwelle ( $\epsilon(\mathbf{k}) < \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) sind deutlich geringer gedämpft als Zustände oberhalb ( $\epsilon(\mathbf{k}) > \hbar\omega_{\text{LO}}$ ). Die Schwelle ist dabei keine scharfe Kante, sondern ein kontinuierlicher Übergang zwischen den beiden Bereichen unterschiedlicher Dämpfung. Für Löcher (Abb. 3.1 (b)) erkennt man bei  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 0,6 \hbar\omega_{\text{LO}}$  zusätzlich einen stärker gedämpften Bereich unterhalb der Schwelle.

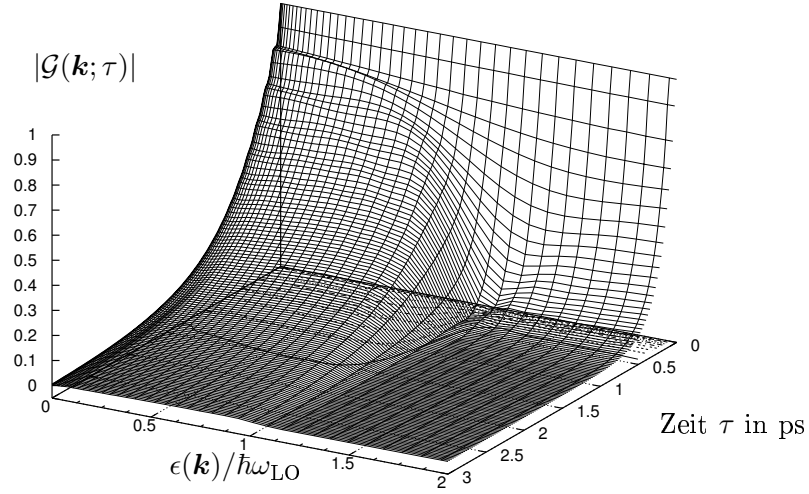
Die Dämpfung beschreibt die Lebensdauer der Ladungsträger in einem Zustand  $\alpha$  (Abschn. 3.1) und ist im wesentlichen durch Streuprozesse bestimmt. Im Bild energieerhaltender Streuprozesse (Fermi's Goldene Regel; vgl. Kap. 4) relaxieren Ladungsträger durch Emission von Phononen nur in Zustände, die genau eine Phonon-Energie unterhalb des Ausgangszustandes  $\alpha$  liegen. Die Schwelle erklärt sich damit durch fehlende Endzustände für die Relaxation von Ladungsträgern unterhalb der Schwelle. Bei einer quantenkinetischen Beschreibung der Streuprozesse (Kap. 4) können auf kurzen Zeitskalen auch Streuprozesse stattfinden, die nicht energieerhaltend sind. So ist auch die Relaxation in Zustände möglich, die nicht genau eine Phonon-Energie unterhalb des Ausgangszustandes liegen. Die Phonon-Schwelle ist daher keine scharfe Kante, sondern aufgeweicht. Existieren zusätzliche Zustände unterhalb der Bandkante, so ist auch unterhalb der Phonon-Schwelle Relaxation möglich. Dies führt unterhalb der Phonon-Schwelle gerade zu den Bereichen stärkerer Dämpfung, die jeweils eine Phonon-Energie oberhalb der zusätzlichen Zustände liegen. Deutlich zu erkennen ist dies bei den Löchern (Abb. 3.1 (b)), wo dieser Bereich ( $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 0,6 \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) genau eine Phonon-Energie oberhalb der p-Schale ( $\epsilon_p = -0,4 \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) liegt.

Außer der Relaxation gibt es noch weitere Prozesse, die zu einer endlichen Lebensdauer von Ladungsträgern in einem Zustand  $\alpha$  beitragen. Betrachtet man die Absorption von Phononen, so ist diese für alle Zustände möglich und abhängig von der Anzahl der verfügbaren Phononen. Es ist daher zu erwarten, dass für tiefe Temperaturen die Dämpfung der retardierten Green'schen Funktion deutlich vermindert ist. Um dies zu studieren ist in Abb. 3.2 der Betrag  $|\mathcal{G}(\alpha; \tau)|$  der Renormierungsfunktion für eine Temperatur von 77 K dargestellt. Abgebildet sind wieder die kontinuierlichen Zustände  $\alpha \in \{\mathbf{k}\}$  der Benetzungsschicht für Elektronen (a) und Löcher (b), wobei die Zustände als freie Einteilchen-Energien in Einheiten der Phonon-Energie aufgetragen sind. Unterhalb der Phonon-Schwelle erkennt man nur eine geringe Dämpfung. Im Vergleich zu Raumtemperatur sind bei tiefen Temperaturen die Bereiche stärkerer Dämpfung unterhalb der der Phonon-Schwelle deutlicher ausgeprägt. Zusätzlich zu dem Bereich

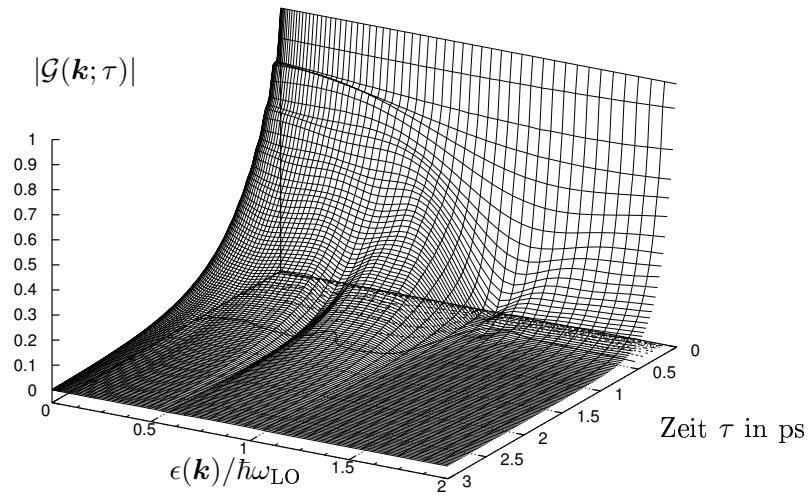
bei  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 0,6 \hbar\omega_{\text{LO}}$  erkennt man noch einen Bereich bei  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 0,2 \hbar\omega_{\text{LO}}$ , welcher gerade eine Phonon-Energie oberhalb der s-Schale ( $\epsilon_s = -0,8 \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) liegt. Bei den Elektronen findet man um  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 0$  eine stärkere Dämpfung, was eine mögliche Relaxation in die p-Schale durch nichtenergieerhaltende Streuprozesse beschreibt. Auch etwas unterhalb der Phonon-Schwelle bei  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 0,8 \hbar\omega_{\text{LO}}$  entsteht ein Bereich stärkerer Dämpfung, was die Relaxation in die s-Schale durch Zweiphonon-Prozesse beschreibt. Betrachtet man den Bereich oberhalb der Phonon-Schwelle, so findet man dort bei tiefen Temperaturen eine geringere Dämpfung als bei Raumtemperatur.

In Abb. 3.2 beobachtet man zu frühen Zeiten Oszillationen in der Zeit. Diese findet man auch in den Rechnungen für Raumtemperatur (Abb. 3.1). Sie sind dort aber aufgrund der starken Dämpfung durch Phonon-Absorption nur schwach ausgeprägt. Zur näheren Betrachtung der Oszillationen ist der Betrag  $|\mathcal{G}(\alpha; \tau)|$  der Renormierungsfunktion an der Bandkante ( $\mathbf{k} = 0$ ) zusammen mit denen der beiden Quantenpunkt-Zustände in Abb. 3.3 dargestellt. Man erkennt bei allen drei Zuständen im wesentlichen einen exponentiellen Abfall, der an der Bandkante von einer und bei den Quantenpunkt-Zuständen von mehreren Oszillationen überlagert ist. Für alle drei Zustände findet man eine kurze Oszillationsperiode von ca. 115 fs. Dies entspricht in der Spektralfunktion gerade energetischen Abständen von einer Phonon-Energie und lässt daher eine Seitenbanden-Struktur erwarten. Bei den Quantenpunkt-Zuständen findet man noch weitere Oszillationsperioden, die an dieser Stelle nicht diskutiert werden sollen. Statt dessen folgt in Kap. 3.3 und Kap. 3.4 eine detaillierte Untersuchung der Spektralfunktion. Dort findet man diese Oszillationen als energetische Abstände von Resonanzen.

a)

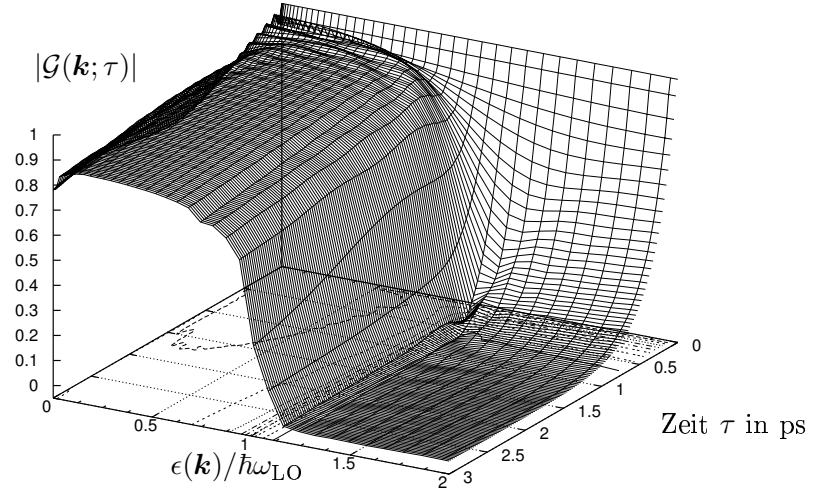


b)

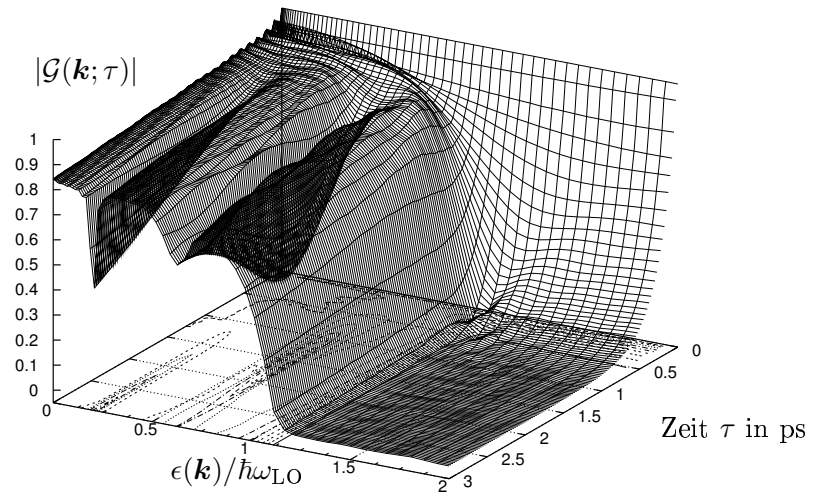


**Abb. 3.1:** Betrag  $|\mathcal{G}(\mathbf{k}; \tau)|$  der Renormierungsfunktion als Dämpfung der freien retardierten Green'schen Funktion für die Benetzungsschicht von selbstorganisiert gewachsenen GaAs/InAs Quantenpunkten bei einer Temperatur von 300 K. Dargestellt für Elektronen (a) und Löcher (b).

a)

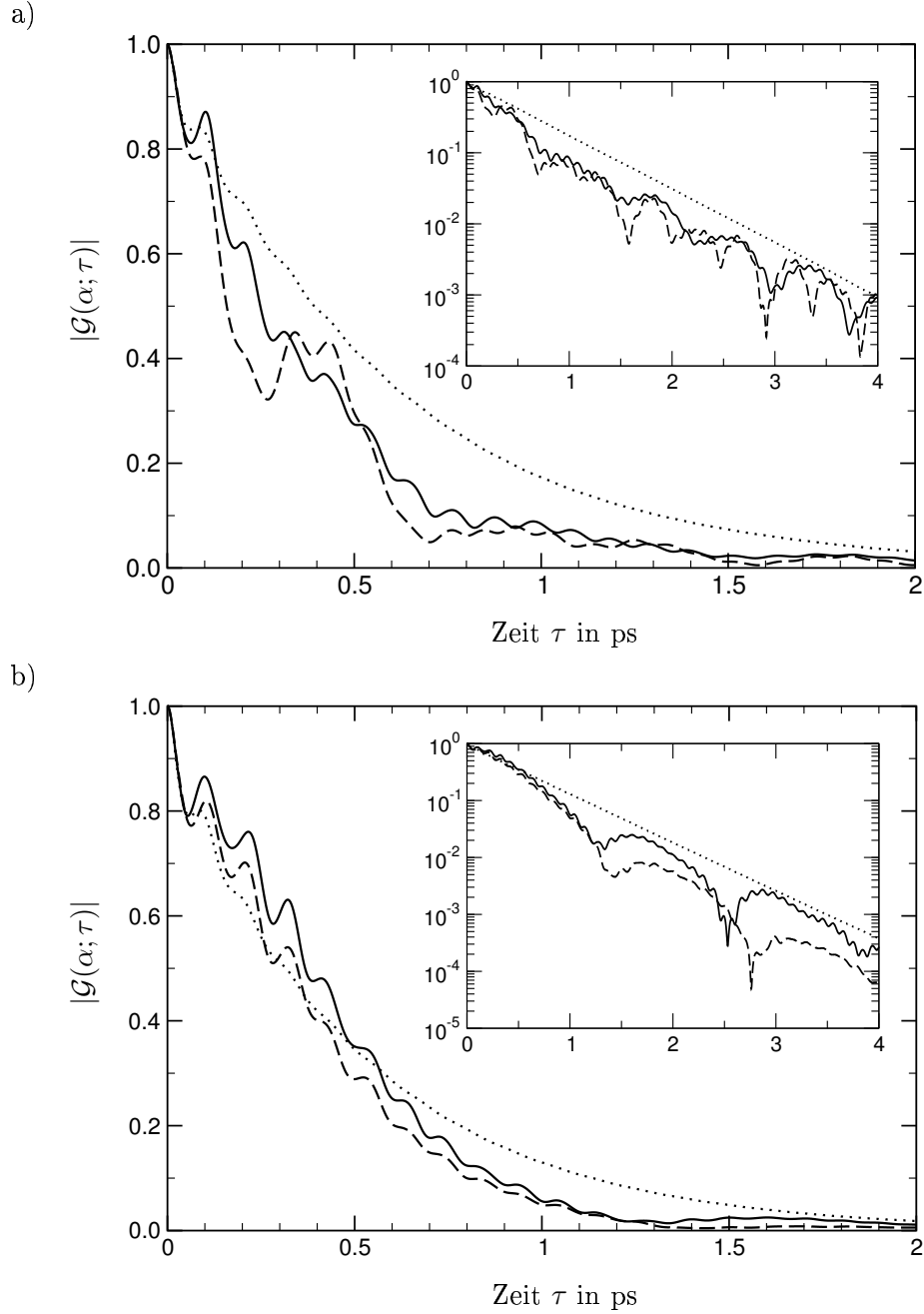


b)



**Abb. 3.2:** Betrag  $|\mathcal{G}(\mathbf{k}; \tau)|$  der Renormierungsfunktion als Dämpfung der freien retardierten Green'schen Funktion für die Benetzungsschicht von selbstorganisiert gewachsenen GaAs/InAs Quantenpunkten bei einer Temperatur von 77 K. Dargestellt für Elektronen (a) und Löcher (b).

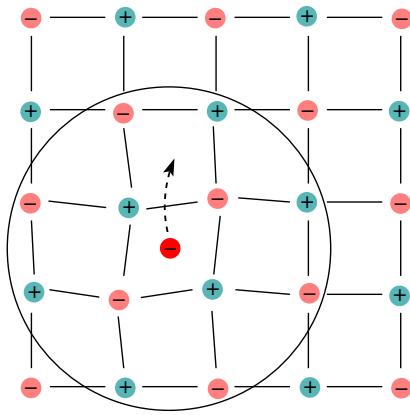




**Abb. 3.3:** Betrag  $|\mathcal{G}(\alpha; \tau)|$  der Renormierungsfunktion als Dämpfung der freien retardierten Green'schen Funktion für selbstorganisiert gewachsene GaAs/InAs Quantenpunkte bei einer Temperatur von 300 K. Dargestellt ist für Elektronen (a) und Löcher (b) jeweils der Betrag der Renormierungsfunktion für die Bandkante ( $\mathbf{k} = 0$ ; gepunktete Linie), die s-Schale (durchgezogene Linie) und die p-Schale (gestrichelte Linie). Zusätzlich ist dasselbe in den Einsätzen noch logarithmisch aufgetragen.

### 3.3. Polaronen in Quantenfilmen

Bislang wurde die retardierte Green'sche Funktion als Funktion der Zeit betrachtet. In diesem Kapitel soll sie im Fourier-Raum untersucht werden, was über die Spektralfunktion (3.4) eine konkrete physikalische Interpretation als spektrale Dichte liefert. Betrachtet werden dabei in diesem Abschnitt nur Quantenfilme, d.h. nur Zustände  $\alpha \in \{\mathbf{k}\}$ . Die entsprechende Diskussion für Quantenpunkte erfolgt im nächsten Abschnitt 3.4. Zur Interpretation der Spektralfunktion wird zunächst das Bild des Polarons vorgestellt.



**Abb. 3.4:** Ein Elektron erzeugt bei seiner Bewegung durch einen Ionenkristall eine Polarisationswolke.

Die Green'schen Funktionen sind Wahrscheinlichkeitsamplituden, welche die Propagation von Teilchen wie z.B. Elektronen beschreiben. Dabei generiert die Dyson-Gleichung alle möglichen Kombinationen der Prozesse, die in der Selbstenergie enthalten sind (Kap. 2). Die RPA-Selbstenergie (Abb. 2.4 (a)) symbolisiert daher die Propagation eines Elektrons, wobei es ein Phonon emittiert und dieses anschließend wieder reabsorbiert. Klassisch entspricht dieses Bild der Green'schen Funktionen einem einzelnen Elektron, das sich durch einen Kristall bewegt und dabei mit dem Gitter wechselwirkt. Bei der Bewegung durch den Kristall zieht ein Elektron positiv geladene Gitterionen an und stößt negativ geladene ab, wodurch der Kristall polarisiert wird. Über dieses Polarisationsfeld kann das Elektron mit den Gitterschwin-

gungen wechselwirken und es entsteht eine gekoppelte Anregung aus Gitterpolarisation und Elektron, die sich durch den Kristall bewegt. Im Bild quantisierter Gitterschwingungen entspricht dies einem Elektron, das ständig Phononen emittiert und absorbiert. Diese gekoppelte Anregung wird als Quasiteilchen beschrieben und heisst Polaron. Die Polarisation des Ionengitters durch ein Elektron ist in Abb. 3.4 skizziert. Analog gilt das Polaron-Bild auch für Löcher, nur mit umgekehrten Ladungsvorzeichen.

Allgemein kann man ein Polaron auch als die Eigenzustände des Hamilton-Operators (2.1) für ein einzelnes Elektron auffassen. Die Berechnung der Eigenenergien von Polaronen ist ein Problem, das seit den 50er Jahren untersucht wird. Dabei wurden viele verschiedene Modelle und Näherungen entwickelt, die das Problem für verschiedenen stark polare Materialien lösen [22]. Für den Fall schwacher Kopplung ( $\alpha \ll 1$ ) können die Eigenenergien  $E(\mathbf{k})$  mit 2. Ordnung Störungsrechnung bestimmt werden

[6, 22, 34]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - \Delta \quad (3.24)$$

mit

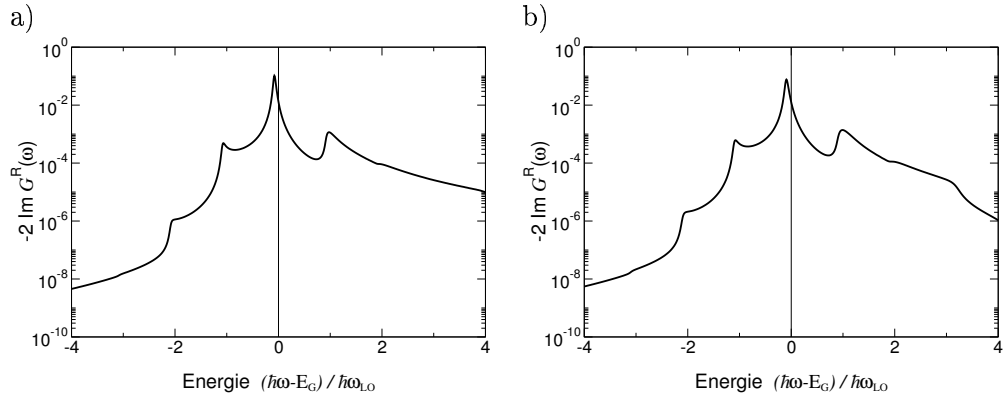
$$\Delta \approx -\alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \quad \text{und} \quad \frac{m^*}{m} \approx 1 + \frac{\alpha}{6} . \quad (3.25)$$

Man erhält eine konstante Energieabsenkung  $\Delta$  und eine gegenüber der freien Masse  $m$  vergrößerte Masse  $m^*$ , wobei diese Renormierungen durch die Elektron-Phonon-Kopplungskonstante  $\alpha$  bestimmt sind. Die Dispersion der Polaronen bleibt dabei parabolisch. Anschaulich ist die größere Masse klar, da die Erzeugung einer Polarisierung des Gitters der Bewegung des Elektrons entgegenwirkt und damit wie eine größere Masse wirkt. Die Energieabsenkung entsteht durch eine anziehende Wechselwirkung des Elektrons mit der Polarisationswolke (Abb. 3.4).

Im Formalismus der Green'schen Funktionen erhält man die Information über die spektralen Eigenschaften des Systems aus der Spektralfunktion. Diese liefert die spektrale Dichte für jeden Zustand des Systems. Numerisch erfolgt die Berechnung der Spektralfunktion durch Lösung der Differentialgleichung (3.12) für die Renormierungsfunktion, wobei die Selbstenergie (3.20) benutzt wird. Die retardierte Green'sche Funktion erhält man damit aus der Darstellung (3.11). Daraus ergibt sich die Spektralfunktion nach ihrer Definition (3.4) aus dem Imaginärteil der fouriertransformierten retardierten Green'schen Funktion. Die so berechnete Spektralfunktion für die Bandkante ( $\mathbf{k} = 0$ ) ist für Elektronen und Löcher eines Quantenfilms in Abb. 3.5 dargestellt. Bei den Rechnungen wurde eine Temperatur von  $T = 300$  K angenommen und die Materialparameter aus Anh. B.2 verwendet. Senkrechte Linien markieren in Abb. 3.5 die  $\delta$ -förmige Spektralfunktion freier Teilchen. Man erkennt, gegenüber den freien Einteilchen-Energien  $\epsilon_{\mathbf{k}=0} = 0$ , die Polaron-Verschiebung der Haupt-Resonanz zu niedrigeren Energien und eine Lorentz-förmige Linienform. Zu beiden Seiten existieren Seitenbanden im Abstand von einer Phonon-Energie  $\hbar \omega_{\text{LO}}$ . Diese entsprechen gerade den in Abb. 3.1-3.3 beobachteten Oszillationen. Die Seitenbanden bei höheren Energien (rechte Seite) sind dabei stärker ausgeprägt und zeigen eine asymmetrische Verbreiterung.

Zur Interpretation der Seitenbanden betrachtet man das System zunächst bei  $T = 0$  K. Das System enthält dann keine thermischen Phononen und es können nur Phononen emittiert werden. Damit gibt es nur Quasiteilchen, die  $n$  Phononen emittieren können und dabei durch Absorption von  $n$  Phononen entstehen. Dies sind gerade die oberen Seitenbanden, deren Quasiteilchen einem Polaron mit  $n$  absorbierten Phononen entsprechen. Die unteren Seitenbanden hingegen beschreiben Quasiteilchen, die  $n$  Phononen absorbieren können und dabei einem Polaron mit  $n$  emittierten Phononen entsprechen. Daher treten sie nur für Temperaturen  $T > 0$  K auf. Unmittelbar

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen



**Abb. 3.5:** Spektralfunktion von Polaronen an der Bandkante ( $k = 0$ ) in einem GaAs/InGaAs Quantenfilm bei 300 K. Polaron-Shift und Lebensdauer (Verbreiterung) für Elektronen (a) und Löcher (b).

einsichtig ist dies an Gleichung (3.27). Für  $N_{LO} = 0$  verbleibt nur der Term, der die Emission von Phononen beschreibt. Dies ist gerade die obere Seitenbande.

#### Struktur der Spektralfunktion in Störungstheorie

Ein tieferes Verständnis der Struktur der Spektralfunktion ergibt sich aus der Dyson-Gleichung (3.10) für die retardierte Green'sche Funktion im Fourier-Raum. Das Faltungsintegral in der Dyson-Gleichung (3.10) liefert im Fourier-Raum ein Produkt und die Exponentialfunktionen des Phonon-Propagators in der Selbstenergie (3.20) erzeugen zwei um  $\pm\omega_{LO}$  verschobene Green'sche Funktionen:

$$G^R(\alpha; \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_\alpha - \Sigma^R(\alpha; \omega) + i\eta} \quad (3.26)$$

mit

$$\Sigma^R(\alpha; \omega) = \sum_{\beta, \mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 [(N_{LO} + 1) G^R(\beta; \omega - \omega_{LO}) + N_{LO} G^R(\beta; \omega + \omega_{LO})] . \quad (3.27)$$

Die Selbstenergie  $\Sigma^R(\alpha; \omega)$  verschiebt dabei die Pole in der komplexen Ebene. Wie in Abschn. 3.1 erläutert, liefern die Pole von (3.26) die Eigenenergien des Systems. Dabei bestimmt der Imaginärteil der Selbstenergie das Profil der Resonanzen in der Spektralfunktion. Im einfachsten Fall betrachtet man die Selbstenergie (3.27) in niedrigster Ordnung. Dafür ersetzt man in der Selbstenergie (3.27) die vollen retardierten Green'schen Funktionen  $G^R(\alpha; \omega)$  durch freie retardierte Green'sche Funktion

$G_0^R(\alpha; \omega)$  (3.3) und erhält:

$$\Sigma_{\text{NSC}}^R(\alpha; \omega) = \sum_{\beta, \mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}^2(\mathbf{q}) \left[ \frac{(N_{\text{LO}} + 1)}{\hbar(\omega - \omega_{\text{LO}}) - \epsilon_\beta + i\eta} + \frac{N_{\text{LO}}}{\hbar(\omega + \omega_{\text{LO}}) - \epsilon_\beta + i\eta} \right]. \quad (3.28)$$

Für kontinuierliche Zustände  $\beta$  liefert die Dirac-Identität daraus den Imaginärteil

$$\text{Im } \Sigma_{\text{NSC}}^R(\alpha; \omega) = -\pi \sum_{\beta, \mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}^2(\mathbf{q}) \left[ (N_{\text{LO}} + 1) \delta(\hbar(\omega - \omega_{\text{LO}}) - \epsilon_\beta) + N_{\text{LO}} \delta(\hbar(\omega + \omega_{\text{LO}}) - \epsilon_\beta) \right]. \quad (3.29)$$

Dieser beschreibt gerade  $\delta$ -förmige Resonanzen in der Spektralfunktion. Betrachtet man kontinuierliche Zustände  $\beta$ , so liefert (3.29) ein Kontinuum von  $\delta$ -Funktionen. Es sind also in der Spektralfunktion, je nach Gewichtung der  $\delta$ -Funktionen, verbreiterte Resonanzen zu erwarten.

### Renormierung der Einteilchen-Energien

Die Bestimmung der polaronischen Renormierungen aus der Spektralfunktion erfordert eine Betrachtung der vollständigen Dispersion, nicht nur der Bandkante. Diese ist für Elektronen in Abb. 3.6 und für Löcher in Abb. 3.7 dargestellt. Abgebildet ist jeweils die Spektralfunktion  $\hat{G}(\alpha; \omega)$  als 3D-Kurve (a) und als Höhenlinien-Diagramm (b). Die Energie  $\hbar\omega$  wird dabei als Verstimmung gegenüber der Bandkante  $E_G$  in Einheiten der Phonon-Energie  $\hbar\omega_{\text{LO}}$  gemessen. Man erkennt in beiden Darstellungen, dass sowohl die Haupt-Resonanz als auch die Seitenbanden eine näherungsweise parabolische Dispersion zeigen. Verfolgt man die Haupt-Resonanz im Höhenlinien-Diagramm, so hat diese zunächst eine konstante Verbreiterung. Sobald aber die Energie eine Phonon-Energie über der Bandkante liegt, verbreitert die Haupt-Resonanz stark. Die Seitenbanden zeigen das gleiche Verhalten, nur ist dieses dort schwächer ausgeprägt. Auf der niederenergetischen Seite der Haupt-Resonanz sind diese Verbreiterungen als Schwellen bei  $\hbar\omega \approx -1 \hbar\omega_{\text{LO}}$  und  $\hbar\omega \approx -2 \hbar\omega_{\text{LO}}$  zu erkennen. Elektronen und Löcher zeigen dabei gleiches Verhalten. Der wesentliche Unterschied ist eine geringere Krümmung der parabolischen Dispersion bei den Löchern.

Aus den Spektralfunktionen in Abb. 3.6 und Abb. 3.7 können nun die polaronischen Renormierungen der freien Einteilchen-Energien für Elektronen und Löcher bestimmt werden. Dazu betrachtet man die Spektralfunktion in Quasiteilchen-Näherung, wobei die Spektralfunktion  $\hat{G}_{\mathbf{k}}(\hbar\omega)$  für jedes  $\mathbf{k}$  durch verbreiterte  $\delta$ -Funktionen an den entsprechenden renormierten Einteilchen-Energien genähert wird. Es ergibt sich eine näherungsweise parabolische Dispersion. Daraus bestimmt man, entsprechend der

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

---

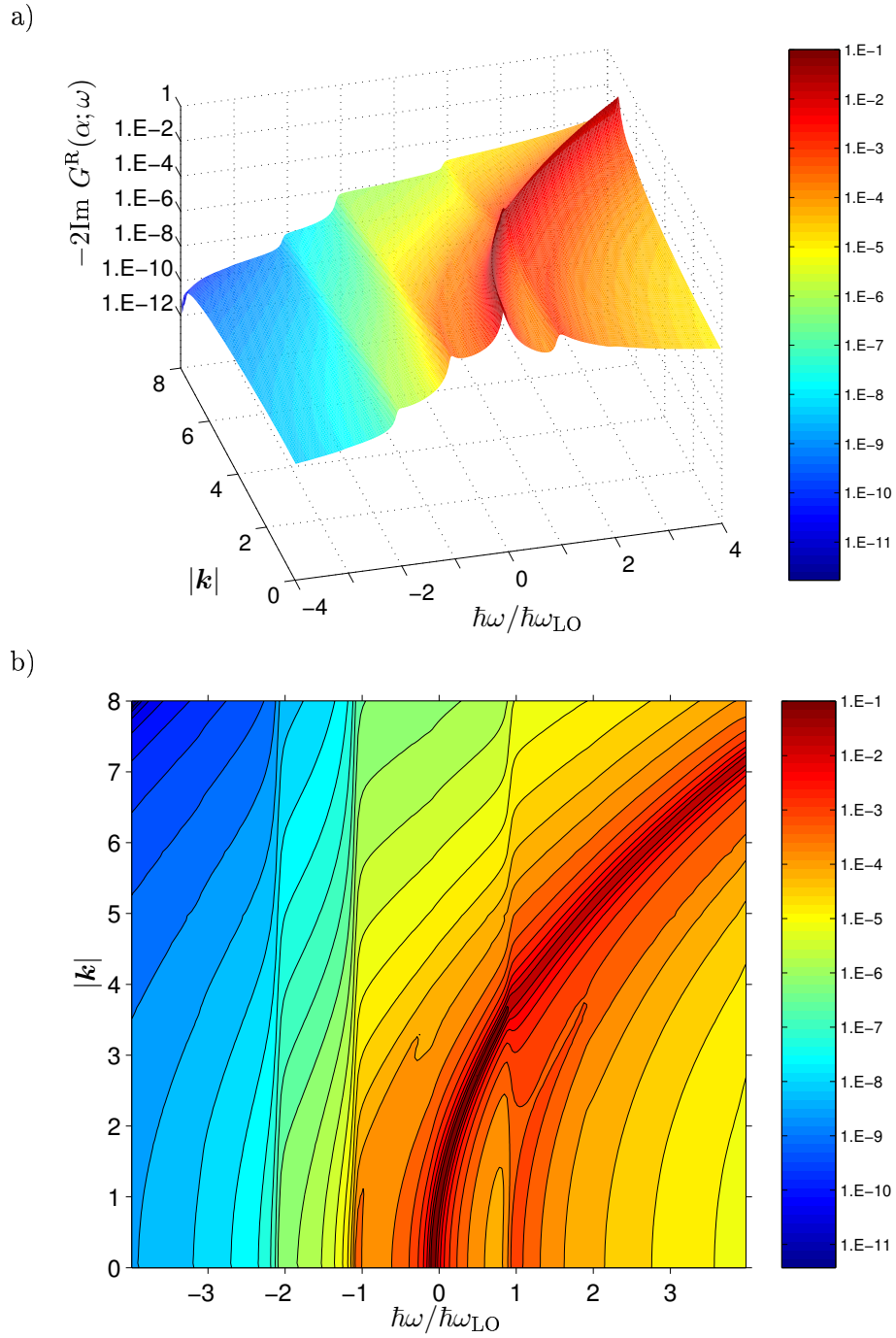
Effektiv-Masse-Näherung (2.3), die renormierte Masse aus der Krümmung der Parabel um  $\mathbf{k} = 0$ . Aus den renormierten Massen für Elektronen und Löcher erhält man dann die Renormierung der reduzierten Masse durch

$$\frac{\mu^*}{\mu} = \frac{m_e^{-1} + m_h^{-1}}{(m_e^*)^{-1} + (m_h^*)^{-1}}. \quad (3.30)$$

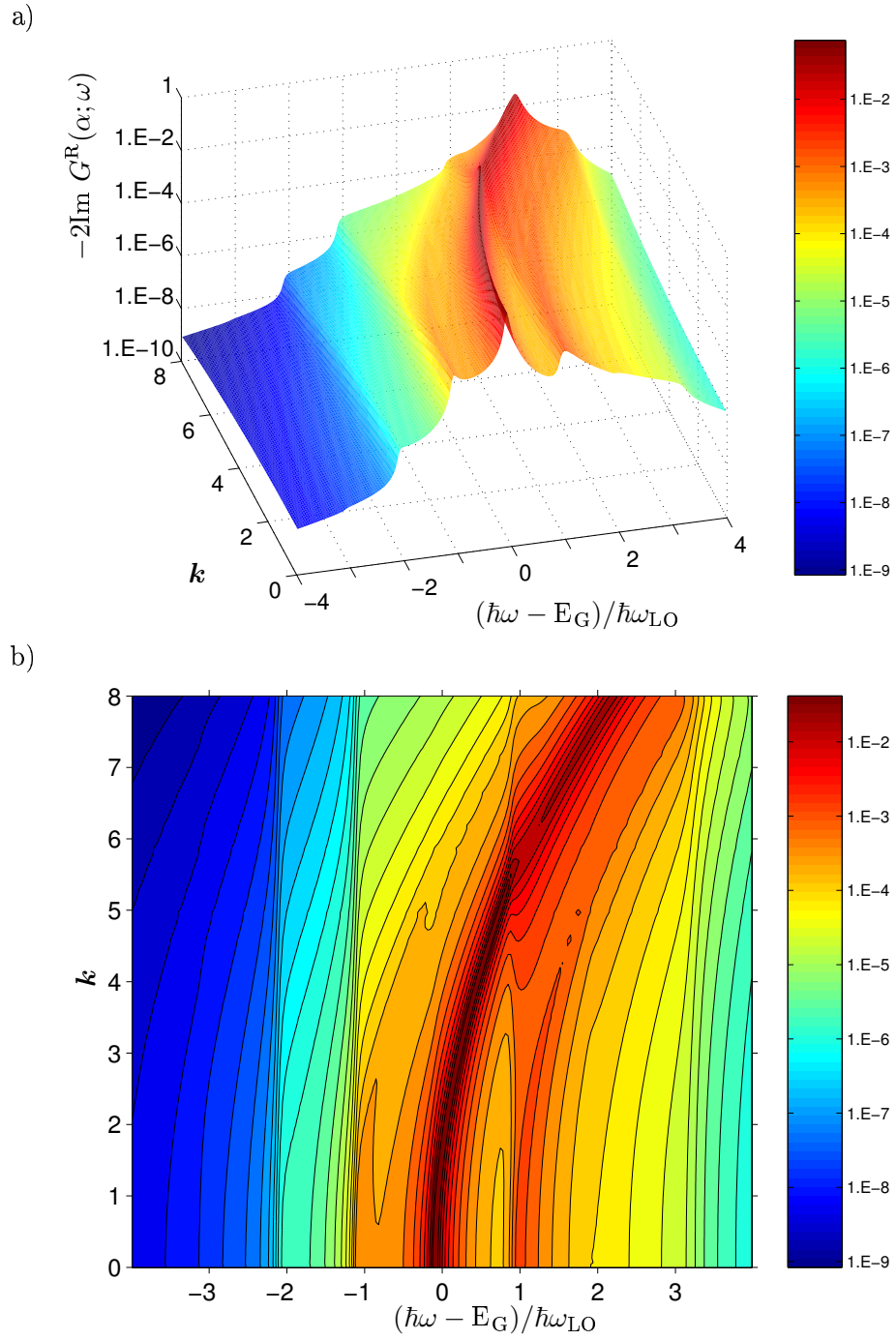
Die Verschiebung der Parabel gegenüber der freien Einteilchen-Energie bei  $\mathbf{k} = 0$  liefert die Polaron-Verschiebung  $\Delta E$ . Zusätzlich erhält man aus der Linienbreite  $\gamma$  (volle Breite bei halbem Maximum) der Spektralfunktion bei  $\mathbf{k} = 0$  die Lebensdauer  $t = 2\pi\hbar\gamma^{-1}$  der Polaronen. Vernachlässigt wird in diesem Bild natürlich die Seitenbanden-Struktur und die  $\mathbf{k}$ -abhängige Lebensdauer der Quasiteilchen. Die ermittelten Renormierungen sind in Tab. 3.1 zusammengefasst. Zusätzlich aufgeführt sind die Renormierungen (3.25) aus zeitunabhängiger Störungstheorie 2. Ordnung. Über die Lebensdauer des Polarons liefert die zeitunabhängige Störungstheorie keine Aussage. Aufgrund der schwachen polaren Kopplung  $\alpha = 0,06$  des betrachteten Materialsystems (GaAs/InAs) bleiben die Korrekturen gegenüber den Renormierungen aus der Störungstheorie 2. Ordnung klein.

	$\mu^*/\mu$	$\Delta E_e/\hbar\omega_{\text{LO}}$	$\Delta E_h/\hbar\omega_{\text{LO}}$	$\gamma_e/\hbar\omega_{\text{LO}}$	$\gamma_h/\hbar\omega_{\text{LO}}$
Green'sche Funktionen	1.02	-0.08	-0.09	0.05	0.07
Störungstheorie	1.01	-0.06	-0.06	–	–

**Tab. 3.1:** Polaronische Renormierungen der freien Einteilchen-Energien. Vergleich der Berechnungen durch Green'sche Funktionen (aus Spektralfunktion) und durch zeitunabhängige Störungstheorie 2. Ordnung.



**Abb. 3.6:** Polaronische Spektralfunktion für Elektronen in einem InAs Quantenfilm bei 300 K (a) und entsprechendes Höhenlinien-Diagramm (b).



**Abb. 3.7:** Polaronische Spektralfunktion für Löcher in einem InAs Quantenfilm bei 300 K (a) und entsprechendes Höhenlinien-Diagramm (b).



### 3.4. Polaronen in Quantenpunkten

Das Bild des Polarons in Quantenfilmen als ein Ladungsträger der von einer dynamischen Polarisationswolke umgeben ist, lässt sich auch auf Quantenpunkte übertragen. In einem diskreten Energiezustand sind Ladungsträger zunächst räumlich lokalisiert. Durch die Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger mit dem Gitter wird dieses wie im Quantenfilm polarisiert. Über dieses Polarisationsfeld können auch räumlich lokalisierte Ladungsträger mit Phononen wechselwirken. Es wird sich zeigen, dass die Wechselwirkung räumlich lokalisierter Ladungsträger mit Phononen auch in schwach polaren Materialien durch eine starke Kopplung bestimmt ist. Dieser Abschnitt beginnt mit einer Betrachtung einfacher Modelle für Systeme aus diskreten Energieniveaus, die an ein Phononbad gekoppelt sind. Anschließend vorgestellte numerische Ergebnisse für die betrachtete Struktur aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht sowie die Effekte der starken Kopplung können daran diskutiert werden.

#### Modell unabhängiger Bosonen

Das einfachste Modell besteht aus einem diskreten Zustand der an ein Kontinuum von Phononen koppelt. Dies ist als *Independent Boson Model*<sup>1</sup> bekannt [22] und betrachtet den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \epsilon_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^\dagger) . \quad (3.31)$$

Der erste Term beschreibt freie Elektronen in dem einzigen Zustand  $a$ , der zweite Term beschreibt die Phononen und der letzte Term die Elektron-Phonon-Kopplung. Dabei sind  $\hat{a}^{(\dagger)}$  und  $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}$  die Erzeuger (Vernichter) für Elektronen im Zustand  $a$  bzw. Phononen in der Mode  $\mathbf{q}$ . Dieser Hamilton-Operator kann durch eine kanonische Transformation diagonalisiert werden [22]:

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} (\epsilon_a - \Delta) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{b}^\dagger \hat{b} \quad (3.32)$$

mit

$$\Delta = \sum_{\mathbf{q}} \frac{M_{\mathbf{q}}^2}{\omega_{\mathbf{q}}} . \quad (3.33)$$

---

<sup>1</sup>deu.: Modell unabhängiger Bosonen

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

---

Im Einstein Modell ( $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\text{LO}}$ ) erhält man aus dem Zugang über Green'sche Funktionen für endliche Temperaturen die Spektralfunktion [22]:

$$\hat{G}(\omega) = 2\pi e^{-\frac{\Delta}{\omega_{\text{LO}}}(2N_{\text{LO}}+1)} \sum_{l=-\infty}^{\infty} I_l \left\{ 2 \frac{\Delta}{\omega_{\text{LO}}} \sqrt{N(N+1)} \right\} e^{l\beta\omega_{\text{LO}}/2} \times \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{a}} + \Delta - \omega_{\text{LO}}l) , \quad (3.34)$$

mit den Besselfunktionen  $I_l$ . Diese Spektralfunktion besteht aus einer Serie von  $\delta$ -Funktionen an den renormierten Energien  $\hbar\omega = \epsilon_c - \Delta \pm l\hbar\omega_0$ . Die Resonanzen haben dabei genau den Abstand einer Phonon-Energie.

#### Hybridisierung und Jaynes-Cummings Modell

Betrachtet man mehrere diskrete Niveaus, so ist eine Kopplung dieser Niveaus über die Phononen möglich. Dadurch bilden sich Hybrid-Zustände, was im Folgenden an einem einfachen Modell erläutert wird. Im einfachsten Fall betrachtet man zwei diskrete Energie-Niveaus  $a_1$  und  $a_2$ , die über ein Phonon-Feld in der Mode  $\mathbf{q}$  mit einer Kopplungsstärke  $M_{\mathbf{q}}$  gekoppelt sind. Berücksichtigt man nur resonante Terme [23], so hat der Hamilton-Operator die Form

$$\hat{H} = \hbar\omega_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hbar\omega_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} \left( \hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{b}_{\mathbf{q}} \right) . \quad (3.35)$$

In diesem Hamilton-Operator beschreiben die ersten zwei Terme freie Elektronen in den Zuständen  $a_1$  und  $a_2$  mit  $\hbar\omega_1 < \hbar\omega_2$ . Der dritte Term beschreibt die Phononen und der letzte Term die Elektron-Phonon-Kopplung. Dabei sind  $\hat{a}^{(\dagger)}$  die Erzeuger (Vernichter) für Elektronen und  $\hat{b}^{(\dagger)}$  die Erzeuger (Vernichter) für Phononen.

Aus der Quantenoptik ist dieses Modell als Jaynes-Cummings Modell bekannt [23, 40]. Dort wird die Kopplung zweier atomarer Zustände durch ein einmodiges Photon-Feld beschrieben. Die betrachtete Situation stellt daher für jede Mode  $\mathbf{q}$  ein Jaynes-Cummings Modell dar. Für dispersionslose Phononen ( $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\text{LO}}$ ) ist es dann möglich, statt der Anzahl  $N_{\mathbf{q}}$  der Phononen in einer Mode die Gesamtanzahl der Phononen  $N_{\text{LO}}$  zu betrachten.

In Resonanz haben die elektronischen Zustände gerade den Abstand einer Phonon-Energie, d.h.  $\hbar\omega_2 - \hbar\omega_1 = \hbar\omega_{\text{LO}}$ . Damit sind, bei  $N_{\text{LO}}$  Phononen die Zustände wegen  $\hbar\omega_1 + N_{\text{LO}} \hbar\omega_{\text{LO}} = \hbar\omega_2 + (N_{\text{LO}} - 1) \hbar\omega_{\text{LO}}$  energetisch entartet. Eine Diagonalisierung des Hamilton-Operators [40] führt auf Hybrid-Zustände

$$\hat{H} |N_{\text{LO}}, \pm\rangle = \hbar\omega_{N_{\text{LO}}, \pm} |N_{\text{LO}}, \pm\rangle \quad (3.36)$$

mit den Eigenfrequenzen

$$\omega_{N_{\text{LO}},\pm} = \frac{1}{2} \left[ \omega_1 + \omega_2 + (2N_{\text{LO}} + 1) \omega_{\text{LO}} \pm \sqrt{\delta^2 + \sum_{\mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 (N_{\text{LO}} + 1)} \right], \quad (3.37)$$

wobei  $\delta = \omega_2 - \omega_1 - \omega_{\text{LO}}$  die Verstimmung ist. Bei Resonanz erhält man am Entartungspunkt die Aufspaltung

$$(\Delta E)^2 = \sum_{\mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 (N_{\text{LO}} + 1), \quad (3.38)$$

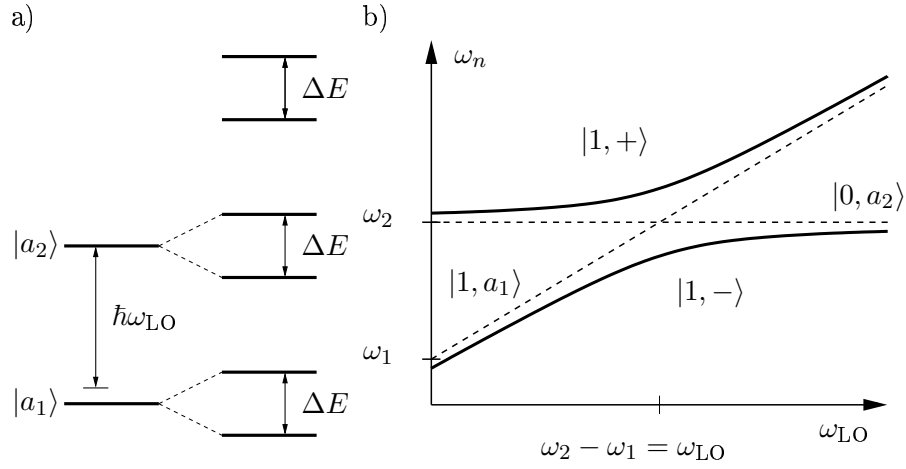
wobei  $N_{\text{LO}}$  die Gesamtzahl der Phononen im System ist. Diese Aufspaltung ist in Abb. 3.8 (a) illustriert. Die neuen Hybrid-Zustände nennt man *dressed states*<sup>2</sup>, da sie aus freien Zuständen durch Hinzunahme der Wechselwirkung entstehen. Dabei entstehen Hybrid-Zustände auch oberhalb der zwei freien Zustände, je nach Anzahl der Phononen im System.

Die Abhängigkeit der Aufspaltung (3.38) von der Verstimmung  $\delta$  ist in Abb. 3.8 (b) skizziert. Für sehr große und sehr kleine Verstimmungen fallen Hybrid- und freie Zustände zusammen. Ändert man die Verstimmung kontinuierlich, so wechselt ein Hybrid-Zustand vom  $a_1$ -Zustand in den  $a_2$ -Zustand bzw. umgekehrt. In der Umgebung der Resonanz liegt daher ein Misch-Zustand aus  $a_1$  und  $a_2$  vor. Dieses Verhalten zweier gekoppelter freier Zustände eine Entartung durch Bildung von Hybrid-Zuständen zu umgehen ist auch als *anti-crossing*<sup>3</sup> bekannt.

Numerisch kann dieses Verhalten in der betrachteten Quantenpunkt-Struktur untersucht werden. Dazu betrachtet man nur das Subsystem aus s- und p-Schale. Analog zu Abschn. 3.3 erfolgt die Berechnung der Spektralfunktion durch Lösung der Differentialgleichung (3.12) mit der Selbstenergie (3.20) und anschließende Fourier-Transformation der retardierten Green'schen Funktion (3.11). Die Rechnung wurde dabei für eine Temperatur von 300 K und mit den Material-Parametern aus Abschn. B.2 durchgeführt. Dargestellt ist die berechnete Spektralfunktion in Abb. 3.9 für Elektronen (a) und Löcher (b), wobei jeweils die durchgezogene Linie für die s-Schale und die gestrichelte Linie für die p-Schale steht. Bei Elektronen erkennt man deutlich eine Aufspaltung  $\Delta E = 0,16 \hbar\omega_{\text{LO}}$  der Resonanzen, welche mit der nach (3.37) erwarteten übereinstimmt. Für die Löcher erwartet man nach (3.37) eine Aufspaltung  $\Delta E = 0,61 \hbar\omega_{\text{LO}}$ . Wie Inoshita und Sakaki [17] zeigen konnten ist auch bei großen Verstimmungen eine Aufspaltung zu beobachten. Dabei liegt das größte spektrale Gewicht auf dem betrachteten Energie-Niveau, welches aber durch die Hybridisierung keine Energie-Verschiebung erfährt. Als Merkmal der Aufspaltung erhält

<sup>2</sup>deu.: angekleidetet Zustände

<sup>3</sup>deu.: vermiedene Kreuzung

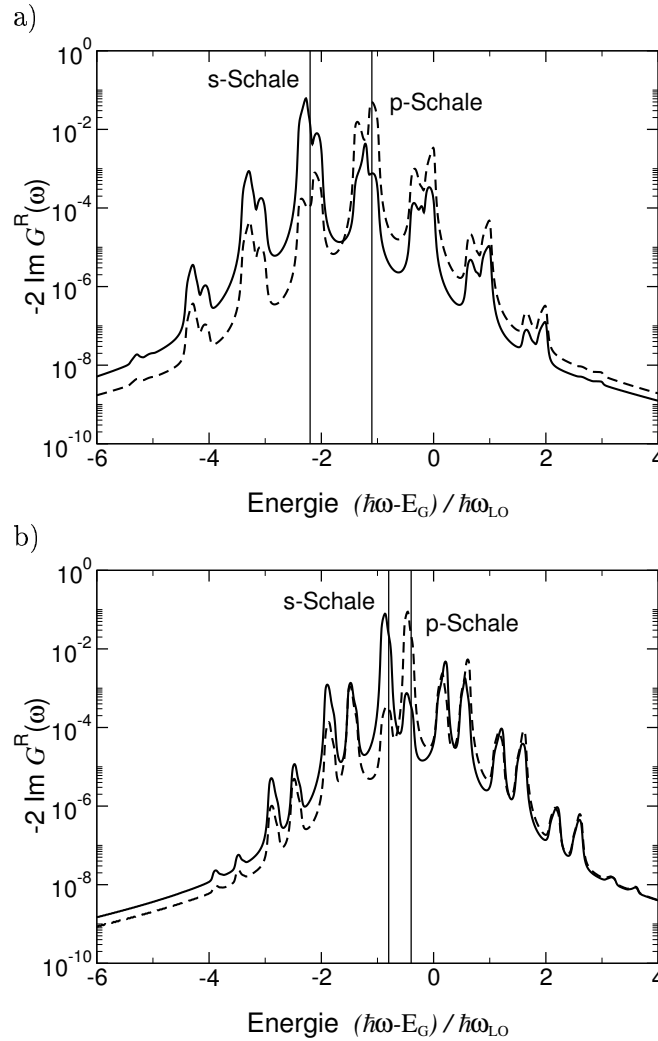


**Abb. 3.8:** Skizze zur Rabi-Aufspaltung und zur Bildung von Hybrid-Zuständen: (a) Rabi-Aufspaltung und *dressed states* durch starke Elektron-Phonon-Kopplung von zwei diskreten Zuständen. (b) Hybridisierung entarteter Zustände und *anti-crossing*-Verhalten.

man bei einer Verstimmung  $\delta < 0$  in der Spektralfunktion eine zusätzliche Resonanz oberhalb des betrachteten Energie-Niveaus im Abstand der Aufspaltung  $\Delta E$ . In der Spektralfunktion Abb. 3.9 (b) entspricht die Aufspaltung  $\Delta E = 0,61 \hbar\omega_{LO}$  damit dem größeren der zwei beobachteten Abstände zwischen zwei Resonanzen. Damit fallen zusätzliche Resonanzen durch die Aufspaltung und Satelliten von s- und p-Schale jeweils aufeinander und es ist keine Aufspaltung zu beobachten. Da die Aufspaltung der Resonanzen in der Spektralfunktion auf die Hybridisierung von Zuständen zurückgeführt werden kann zeigt dies, dass auch in Quantenpunkten eine gekoppelte Anregung aus Elektron und Phononen existiert. Analog zur kontinuierlichen Benetzungsschicht spricht man auch hier von Polaronen.

Eine Erweiterung des Modells unabhängiger Bosonen auf mehrere gekoppelte diskrete Niveaus wurde von Stauber u. a. [36] untersucht. Dort wurde ein System aus zwei diskreten Niveaus durch numerische Diagonalisierung des entsprechenden Hamilton-Operators exakt gelöst und mit Ergebnissen aus RPA-Rechnungen verglichen. Dabei konnte gezeigt werden, dass die Spektralfunktion wie beim Modell unabhängiger Bosonen aus  $\delta$ -Funktionen besteht. Nicht berücksichtigt wurde in diesen Betrachtungen eine endliche Lebensdauer der Phononen und die Anwesenheit eines Kontinuums von Zuständen.

Optische (LO) Phononen können durch anharmonische Schwingungen des Kristallgitters in transversale oder akustische Phononen zerfallen und erhalten dadurch eine endliche Lebensdauer. In [31, 32] wurde die Lebensdauer von Polaronen experimentell



**Abb. 3.9:** Spektralfunktion für Quantenpunkte mit zwei diskreten Energie-Niveaus, welche über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung gekoppelt sind. Dargestellt ist für Elektronen (a) und Löcher (b) jeweils die s-Schale (durchgezogene Linie) und die p-Schale (gestrichelte Linie).

untersucht, wobei für optische Phononen bei Raumtemperatur (300 K) eine Lebensdauer von ca. 5 ps ermittelt wurde. Es ist also schon aus physikalischen Gründen eine Verbreiterung der Resonanzen in der Spektralfunktion und damit eine endliche Lebensdauer der Polaronen zu erwarten.

Die numerischen Ergebnisse in Abb. 3.9 zeigen eine deutliche Verbreiterung der Resonanzen. Wie durch die Ergebnisse von Stauber u. a. [36] gezeigt wurde, ist für Systeme

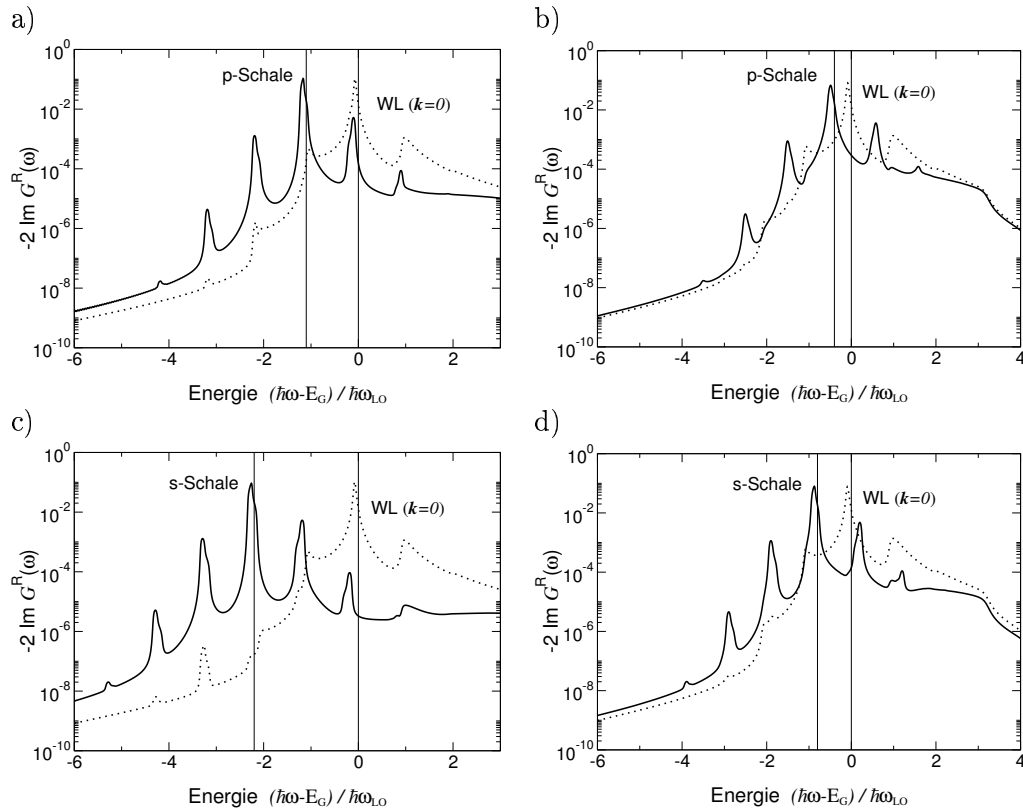
die nur aus diskreten Niveaus bestehen zunächst keine Verbreiterung der  $\delta$ -förmigen Resonanzen in der Spektralfunktion zu erwarten. Die beobachtete Verbreiterung der Resonanzen in Abb. 3.9 kann für diskrete Systeme als Artefakt der RPA-Näherung verstanden werden. Dazu betrachtet man in der störungstheoretischen Selbstenergie (3.28) nur diskrete Zustände. Einsetzen in (3.26) liefert dann reelle Pole der retardierten Green'schen Funktion, die nicht genau den Abstand einer Phonon-Energie haben. Für eine selbstkonsistente Lösung sind die Gleichungen (3.26) und (3.27) zu iterieren. Dabei entstehen in jedem Schritt  $\delta$ -förmige Seitenbanden im Abstand von etwa einer Phonon-Energie, wodurch verbreiterte Resonanzen in der Spektralfunktion entstehen. In diskreten Systemen liefert die RPA-Näherung so eine zusätzliche und unphysikalische Verbreiterung. Untersucht man jedoch die Ankopplung kontinuierlicher Zustände der Benetzungsschicht, so liefern diese bereits eine Verbreiterung der Resonanzen. Daher kann für die Ankopplung eines Kontinuums an diskrete Energieniveaus angenommen werden, dass die RPA-Näherung vernünftige Ergebnisse liefert. Eine genaue Überprüfung erfordert Vertex-Korrekturen um über die RPA-Näherung hinauszugehen, was den Rahmen einer Diplomarbeit sprengen würde.

#### Ankopplung eines elektronischen Kontinuums

Isolierte diskrete Zustände sind eine Näherung, die nur für spezielle Systeme gültig ist. Bei den betrachteten Quantenpunkt-Strukturen gibt es durch den Herstellungsprozess bedingt immer eine Benetzungsschicht. Diese liefert ein Kontinuum von Zuständen, das nicht als energetisch hinreichend weit entfernt angenommen werden kann. Es muss daher explizit berücksichtigt werden. Betrachtet man die Spektralfunktion eines Systems das diskrete und kontinuierliche Zustände enthält, so erwartet man immer eine endliche Lebensdauer der Ladungsträger in den diskreten Zuständen. In der Selbstenergie niedrigster Ordnung (3.28) liefert das Kontinuum für den Imaginärteil Beiträge durch eine kontinuierlich dichte Serie von  $\delta$ -Funktionen. Dies entspricht gerade der Verbreiterung der Resonanzen in der Spektralfunktion. Für die RPA-Näherung kann daher angenommen werden, dass sie bei Berücksichtigung kontinuierlicher Zustände eine gute Näherung ist. Verzelen u. a. [39] liefern für diese Verbreiterung der Resonanzen ein anschauliches Bild. Der Eigenzustand eines Elektrons in dem wechselwirkenden Elektron-Phonon-System ( $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ph}} + \hat{H}_{\text{e-ph}}$ ) lautet in Besetzungszahldarstellung mit den Besetzungen  $N_{\mathbf{q}_i}$  der Phonon-Moden  $\mathbf{q}_i$ :  $|\mathbf{k}, N_{\mathbf{q}_1}, N_{\mathbf{q}_2}, \dots\rangle$ . Für dispersionslose Phononen ist also jeder  $\mathbf{k}$ -Zustand mit einem Kontinuum an Phonon-Zuständen energetisch entartet. Wenn ein Elektron ein Phonon emittiert und anschließend wieder absorbiert, so ist die Wahrscheinlichkeit in den Ausgangszustand zurückzukehren verschwindend gering. Emission und Absorption von Phononen müssen daher in kontinuierlichen Systemen als irreversible Prozesse verstanden werden. Dies liefert gerade eine endliche Lebensdauer der Zustände und

damit Verbreiterungen der Resonanzen in der Spektralfunktion.

Den Einfluss eines Kontinuums auf die Spektralfunktion diskreter Zustände untersucht man im einfachsten Fall durch Ankopplung eines Kontinuums an ein einziges diskretes Energie-Niveau. Numerische Ergebnisse für die Spektralfunktionen der betrachteten Quantenpunkt-Struktur sind in Abb. 3.10 dargestellt. Die Rechnungen wurden für eine Temperatur von  $T = 300$  K und die Materialparameter aus Anh. B.2 durchgeführt. In den einzelnen Abbildungen ist die Ankopplung einer Schale (s oder p) an die Benetzungsschicht für Elektronen (a),(c) und Löcher (b),(d) dargestellt. Dabei kennzeichnen senkrechte Linien die  $\delta$ -förmigen freien Einteilchen-Energien der Quantenpunkt-Niveaus. Zusätzlich gezeigt ist die Spektralfunktion der Benetzungsschicht an der Bandkante ( $\mathbf{k} = 0$ ).

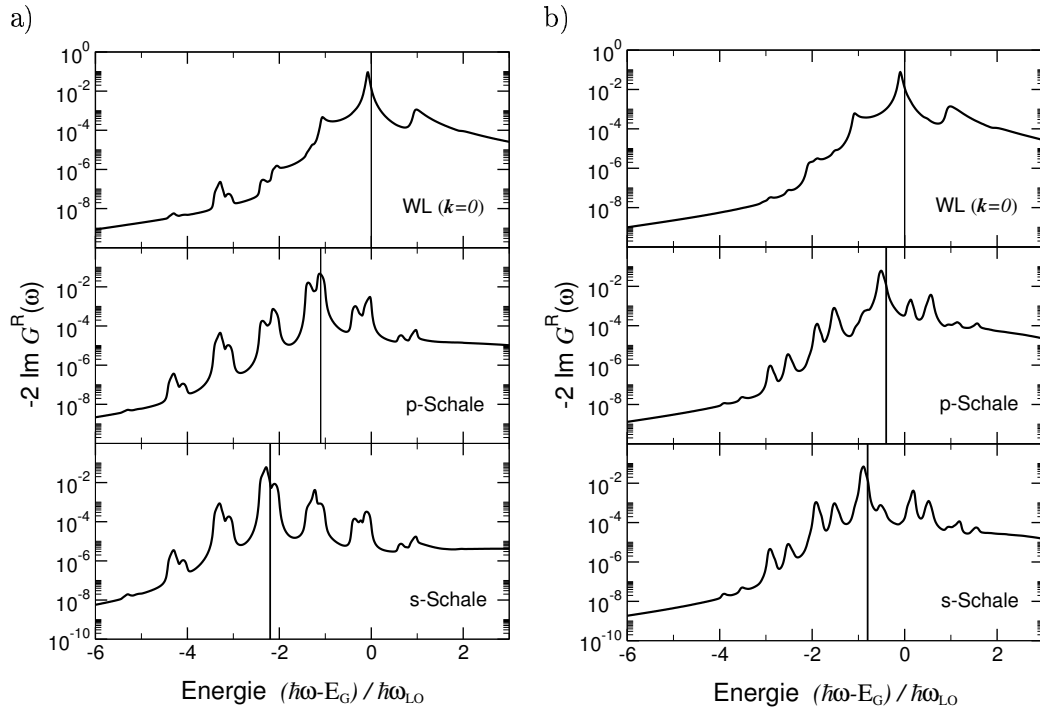


**Abb. 3.10:** Spektralfunktion für Quantenpunkt-Niveaus, die einzeln an das Kontinuum von Zuständen einer Benetzungsschicht gekoppelt sind. Dargestellt ist jeweils für Elektronen (a),(c) und Löcher (b),(d) das Quantenpunkt-Niveau (durchgezogene Linie) und die Benetzungsschicht an der Bandkante  $\mathbf{k} = 0$  (gepunktete Linie).

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

Als Renormierung erkennt man in allen Abbildungen deutlich eine Verschiebung der Haupt-Resonanz gegenüber den freien Energien und eine Verbreiterung. Die Verschiebung ist dabei vergleichbar mit derjenigen an der Bandkante (Abb. 3.5). Zu beiden Seiten der Haupt-Resonanz existieren Seitenbanden mit annähernd gleicher Verbreiterung, wie aus dem Modell unabhängiger Bosonen zu erwarten ist. Bei höheren Energien verschwindet die Seitenbanden-Struktur im Kontinuum der Benetzungsschicht.

Betrachtet man schließlich das vollständige System aus zwei Quantenpunkt-Niveaus und der Benetzungsschicht, so ergibt sich eine komplizierte Spektralfunktion. Diese wurde für eine Temperatur von  $T = 300$  K und die Material-Parameter aus Anh. B.2 berechnet. Sie beinhaltet alle zuvor diskutierten Effekte und ist in Abb. 3.11 dargestellt.



**Abb. 3.11:** Spektralfunktion für zwei Quantenpunkt-Niveaus, die an ein Kontinuum von Zuständen der Benetzungsschicht gekoppelt sind. Dargestellt für Elektronen (a) und Löcher (b) sind jeweils die Spektralfunktionen für die Benetzungsschicht an der Bandkante ( $k = 0$ ) (oben), die p-Schale (mitte) und die s-Schale (unten). Senkrechte Linien markieren die entsprechende  $\delta$ -förmige Spektralfunktion freier Quantenpunkt-Niveaus bzw. freier Teilchen an der Bandkante.



### 3.5. Nichtdiagonale Beiträge

In Abschn. 2.7 wurde die Entwicklung der Green'schen Funktion nach Eigenfunktionen vorgestellt. Für Quantenpunkte wurden dabei die Beiträge nichtdiagonaler Green'scher Funktionen als vernachlässigbar angenommen. Dies soll in diesem Abschnitt überprüft werden. Betrachtet man nichtdiagonale Green'sche Funktionen, so entstehen im Allgemeinen Korrelationen zwischen Quantenpunkten an verschiedenen Positionen. Die Quantenpunkt-Positionen müssen daher explizit berücksichtigt werden.

Im Folgenden wird die nichtdiagonale Kadanoff-Baym Gleichung für die retardierte Green'sche Funktion im Frequenzraum gelöst. Damit werden dann die nichtdiagonalen Beiträge zur Spektralfunktion der diagonalen Green'schen Funktion untersucht. Die Quantenpunkt-Positionen führen über eine Mittelungsprozedur zu Termen verschiedener Ordnung in der Quantenpunkt-Dichte. Im Grenzfall verschwindender Quantenpunkt-Dichte (nullte Ordnung) können damit die nichtdiagonalen Beiträge für einen einzelnen Quantenpunkt abgeschätzt werden.

#### Matrix-Struktur der Dyson-Gleichung

Ausgangspunkt ist die allgemeine Form der Kadanoff-Baym Gleichung (3.10) mit der Selbstenergie (3.20):

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \epsilon_\alpha\right) G_{\alpha,\beta}^R(t) = \delta(\tau) + \sum_\gamma \int_0^\tau d\tau' \Sigma_{\alpha,\gamma}^R(\tau - \tau') G_{\gamma,\beta}^R(\tau') , \quad (3.39a)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha,\gamma}^R(t - t') &= \sum_{\eta,\eta'} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\eta}(\mathbf{q}) M_{\eta',\gamma}(-\mathbf{q}) \\ &\times G_{\eta,\eta'}^R(t - t') \left[ (N_{\text{LO}} + 1) e^{-i\omega_{\text{LO}}(t-t')} + N_{\text{LO}} e^{i\omega_{\text{LO}}(t-t')} \right] . \end{aligned} \quad (3.39b)$$

Diese Gleichungen erhält man analog zur Herleitung der diagonalen Green'schen Funktion in Abschn. 3.2 aus der allgemeinen Dyson-Gleichung (2.81) und der Selbstenergie (2.80). Der Unterschied besteht in der Mitnahme der nichtdiagonalen Terme, die bislang mit der Näherung (2.78) bzw. (2.79) vernachlässigt wurden. Eine Fourier-Transformation von (3.39) liefert daraus die zu (3.26) und (3.27) analogen Gleichungen:

$$(\hbar\omega - \epsilon_\alpha) G_{\alpha,\beta}^R(\omega) = \delta_{\alpha,\beta} + \sum_\gamma \Sigma_{\alpha,\gamma}^R(\omega) G_{\gamma,\beta}^R(\omega) , \quad (3.40a)$$

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

---

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha,\gamma}^R(\omega) &= \sum_{\eta,\eta'} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\eta}(\mathbf{q}) M_{\eta',\gamma}(-\mathbf{q}) \\ &\times \left[ (N_{\text{LO}} + 1) G_{\eta,\eta'}^R(\omega - \omega_{\text{LO}}) + N_{\text{LO}} G_{\eta,\eta'}^R(\omega + \omega_{\text{LO}}) \right] . \end{aligned} \quad (3.40b)$$

Bezüglich der Zustandsindizes erhält man eine Matrix-Gleichung. Die Selbstenergie (3.40b) betrachtet man in niedrigster Ordnung und berücksichtigt dabei nur freie Green'sche Funktionen. Diese sind analytisch bekannt und diagonal im Zustandsindex:

$$G_{\eta,\eta'}^R(\omega \pm \omega_{\text{LO}}) \rightarrow G_{\eta,\eta}^R(\omega \pm \omega_{\text{LO}}) = \frac{1}{\hbar(\omega \pm \omega_{\text{LO}}) - \epsilon_{\eta} + i\delta} \quad \text{mit } \delta \rightarrow 0 . \quad (3.41)$$

Dadurch lässt sich die Selbstenergie (3.40b) geschlossen als Matrix berechnen und liefert aus (3.40a) die Matrix-Gleichung:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \omega - \epsilon_{\mathbf{k}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \omega - \epsilon_{\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}} & G_{\mathbf{k},\alpha} \\ \hline G_{\alpha,\mathbf{k}} & G_{\alpha,\alpha} \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ & \ddots \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} & \Sigma_{\mathbf{k},\alpha'} \\ \hline \Sigma_{\alpha,\mathbf{k}'} & \Sigma_{\alpha,\alpha'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} & G_{\mathbf{k}',\alpha} \\ \hline G_{\alpha',\mathbf{k}} & G_{\alpha',\alpha} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.42)$$

mit

$$\Sigma_{\alpha,\gamma}^R(\omega) = \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \frac{M_{\alpha,\eta}(\mathbf{q}) M_{\eta,\gamma}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\eta} + i\delta} . \quad (3.43)$$

In der Matrix-Gleichung (3.42) sind dabei nur die entsprechenden Block-Matrizen angegeben. Zusätzlich wurde mit  $\xi = \pm 1$  und den Besetzungsfunktionen  $N_- = N_{\text{LO}}$  und  $N_+ = (N_{\text{LO}} + 1)$  der Phononen die Notation für die Selbstenergie vereinfacht. Nichtdiagonale Beiträge zur diagonalen Green'schen Funktion für Ladungsträger in der Benetzungsschicht werden aufgrund der geringen Quantenpunkt-Dichte vernachlässigbar sein. Interessant sind daher nur die nichtdiagonalen Beiträge zur diagonalen Green'schen Funktion für Quantenpunkte. Dafür erhält man aus (3.42) ein geschlossenes Gleichungssystem:

$$(\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(\omega) = 1 + \Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(\omega) G_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(\omega) , \quad (3.44a)$$

$$(\hbar\omega - \epsilon_{\alpha}) G_{\alpha,\alpha}(\omega) = 1 + \sum_{\mathbf{k}'} \Sigma_{\alpha,\mathbf{k}'}(\omega) G_{\mathbf{k}',\alpha}(\omega) + \sum_{\alpha'} \Sigma_{\alpha,\alpha'}(\omega) G_{\alpha',\alpha}(\omega) , \quad (3.44b)$$

$$(\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k},\alpha}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}'} \Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega) G_{\mathbf{k}',\alpha}(\omega) + \sum_{\alpha'} \Sigma_{\mathbf{k},\alpha'}(\omega) G_{\alpha',\alpha}(\omega) . \quad (3.44c)$$

In diesem Gleichungssystem enthalten die Quantenpunkt-Indizes  $\alpha \in \{m, \mathbf{R}\}$  noch die Positionen  $\mathbf{R}$  der Quantenpunkte. Die Verteilung der Quantenpunkt-Positionen auf der Benetzungsschicht wird als homogen und zufällig angenommen (Kap. 1). Damit ist (3.44) in dieser Form nicht lösbar, da die Positionen  $\mathbf{R}$  nicht bekannt sind. Für eine unendlich ausgedehnte Benetzungsschicht ( $A \rightarrow \infty$  mit  $N \rightarrow \infty$ ) ergibt sich aber eine bekannte mittlere Quantenpunkt-Dichte  $n_{\text{QD}} = \frac{N}{A}$ . Im Folgenden wird eine Mittelungsprozedur für die Quantenpunkt-Positionen vorgestellt, so dass in (3.44) nur noch die Quantenpunkt-Dichte  $n_{\text{QD}}$  eingeht.

### Mittelungsprozedur

Anschaulich betrachtet man mit der diagonalen Green'schen Funktion  $G_{\alpha,\alpha}^{\text{R}}(\omega)$  für einen einzelnen Quantenpunkt die Wahrscheinlichkeitsamplitude für Propagationswege von Ladungsträgern, die alle anderen Quantenpunkte des Systems und die Benetzungsschicht enthalten. Im Grenzfall verschwindender Quantenpunkt-Dichte können andere Quantenpunkte vernachlässigt werden. Untersucht werden dann nur Propagationswege, die einen einzelnen Quantenpunkt und die Benetzungsschicht enthalten. Diese Betrachtung wird für hinreichend kleine Quantenpunkt-Dichten eine gute Näherung sein. Ziel ist es daher, in dem Gleichungssystem (3.44) berücksichtigte Terme nach ihrer Ordnung in der Quantenpunkt-Dichte  $n_{\text{QD}}$  zu klassifizieren. Der Grenzfall verschwindender Quantenpunkt-Dichte entspricht dann gerade den Termen nullter Ordnung. Dazu sind die nicht-selbstkonsistenten Diagramme für Terme des Gleichungssystems (3.44) in Abb. 3.12 dargestellt.

Die Diagramme enthalten über die vollen Green'schen Funktionen beliebig komplexe Kombinationen der RPA-Selbstenergie. Bei der Rekonstruktion der Terme für diese Diagramme summiert man nach den Regeln der Feynman-Technik [27] über alle Argumente der inneren Vertizes. Die Summation über alle Quantenpunkt-Positionen (Phasenfaktoren) kann damit für jedes beliebige Diagramm angegeben und ausgeführt werden. Unterscheiden muss man dabei zwischen inneren und äusseren Vertizes. Äussere Vertizes sind durch die betrachtete Green'sche Funktion  $G_{\alpha,\alpha}^{\text{R}}(\omega)$  festgelegt. Innere Vertizes hingegen stellen mögliche Propagationswege dar, über die daher summiert wird. In den Matrixelementen der Vertizes sind die Quantenpunkt-Positionen

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

---

dabei nur als Phasenfaktoren enthalten (Abschn. A.2.2):

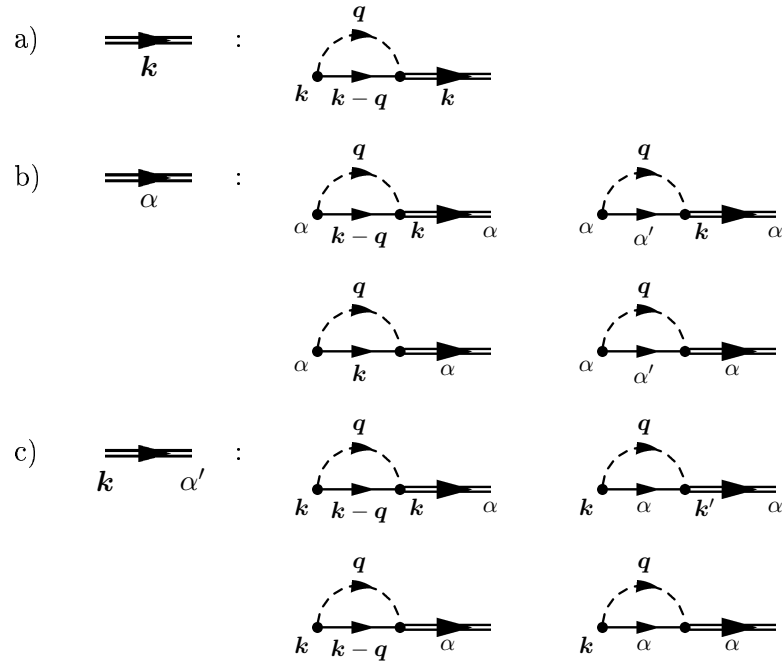
$$M_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{q}) \propto \frac{1}{\sqrt{A}} \quad (3.45a)$$

$$M_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{q}) \propto \frac{1}{A} e^{i(-\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}} \quad (3.45b)$$

$$M_{\alpha,\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \propto \frac{1}{A} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}} \quad (3.45c)$$

$$M_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{q}) \propto \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}. \quad (3.45d)$$

Für die Klassifizierung der Diagramme nach Ordnungen in der Quantenpunkt-Dichte  $n_{\text{QP}}$  werden zunächst nur Diagramme betrachtet, in denen Quantenpunkt-Positionen nur an inneren Vertizes auftreten. Im einfachsten Fall ist dies ein Diagramm, in dem nur über eine unabhängige Quantenpunkt-Position  $\mathbf{R}'$  summiert wird. Da die Positio-



**Abb. 3.12:** Nicht-selbstkonsistente Diagramme für die Terme des Gleichungssystems (3.44): (a) Diagramm der diagonalen Green'schen Funktion für die Benetzungsschicht, (b) Diagramme der diagonalen Green'schen Funktion für Quantenpunkte, (c) Nichtdiagonale Diagramme, die an die diagonale Green'sche Funktion für Quantenpunkte koppeln.

nen zufällig verteilt sind, erhält man über die Definition des arithmetischen Mittels

$$\frac{1}{A} \sum_{\mathbf{R}'} f(\mathbf{R}') = \frac{N}{A} \langle f \rangle . \quad (3.46)$$

Eine Erweiterung auf ein Diagramm mit einer Summation über zwei unabhängige Quantenpunkt-Positionen liefert dann:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R}', \mathbf{R}''} f(\mathbf{R}') f(\mathbf{R}'') &= \sum_{\mathbf{R}'} f(\mathbf{R}') \left[ f(\mathbf{R}') + \sum_{\mathbf{R}'' \neq \mathbf{R}'} f(\mathbf{R}'') \right] \\ &= [N \langle f^2 \rangle + N(N-1) \langle f \rangle^2] \\ &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} N \langle f^2 \rangle + N^2 \langle f \rangle^2 . \end{aligned} \quad (3.47)$$

Dies lässt sich beliebig fortsetzen, und man erhält so verschiedene Ordnungen in der Quantenpunkt-Anzahl  $N$ . Betrachtet man Diagramme, die zusätzlich an einem äußeren Vertex eine Quantenpunkt-Position  $\mathbf{R}$  enthalten, so sind nur noch alle Positionen mit  $\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'$  unabhängig voneinander. Im einfachsten Fall enthält das Diagramm einen äußeren Vertex  $\mathbf{R}$  und die Summation über einen inneren Vertex  $\mathbf{R}'$ :

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R}'} f(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}') &= f(\mathbf{R}) \left[ f(\mathbf{R}) + \sum_{\mathbf{R}' \neq \mathbf{R}} f(\mathbf{R}') \right] \\ &= f(\mathbf{R}) [f(\mathbf{R}) + (N-1) \langle f \rangle] \\ &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} f^2(\mathbf{R}) + N f(\mathbf{R}) \langle f \rangle . \end{aligned} \quad (3.48)$$

Mit (3.46)-(3.48) und den Vorfaktoren aus (3.45) lassen sich so beliebige Diagramme nach ihrer Ordnung in der Quantenpunktdichte  $n_{\text{QD}}$  klassifizieren. Verbleibende Vorfaktoren  $1/A^i$  verteilen sich dabei für jedes beliebige Diagramm auf die noch auszuführenden Integrale über weitere Zustandsindizes  $\mathbf{k}$ . Die Terme  $\propto (n_{\text{QD}})^i$  beschreiben anschaulich Propagationen zwischen verschiedenen Quantenpunkten, während die Beiträge  $\propto (f(\mathbf{R}))^i$  mehrfache Propagationen über einen einzigen Quantenpunkt beschreiben. Für die Streuung zwischen verschiedenen Quantenpunkten liefern die Phasenfaktoren der Form  $f(\mathbf{R}) = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}}$  im Mittel gerade Impulserhaltung am Vertex:  $\langle f \rangle = \delta(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ .

### Gleichungssystem für nullte Ordnung in der Quantenpunkt-Dichte

Bei verschwindender Quantenpunkt-Dichte ( $n_{\text{QD}} \rightarrow 0$ ) verbleiben damit nur Terme, die wiederholte Streuung an einem einzelnen Quantenpunkt beschreiben. Es gehen

### 3. Spektrale Eigenschaften von Polaronen

daher nur die Positionen eines einzelnen Quantenpunktes ein, wobei ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $\mathbf{R} = \mathbf{R}' = \mathbf{R}'' = \dots = 0$  gewählt werden kann. Daraus erhält man dann das Gleichungssystem:

$$(\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(\omega) = 1 + \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \frac{M_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{q}) M_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\delta}, \quad (3.49a)$$

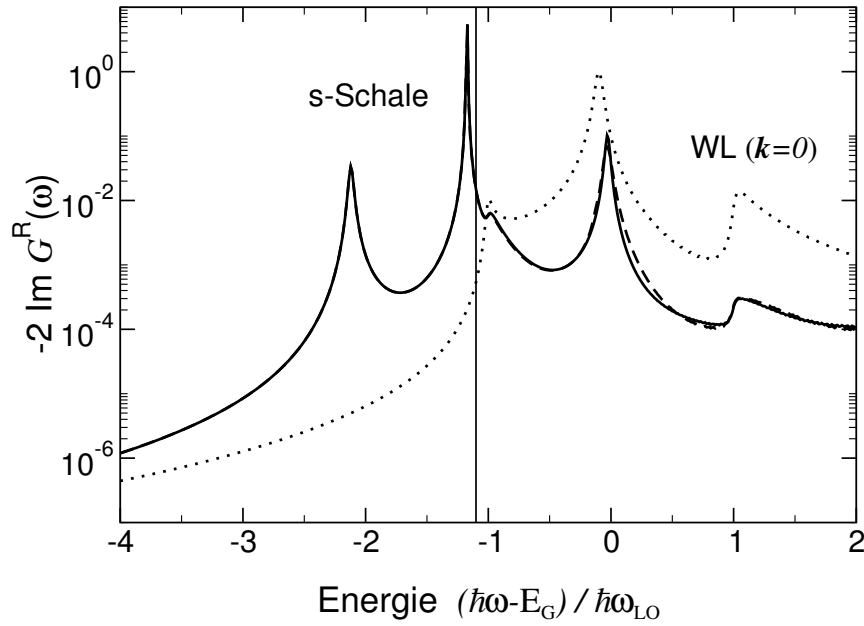
$$\begin{aligned} (\hbar\omega - \epsilon_{\alpha}) G_{\alpha,\alpha}(\omega) &= 1 \\ &+ \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \left[ \sum_{\mathbf{k}'} \frac{M_{\alpha,\mathbf{k}'}(\mathbf{q}) M_{\mathbf{k}',\alpha}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\delta} + \frac{M_{\alpha,\alpha}(\mathbf{q}) M_{\alpha,\alpha}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\alpha} + i\delta} \right] G_{\alpha,\alpha}(\omega) \\ &+ \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \sum_{\mathbf{k}'} \left[ \frac{M_{\alpha,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(\mathbf{q}) M_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\mathbf{k}'}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + i\delta} + \frac{M_{\alpha,\alpha}(\mathbf{q}) M_{\alpha,\mathbf{k}'}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\alpha} + i\delta} \right] G_{\mathbf{k}',\alpha}(\omega), \end{aligned} \quad (3.49b)$$

$$\begin{aligned} (\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k},\alpha}(\omega) &= \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \frac{M_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{q}) M_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}(\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\delta} G_{\mathbf{k},\alpha}(\omega) \\ &+ \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{M_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{q}) M_{\alpha,\mathbf{k}'}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\alpha} + i\delta} G_{\mathbf{k}',\alpha}(\omega) \\ &+ \sum_{\mathbf{q},\xi} N_{\xi} \left[ \frac{M_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{q}) M_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\alpha}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\delta} + \frac{M_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{q}) M_{\alpha,\alpha}(-\mathbf{q})}{\hbar(\omega - \xi\omega_0) - \epsilon_{\alpha} + i\delta} \right] G_{\alpha,\alpha}(\omega). \end{aligned} \quad (3.49c)$$

Die Auswertung der Integrale ( $\sum_{\mathbf{q}}$  im Kontinuums limites) vereinfacht sich wenn das System in der Wachstumsebene keine ausgezeichnete Richtung aufweist. Ansonsten müsste die Richtungsabhängigkeit der nicht-diagonalen Green'schen Funktionen  $G_{\mathbf{k},\alpha}$  bzw.  $G_{\alpha,\mathbf{k}}$  berücksichtigt werden. Betrachtet man Quantenpunkte die nur eine s-Schale enthalten, so ist diese Rotationssymmetrie gegeben. Die Matrixelemente sind richtungsunabhängig, womit auch die nicht-diagonalen Green'schen Funktionen nur noch vom Betrag  $|\mathbf{k}|$  abhängen. Das Gleichungssystem (3.49) kann damit in der Struktur

$$\left[ \begin{bmatrix} \hbar\omega - \epsilon_{\alpha} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \hbar\omega - \epsilon_{|\mathbf{k}|} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \widetilde{M}_{\alpha,\alpha} & \widetilde{M}_{\alpha,|\mathbf{k}|} \\ \widetilde{M}_{|\mathbf{k}|,\alpha} & \widetilde{M}_{|\mathbf{k}|,|\mathbf{k}'|} \end{bmatrix} \right] \begin{bmatrix} G_{\alpha,\alpha} \\ \vdots \\ G_{|\mathbf{k}|,\alpha} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

durch Matrix-Inversion gelöst werden und ergibt die in Abb. 3.13 dargestellte Spektralfunktion. Die Rechnung wurde für Elektronen, eine Temperatur von  $T = 300$  K und die Materialparameter aus Anh. B.2 durchgeführt. Für die s-Schale wurde dabei eine Energie von  $-1,1 \hbar\omega_{\text{LO}}$  angenommen. Man erkennt, dass nichtdiagonale Beiträge nur kleine Korrekturen an der oberen Seitenbande liefern. Die Vernachlässigung der nichtdiagonalen Beiträge ist daher eine gute Näherung. Zum Vergleich ist die Spektralfunktion an der Bandkante ( $\mathbf{k} = 0$ ) eingezeichnet, welche aufgrund der verschwindenden Quantenpunkt-Dichte keine Korrekturen durch Quantenpunkte zeigt.



**Abb. 3.13:** Korrekturen durch nichtdiagonale Beiträge (gestrichelte Linie) in der diagonalen Spektralfunktion (durchgezogene Linie) für Quantenpunkte mit einer s-Schale bei  $T = 300$  K. Zum Vergleich mit der Spektralfunktion an der Bandkante (gepunktete Linie) und der freien Einteilchen-Energie der s-Schale (senkrechte Linie).





## 4. Ladungsträger Kinetik

Nachdem im letzten Kapitel das Energiespektrum von Polaronen untersucht wurde, soll in diesem Kapitel die Kinetik von Ladungsträgern betrachtet werden. Eine Einführung erfolgt mit der Diskussion der energieerhaltenden Boltzmann-Kinetik. Diese wird in der Literatur vielfach verwendet, ist jedoch aufgrund implizierter Annahmen für Beschreibung der Streuung an Phononen auf kurzen Zeitskalen ( $< 100$  fs) nicht gültig. Auf kurzen Zeitskalen muss die Beschreibung der Kinetik daher im Rahmen der Quantenkinetik erfolgen. Nach der Herleitung der entsprechenden Gleichungen werden damit Streuprozesse von Ladungsträgern in der Benetzungsschicht und in Quantenpunkten untersucht. Insbesondere werden dabei Energie-Erhaltung während der Streuprozesse und Nicht-Markov'sche Effekte betrachtet.

### 4.1. Boltzmann-Kinetik

Die einfachste Beschreibung der Kinetik von Ladungsträgern in Halbleitern erfolgt mit einer Boltzmann-Gleichung [13]. Ausgangspunkt dafür ist die Beschreibung der Übergangswahrscheinlichkeit durch Fermi's Goldene Regel [26]. Für den Übergang von einem Zustand  $\beta$  in einen Zustand  $\alpha$  erhält man die Übergangswahrscheinlichkeit:

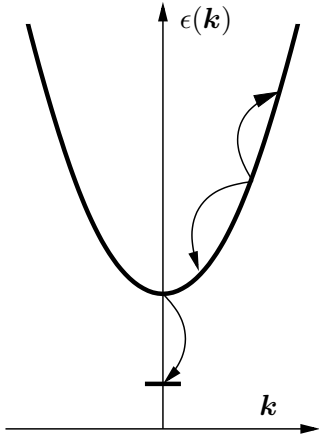
$$w_{\pm}(\alpha, \beta) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\alpha} \pm \hbar\omega_{\text{LO}}) . \quad (4.1)$$

Die  $\delta$ -Funktion beschreibt dabei strikte Energieerhaltung während des Überganges und entsteht bei der Herleitung durch die Annahme einer hinreichend langen Dauer des Streuprozesses. Man kann daher mit Fermi's Goldener Regel die Kinetik von Ladungsträgern nur auf einer Zeitskala beschreiben, die größer ist als diejenige des Streuprozesses selbst. Auf kürzeren Zeitskalen gilt daher die Energieerhaltung bzw. die  $\delta$ -Funktion nur noch im Rahmen der Unschärferelation  $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ . Für eine kinetische Gleichung liefert Fermi's Goldene Regel die Übergangswahrscheinlichkeiten für voll besetzte Ausgangszustände und leere Endzustände. Besetzungseffekte und das Pauli-Prinzip für Fermionen werden dabei nicht berücksichtigt. Dies führt man über Besetzungsfaktoren  $1 - f_{\alpha}$  bzw.  $f_{\alpha}$  für Ein- und Ausstreuung ein. Zusätzlich gewichtet man noch mit der Anzahl der Phononen  $n_{\text{LO}}$  bzw.  $n_{\text{LO}} + 1$  für Absorption

bzw. Emission von Phononen. Als Streuterme im Rahmen einer Boltzmann-Gleichung erhält man damit:

$$\left. \frac{\partial f_\alpha(t)}{\partial t} \right|_{\text{coll.}} = \sum_{\beta} \left\{ (1 - f_\alpha(t)) f_\beta(t) [(n_{\text{LO}} + 1) w_-(\alpha, \beta) + n_{\text{LO}} w_+(\alpha, \beta)] \right. \\ \left. - (1 - f_\beta(t)) f_\alpha(t) [(n_{\text{LO}} + 1) w_-(\beta, \alpha) + n_{\text{LO}} w_+(\beta, \alpha)] \right\}. \quad (4.2)$$

Die erste Zeile beschreibt dabei die Einstreuung in den Zustand  $\alpha$  aus dem Zustand  $\beta$ . Analog beschreibt die zweite Zeile die Ausstreuung aus dem Zustand  $\alpha$  in den Zustand  $\beta$ .



**Abb. 4.1:** Boltzmann-Relaxation auf einer Quasiteilchen-Dispersion.

Für den Fall der Streuung an Phononen führt die strikte Energieerhaltung zu einer Blockade von Streukanälen, was aus der Literatur als *Phonon Bottleneck*<sup>1</sup> bekannt ist. In Abb. 4.1 ist dies skizziert. Ladungsträger auf einer Quasiteilchen-Dispersion (Polaron) können nur durch Emission oder Absorption von Phononen ( $\Delta E = \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) gestreut werden. Existieren genau eine Phonon-Energie unterhalb des Ausgangszustandes keine Zustände, so können die Ladungsträger nicht weiter relaxieren. In das Band angeregte Ladungsträger können so unter Umständen nicht in den Grundzustand relaxieren. Analoges gilt für den Einfang von Ladungsträgern durch Quantenpunkte.

Experimentell kann diese theoretische Vorhersage nicht bestätigt werden. Entsprechende Lumineszenz-Spektren zeigen Rekombinationen zwischen Energiezuständen, welche nach Fermi's Goldener Regel nicht besetzt sein dürfen [15]. Da Ladungsträger auf einer Zeitskala von einer Nanosekunde rekombinieren ist die Voraussetzung für Lumineszenz eine Relaxationszeit von unter einer Nanosekunde. Eine schnelle Relaxation durch Streuung an LO-Phononen ist nach Fermi's Goldener Regel unwahrscheinlich, da der Abstand zweier diskreter Quantenpunkt-Niveaus im Allgemeinen nicht der Phonon-Energie entspricht. Für die theoretische Beschreibung der beobachteten Lumineszenz wurden daher verschiedene Prozesse untersucht, die trotz einer Verstimmung der Energie-Niveaus gegenüber der Phonon-Energie Relaxation liefern. Inoshita und Sakaki [16] haben mit störungstheoretischen Rechnungen zweiter Ordnung Mehrphononenprozesse durch Kombination von optischen (LO) und akustischen (LA) Phononen betrachtet. Dies ermöglicht in GaAs bei 300 K eine für Lumineszenz ausreichende Relaxation bei einer Verstimmung von

<sup>1</sup>deu.: Phonon Flaschenhals

$\pm 3$  meV gegenüber der LO-Phonon-Energie. Weiterhin untersucht wurde die Relaxation über Auger-Prozesse der Coulomb-Streuung [37, 7, 21, 24]. Auger-Prozesse sind aber nur für hohe Ladungsträger-Dichten effizient. Erst bei einer Ladungsträger-Dichte von etwa  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  erhält man Einfang-Zeiten die mit denen von Ein-Phonon-Prozessen ( $\propto 1 \text{ ps}$ ) vergleichbar sind.

Wie in Kap. 3 gezeigt, bilden sich in wechselwirkenden Systemen renormierte Quasiteilchen aus. Im Fall der Elektron-Phonon Wechselwirkung sind dies Polaronen, zwischen deren Zuständen dann auch die Streuprozesse stattfinden. Hameau u. a. [11] konnten experimentell zeigen, dass in Systemen aus diskreten Energie-Niveaus eine starke Kopplung von Elektronen und Phononen durch kohärente Effekte entsteht. Die Relaxation zwischen diskreten Polaronen wurde von Verzelen u. a. [38] im Rahmen einer Ratengleichung untersucht. Darüber hinausgehend soll im Folgenden die Relaxation von Polaronen im Rahmen einer quantenkinetischen Gleichung untersucht werden. Dabei beschränkt sich die Betrachtung nicht nur auf ein Subsystem aus diskreten Quantenpunkt-Niveaus sondern berücksichtigt auch die Benetzungsschicht.

## 4.2. Quantenkinetische Gleichungen

Ausgangspunkt für die quantenkinetische Beschreibung von Ladungsträgern ist die Dyson-Gleichung (2.81). Mithilfe der Langreth-Wilkins Theoreme (2.60) erhält man daraus für  $G^<$  die Kadanoff-Baym Gleichung

$$\begin{aligned} \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_{\lambda_1}(\alpha; t_1) \right] G_{\lambda_1, \lambda_2}^<(\alpha; t_1, t_2) \\ = \sum_{\lambda_3} \int dt_3 \left[ \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^R(\alpha; t_1, t_3) G_{\lambda_3, \lambda_2}^<(\alpha; t_3, t_2) \right. \\ \left. + \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^<(\alpha; t_1, t_3) G_{\lambda_3, \lambda_2}^A(\alpha; t_3, t_2) \right] . \quad (4.3) \end{aligned}$$

Durch Subtraktion der entsprechenden Gleichung die Zeitableitungen nach dem zweiten Zeitargument enthält folgt eine Bewegungsgleichung mit einer Zeitableitung nach der Schwerpunkt-Zeit  $t$  (vgl. Abschn. 2.6):

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2} \right\} G_{\lambda_1, \lambda_2}^<(\alpha; t_1, t_2) \\ = \left[ h_{\lambda_1}(\alpha; t_1) - h_{\lambda_2}(\alpha; t_2) \right] G_{\lambda_1, \lambda_2}^<(\alpha; t_1, t_2) + S_{\lambda_1, \lambda_2}(\alpha; t_1, t_2) . \quad (4.4) \end{aligned}$$

Die Korrelationsterme sind dabei gegeben durch

$$\begin{aligned}
 S_{\lambda_1, \lambda_2}(\alpha; t_1, t_2) = \sum_{\lambda_3} \int dt_3 \left[ \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^R(\alpha; t_1, t_3) G_{\lambda_3, \lambda_2}^<(\alpha; t_3, t_2) \right. \\
 + \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^<(\alpha; t_1, t_3) G_{\lambda_3, \lambda_2}^A(\alpha; t_3, t_2) \\
 - G_{\lambda_1, \lambda_3}^R(\alpha; t_1, t_3) \Sigma_{\lambda_3, \lambda_2}^<(\alpha; t_3, t_2) \\
 \left. - G_{\lambda_1, \lambda_3}^<(\alpha; t_1, t_3) \Sigma_{\lambda_3, \lambda_2}^A(\alpha; t_3, t_2) \right] . \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

Zur Rekonstruktion der Dichtematrix-Elemente  $i\hbar G_{\alpha, \alpha}^<(t, t) = f_\alpha(t)$  betrachtet man  $t_1 = t_2 = t$ , was gerade einer verschwindenden Relativzeit  $t_r = t_1 - t_2 = 0$  entspricht. Anschaulich betrachtet man mit der Dichtematrix in der  $t_1$ - $t_2$ -Ebene nur die Zeit-Diagonale, welche der Schwerpunkt-Zeit entspricht.

Das Gleichungssystem (4.4) mit (4.5) ist nicht geschlossen, da die Bewegungsgleichung für eine einzeitige Green'sche Funktion an zweizeitige koppelt. Um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, schreibt man zunächst mit den Relationen (2.18) retardierte und avancierte Größen in Propagatoren um:

$$\begin{aligned}
 S_{\lambda_1, \lambda_2}(\alpha; t, t) = \sum_{\lambda_3} \int_{-\infty}^t dt_2 \left[ \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^>(\alpha; t, t_2) G_{\lambda_3, \lambda_2}^<(\alpha; t_2, t) \right. \\
 - \Sigma_{\lambda_1, \lambda_3}^<(\alpha; t, t_2) G_{\lambda_3, \lambda_2}^>(\alpha; t_2, t) \\
 - G_{\lambda_1, \lambda_3}^>(\alpha; t, t_2) \Sigma_{\lambda_3, \lambda_2}^<(\alpha; t_2, t) \\
 \left. + G_{\lambda_1, \lambda_3}^<(\alpha; t, t_2) \Sigma_{\lambda_3, \lambda_2}^>(\alpha; t_2, t) \right] . \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

Mit dem Verallgemeinerten Kadanoff-Baym Ansatz (GKBA, vgl. Kap. 2.6) werden dann gemäß (2.70) zweizeitige Propagatoren auf einzeitige zurückgeführt. Für die RPA-Selbstenergie in GKBA-Näherung erhält man mit  $t > t_2$ :

$$\Sigma_{\lambda_1, \lambda_2}^{\geq}(\alpha; t, t_2) = i\hbar \sum_{\beta, \lambda_3} G_{\lambda_1, \lambda_3}^R(\beta; t, t_2) G_{\lambda_3, \lambda_2}^{\geq}(\beta; t_2, t_2) D^{\leq}(\alpha, \beta; t_2, t) , \quad (4.7)$$

$$\Sigma_{\lambda_1, \lambda_2}^{\leq}(\alpha; t_2, t) = -i\hbar \sum_{\beta, \lambda_3} G_{\lambda_1, \lambda_3}^{\leq}(\beta; t_2, t_2) G_{\lambda_3, \lambda_2}^A(\beta; t_2, t) D^{\leq}(\alpha, \beta; t, t_2) . \quad (4.8)$$

Das Gleichungssystem (4.4) mit (4.5) ist damit für  $G^<$  geschlossen, wenn die retardierte Green'sche Funktion aus Kap. 3.2 verwendet wird. Die Zeitabhängigkeit der verbleibenden zweizeitigen retardierten Green'schen Funktionen ist dabei für das verwendete Modell (Kap. 3.2) nur durch die Zeitdifferenz gegeben.

Durch Wahl der Bandindizes klassifiziert man nun verschiedene Streuterme. Für die Teilchenstreuung innerhalb eines Bandes gilt dabei  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ . Setzt man die

Bezeichner aus der Dichtematrix ein, so erhält man für die Besetzungsfunktion aus (4.4) die Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\lambda_1}(\alpha; t) = S_{\lambda_1}^{\text{coll}}(\alpha; t) \quad (4.9)$$

mit den Streutermen

$$\begin{aligned} S_{\lambda_1}^{\text{coll}}(\alpha; t_1) = 2 \text{Re} \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \sum_{\beta} G_{\lambda_1}^{\text{R}}(\beta; t_1, t_2) [G_{\lambda_1}^{\text{R}}(\alpha; t_2, t_1)]^* \\ \times \left\{ f_{\lambda_1}(\beta; t_2) [1 - f_{\lambda_1}(\alpha; t_2)] D^>(\alpha, \beta; t_2, t_1) \right. \\ \left. - f_{\lambda_1}(\alpha; t_2) [1 - f_{\lambda_1}(\beta; t_2)] D^<(\alpha, \beta; t_2, t_1) \right\}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Die untere Zeile von Gleichung (4.10) ist proportional zur Besetzungswahrscheinlichkeit des Zustandes  $\alpha$  und zur Wahrscheinlichkeit der Nicht-Besetzung des Zustandes  $\beta$ . Sie beschreibt damit die Ausstreuung aus dem Zustand  $\alpha$  in den Zustand  $\beta$ . Analog beschreibt die mittlere Zeile die Einstreuung in den Zustand  $\alpha$  aus dem Zustand  $\beta$ . Die Änderung der Besetzungswahrscheinlichkeit zur aktuellen Zeit hängt dabei von allen Besetzungswahrscheinlichkeiten zu früheren Zeiten ab. Dadurch entstehen sogenannte Gedächtnis-Effekte. Während der Streuprozesse ist die Energieerhaltung durch die retardierte Green'sche Funktion bestimmt. Dies wird im folgenden Abschnitt näher diskutiert.

### Retardierte Green'sche Funktion und Energieerhaltung

Die Bedeutung der retardierten Green'schen Funktion als bestimmende Größe der Energieerhaltung wird deutlich, wenn man die Streuterme (4.10) in Markov-Näherung betrachtet. Bei der Markov-Näherung vernachlässigt man die Retardierung von Besetzungswahrscheinlichkeiten  $f$ , d.h. Besetzungswahrscheinlichkeiten unter dem Zeitintegral werden durch Besetzungswahrscheinlichkeiten zur aktuellen Zeit genähert. Unter dem Zeitintegral verbleibt dann nur ein Produkt aus zwei retardierten Green'schen Funktionen und einer Exponentialfunktion aus dem Phonon-Propagator (2.87), wenn man die Besetzungsfaktoren der Phononen vor das Integral zieht:

$$\Lambda(t_1) = 2 \text{Re} \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 G_{\lambda_1}^{\text{R}}(\beta; t_1, t_2) [G_{\lambda_1}^{\text{R}}(\alpha; t_1, t_2)]^* e^{\pm i\omega_{\text{LO}}(t_1 - t_2)}. \quad (4.11)$$

Zur Erläuterung der Energieerhaltung wird im Folgenden für die retardierte Green'sche Funktion ein einfaches Modell verwendet. Die spätere Diskussion der Quantenkinetik mit Hilfe von Gleichung (4.10) erfolgt mit der numerisch berechneten retardierten Green'schen Funktion aus Kap. 3.

Für die retardierte Green'sche Funktion wird die Darstellung (3.11) verwendet, wobei vereinfachende Modell-Annahmen für die Renormierungsfunktion  $\mathcal{G}(\alpha; t_1 - t_2)$  gemacht werden. Die einfachste Form für die Renormierungsfunktion ist eine exponentielle Dämpfung mit einer Zerfallskonstanten  $\gamma$ , die nicht von Energie und Zeit abhängt:

$$\mathcal{G}(t_1 - t_2) = e^{-\gamma (t_1 - t_2)} . \quad (4.12)$$

Dies ist aus der Literatur als Wigner-Weisskopf Modell bekannt [12, 3]. Das Zeitintegral kann dann für  $\tau = t_1 - t_2$  analytisch gelöst werden und man erhält:

$$\begin{aligned} \Lambda(t_1) &= 2 \operatorname{Re} \int_0^\infty d\tau e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta \pm \hbar\omega_{\text{LO}} + i\gamma)\tau} \\ &= 2 \operatorname{Re} \frac{-i\hbar}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta \pm \hbar\omega_{\text{LO}} + i\gamma} \\ &\stackrel{\gamma \rightarrow 0}{=} -2\pi \delta(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta \pm \hbar\omega_{\text{LO}}) . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Im Grenzfalle  $\gamma \rightarrow 0$  ergibt sich also eine  $\delta$ -förmige Energieerhaltung. Für die retardierte Green'sche Funktion freier Teilchen reproduziert man so aus der quantenkinetischen Gleichung (4.9) die kinetische Gleichung (4.2) der Boltzmann-Kinetik.

In Kap. 3.2 (numerische Lösung) wurde der Betrag  $|\mathcal{G}(\alpha; t_1 - t_2)|$  der Renormierungsfunktion als Dämpfungsfunktion für die retardierte Green'sche Funktion freier Teilchen diskutiert. Es wurde für  $\tau \rightarrow \infty$  eine näherungsweise exponentielle Dämpfung gefunden die vom Zustand  $\alpha$  abhängt und zusätzlich von Oszillationen überlagert ist. Die Oszillationen konnten mit den Spektralfunktionen in Kap. 3.3 und Kap. 3.4 als Schwebungen zwischen den Resonanzen einer Seitenbanden-Struktur identifiziert werden. Verwendet man diese retardierte Green'sche Funktion in den quantenkinetischen Gleichungen (4.9), so werden bei der Streuung an Phononen auch Multiphonon-Prozesse richtig berücksichtigt. Anschaulich wird dies, wenn man die Energieerhaltung (4.11) im Fourier-Raum betrachtet. Mit einer Transformation  $\tau = t_1 - t_2$  erhält man daraus:

$$\Lambda(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^\infty d\tau [G^{\text{R}}(\alpha; \tau) - G^{\text{A}}(\alpha; \tau)] [G^{\text{R}}(\beta; \tau) - G^{\text{A}}(\beta; \tau)]^* e^{\pm\omega_{\text{LO}}\tau} \quad (4.14)$$

$$= \int d\omega \hat{G}(\alpha; \omega) \hat{G}(\beta; \omega \pm \omega_{\text{LO}}) . \quad (4.15)$$

Die Energieerhaltung von Streuprozessen zwischen zwei Zuständen  $\alpha$  und  $\beta$  kann also einfach an dem Überlapp der entsprechenden Spektralfunktionen abgelesen werden, wenn man diese um eine Phonon-Energie gegeneinander verschiebt. Betrachtet man  $\delta$ -förmige Spektralfunktionen freier Teilchen (3.5), so erkennt man sofort dass es nur Beiträge mit strikter Energieerhaltung  $\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta = \pm\hbar\omega_{\text{LO}}$  gibt. An den vollständigen

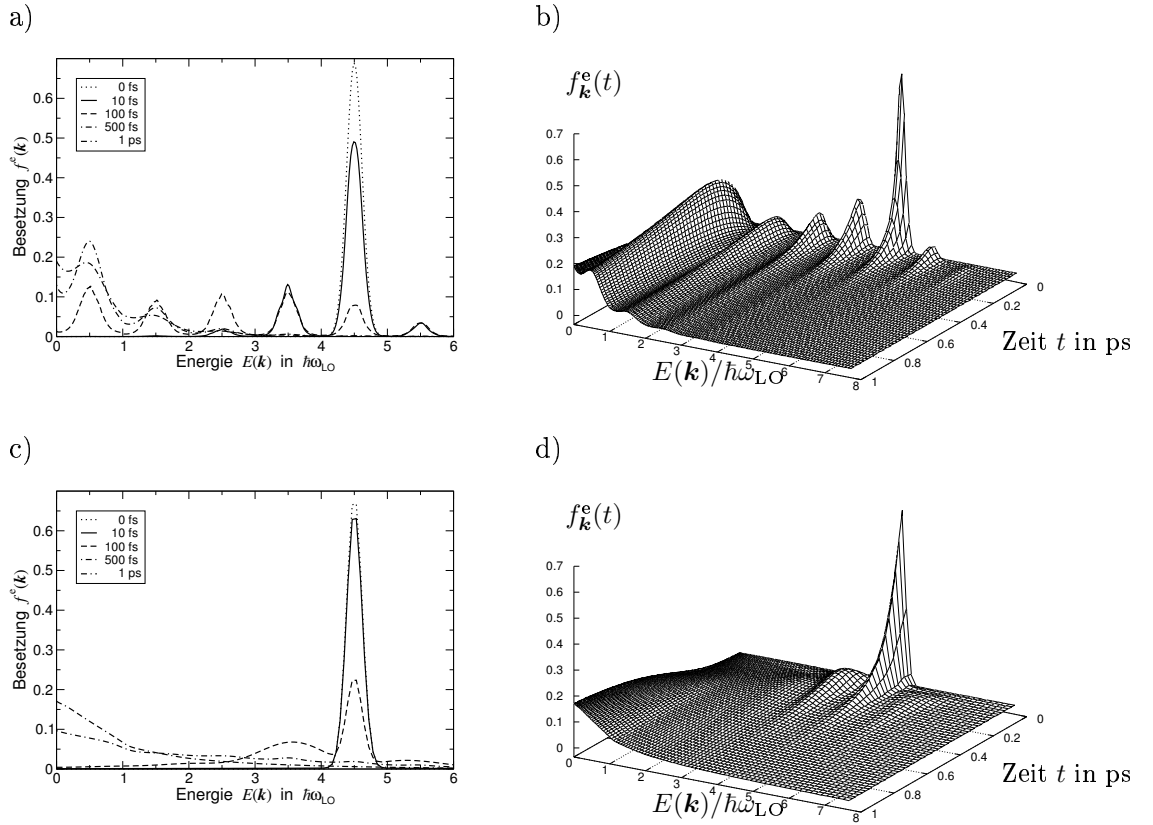
Spektralfunktionen aus Kap. 3.3 und Kap. 3.4 hingegen können die Beiträge vieler Streukanäle abgelesen werden. In der Spektralfunktion des vollständigen Systems Abb. 3.11 mit zwei Quantenpunkt-Niveaus und einer Benetzungsschicht findet man bei allen Seitenbanden einen starken Überlapp von s-Schale, p-Schale und Bandkante. Beispielsweise können daran für die Einstreuung in die s-Schale Beiträge der p-Schale und der Bandkante für alle möglichen Multiphonon-Prozesse abgelesen werden. Außerdem erkennt man durch die Verbreiterung bzw. Aufspaltung der Resonanzen auch einen Überlapp zweier Spektralfunktionen, deren entsprechende Energie-Niveaus nicht den Abstand einer Phonon-Energie haben. Somit entstehen Streukanäle, die bei strikter Energieerhaltung nicht möglich sind.

### 4.3. Kinetik in Quantenfilmen

Um kinetische Eigenschaften zu untersuchen, wird zunächst die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsverteilung von Ladungsträgern in einem Quantenfilm betrachtet. Dargestellt ist dazu in Abb. 4.2 der Vergleich zwischen einer Rechnung in Markov-Näherung mit strikter Energieerhaltung (a),(b) und einer quantenkinetischen Rechnung (c),(d). Abgebildet ist jeweils die Zeitentwicklung der Besetzungsverteilung (rechts) und Schnitte zu bestimmten Zeiten (links). Die Rechnungen wurden für die Materialparameter aus Anh. B.2 und eine Temperatur von  $T = 300$  K durchgeführt. Als Anfangsbesetzung  $f_{\mathbf{k}}(t)$  wurde eine Gauß-Verteilung um  $\epsilon_{\mathbf{k}} = 4,5 \hbar\omega_{\text{LO}}$  angenommen, die einer Ladungsträger-Dichte von  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  entspricht. In der Rechnung mit strikter Energieerhaltung erkennt man eine Serie exakter Repliken der Anfangsverteilung. Dies entspricht gerade einer Relaxationskaskade durch Emission von Phononen. Eine leichte Verbreiterung und die Relaxation unterhalb der Phonon-Schwelle sind auf die numerische Implementierung der strikten Energieerhaltung durch eine verbreiterte Lorentz-Funktion zurückzuführen. Die quantenkinetische Rechnung hingegen zeigt nur eine deutlich verbreiterte Replik. Beide Rechnungen zeigen zu frühen Zeiten ( $t < 400$  fs) auch eine Phonon-Energie oberhalb der Anfangsverteilung eine Besetzungswahrscheinlichkeit. Diese entsteht durch Anregung von Ladungsträgern bei der Absorption von Phononen.

Interessant für Relaxationsprozesse ist dabei die Besetzungsverteilung der Ladungsträger, die einer Gleichgewichtsverteilung entspricht. Da in dem Modell keine Interbandprozesse berücksichtigt werden ist zu erwarten, dass sich jeweils für Elektronen und Löcher Quasi-Gleichgewichtsverteilungen an den Bandkanten ausbilden. Ein Quasi-Gleichgewicht entsteht, wenn z.B. nach einer optischen Anregung Relaxationsprozesse wesentlich schneller ablaufen als Rekombinationsprozesse. Aus dem thermischen Gleichgewicht (leeres Leitungsband, volles Valenzband) werden Elektronen und Löcher gleicher Anzahl erzeugt. Die Ladungsträger relaxieren dann durch Streu-

prozesse an die Bandkanten und bilden dort jeweils Fermi-Verteilungen im Energie-Raum. Für die Besetzungsverteilungen im  $\mathbf{k}$ -Raum sind dabei im Allgemeinen keine Fermi-Verteilungen zu erwarten. Die Identität  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$  gilt nur für die Dispersion (Spektralfunktion) freier Teilchen, da sie aus  $\delta$ -Funktionen an den freien Einteilchen-Energien besteht. An der Dispersion für Elektronen (Abb. 3.6) bzw. Löcher (Abb. 3.6) erkennt man sofort, dass diese Identität aufgrund von Verbreiterungen der Resonanzen und Seitenbanden-Strukturen im Allgemeinen nicht gilt. Den Zusammenhang zwischen Besetzungen im  $\mathbf{k}$ -Raum, Zustandsdichte und Besetzungen im  $\omega$ -Raum liefert im Gleichgewicht das Fluktuations-Dissipations-Theorem [13].



**Abb. 4.2:** Relaxation einer Gauß-förmigen Anfangsverteilung von Elektronen in einem Quantenfilm: (a),(b) Nicht-Markov'sche Rechnung mit strikter Energieerhaltung, (c),(d) quantenkinetische Rechnung. Jeweils gezeigt sind die Zeitentwicklung der Besetzungsverteilung  $f_{\mathbf{k}}(t)$  (rechts) und Schnitte zu festen Zeiten (links).



### Fluktuations-Dissipations-Theorem

Aus der Zustandsdichte  $D(\hbar\omega)$  und den Besetzungen  $f(\hbar\omega)$  aller Zustände mit der Energie  $\hbar\omega$  berechnet sich die Teilchenzahl im System durch

$$N_{\text{ges}} = \int_{-\infty}^{\infty} d(\hbar\omega) f(\hbar\omega) D(\hbar\omega) . \quad (4.16)$$

Dabei sind die Besetzungen im Gleichgewicht Fermi-verteilt:

$$f(\hbar\omega) = F(\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} + 1} , \quad (4.17)$$

mit  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , dem chemischen Potential  $\mu$  und der Temperatur  $T$ . Der Zusammenhang zwischen Zustandsdichte  $D(\hbar\omega)$  und Spektralfunktion  $\hat{G}(\hbar\omega)$  wurde bereits in Kap. 3.1 gezeigt. Aus (4.16) erhält man daher direkt mit (3.8) die Besetzungen im  $\mathbf{k}$ -Raum:

$$f_{\mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} d(\hbar\omega) F(\hbar\omega) \hat{G}_{\mathbf{k}}(\hbar\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(\hbar\omega) F(\hbar\omega) \text{Im } G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\hbar\omega) . \quad (4.18)$$

Die direkte numerische Auswertung von (4.18) ist nicht sinnvoll. Der numerische Aufwand zur Berechnung von  $\hat{G}(\omega)$  ist sehr hoch, da im Bereich des Kontinuums ein großes  $\omega$ -Intervall benötigt wird. Das Abschneiden des  $\mathbf{k}$ -Raumes muss dort aufgrund der parabolischen Dispersion sehr spät erfolgen, so dass nur die Berechnung kleiner Ladungsträger-Dichten sinnvoll ist.

Numerisch stabiler ist die Berechnung der Besetzungen im  $\mathbf{k}$ -Raum aus zeitabhängigen Größen. Mit der Parseval-Identität<sup>2</sup> erhält man aus (4.18) zunächst

$$f_{\mathbf{k}} = -2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dt F(-t) \hat{G}_{\mathbf{k}}(t) = -2 \int_{-\infty}^{\infty} dt F(-t) \text{Im } G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t) . \quad (4.19)$$

Die Fourier-Transformierte  $F(t)$  der Fermi-Verteilung  $F(\omega)$  kann dabei nicht direkt berechnet werden, da das entsprechende Fourier-Integral wegen  $F(\omega) = 1$  für  $\omega \rightarrow -\infty$  divergiert. Statt der Fermi-Verteilung selbst betrachtet man daher die Ableitung einer um  $-\frac{\mu}{\hbar}$  verschobenen Fermi-Verteilung

$$h(\omega) = -\frac{\partial}{\partial \omega} F\left(\omega + \frac{\mu}{\hbar}\right) = \frac{\beta \hbar}{(e^{\beta \hbar \omega} + 1)(e^{-\beta \hbar \omega} + 1)} , \quad (4.20)$$

welche symmetrisch um  $\omega = 0$  ist und zu beiden Seiten abfällt. Mit einem konvergenzerzeugenden Faktor,  $\tilde{F}(\omega) \rightarrow F(\omega) e^{\eta \omega}$  mit  $\eta \rightarrow 0$ , kann dann die Fourier-

<sup>2</sup>Parseval-Identität:  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} a(\omega) b(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt a(-t) b(t)$

Transformierte von (4.20) angegeben werden:

$$\begin{aligned}\tilde{h}(t) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left[ \eta F(\omega) e^{\eta\omega} + h(\omega) e^{\eta\omega} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \omega} \left( e^{-i\omega t} e^{\eta\omega} \right) F(\omega) \\ &= (it - \eta) e^{+i\frac{\mu}{\hbar}} \tilde{F}(t) .\end{aligned}\tag{4.21}$$

In der ersten Zeile verschwindet der erste Term für  $\eta \rightarrow 0$  und der zweite Term kann partiell integriert werden. Mit der Dirac-Identität erhält man daraus

$$F(t) = \frac{h(t)}{it} e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\delta(t)\tag{4.22}$$

Setzt man (4.22) und für die retardierte GF (3.11) in (4.19) ein, so berechnen sich die Besetzungen im  $\mathbf{k}$ -Raum zu

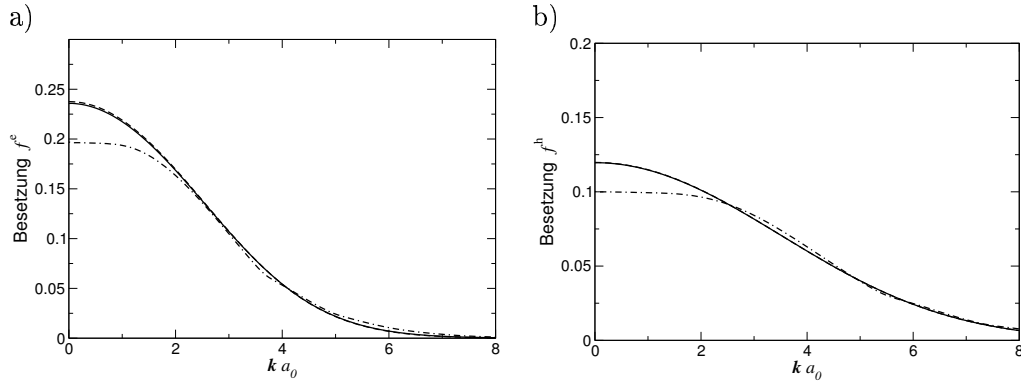
$$f_{\mathbf{k}} = \int_0^{\infty} dt \frac{h(t)}{t} 2 \operatorname{Im} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(t) \right] + \frac{1}{2}\tag{4.23}$$

Wegen der Anfangsbedingung  $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(0) = 1$  (vgl. Abschn. 3.2) ist die Singularität bei  $t = 0$  hebbar. Mit der Regel von l'Hospital erhält man für  $t = 0$  den Integranden  $-\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{\pi\hbar}$ . Betrachtet man die Spektralfunktion für freie Teilchen ( $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(t) = 1$ ), so rekonstruiert sich die Fermi-Verteilung

$$f_{\mathbf{k}} = F\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}\right)\tag{4.24}$$

im  $\mathbf{k}$ -Raum. Numerisch ist diese Form des Fluktuations-Dissipations-Theorems vorteilhaft, da durch den schnellen Abfall der Funktion  $h(t)$  das Zeitintegral bei ca. 0.5 ps abgeschnitten werden kann.

Die Ergebnisse sind in Abb. 4.3 dargestellt, wobei in der Berechnung (4.23) die retardierte Green'sche Funktion aus Kap. 3 verwendet wurde. Mit eingetragen ist die stationäre Verteilung die aus einer kinetischen Rechnung durch Relaxation einer Nichtgleichgewichtsverteilung ergibt und eine entsprechende Fermi-Dirac-Verteilung. Alle Verteilungen entsprechen einer Ladungsträger-Dichte von  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Die Gleichgewichtsverteilung aus dem Fluktuations-Dissipations-Theorem stimmt sehr gut mit einer Fermi-Dirac-Verteilung überein. Aus der kinetischen Rechnung ergibt sich ein Aufheizen der Ladungsträger, was insbesondere für kleine  $\mathbf{k}$  zu einer niedrigeren Besetzungswahrscheinlichkeit gegenüber der Fermi-Dirac-Verteilung führt. Die quantenkinetische Rechnung liefert also als stationäre Lösung keinen strikten Gleichgewichtszustand, sondern eine kleine Abweichung davon. Dieses Ergebnis berührt dabei die fundamentale Frage nach den Bedingungen, unter denen ein stationärer Zustand gerade



**Abb. 4.3:** Besetzungswahrscheinlichkeit in der Benetzungsschicht für Elektronen (a) und Löcher (b) im thermischen Gleichgewicht bei einer Ladungsträger-Dichte von  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  und einer Temperatur von 300 K. Dargestellt ist jeweils eine Fermi-Verteilung (gestrichelte Linie), die Verteilung nach dem Fluktuations-Dissipations-Theorem (durchgezogene Linie) und die stationäre Verteilung aus einer kinetischen Rechnung (gestrichelte Linie mit Punkten).

einem Gleichgewichtszustand entspricht. Da das betrachtete System an ein Phonon-Bad bei endlichen Temperaturen gekoppelt ist, kann im Allgemeinen kein stationärer Zustand im thermodynamischen Gleichgewicht erwartet werden.

### 4.4. Kinetik in Quantenpunkten

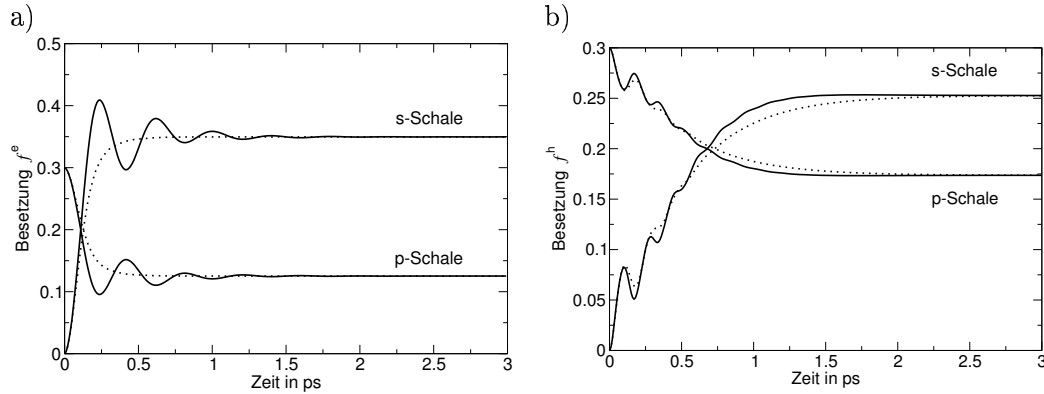
In diesem Abschnitt wird die Kinetik von Ladungsträgern in Quantenpunkten untersucht. Interessant ist dabei die Streuung zwischen Energie-Niveaus, deren Abstand wie im Fall der Elektronen des betrachteten Modellsystems nicht der Phonon-Energie entspricht (Abschn. 2.1). Die Energieerhaltung der Streuprozesse wird in quantenkinetischen Rechnungen durch die Spektralfunktion beschrieben (Abschn. 4.2). Aufgrund von Verbreiterungen der Resonanzen in der Spektralfunktion sind dabei auch Streukanäle zwischen Zuständen zu erwarten, deren Abstand nicht der Phonon-Energie entspricht.

#### Relaxation der Ladungsträger in Quantenpunkten

In den Quantenpunkten des betrachteten Modells (Abb. 2.1) die Relaxation von Elektronen durch Emission von Phononen ist aufgrund des Abstandes von s- und p-Schale ( $\Delta E = 1,1 \hbar\omega_{LO}$ ) für energieerhaltende Streuprozesse verboten. Die Ergebnisse einer quantenkinetischen Rechnung für die Materialparameter aus Anh. B.2 und eine Temperatur von  $T = 300$  K sind in Abb. 4.4 für Elektronen und Löcher dargestellt. In der zweifach entarteten p-Schale wurde dabei zur Startzeit  $t_0$  eine Besetzungswahrscheinlichkeit von  $f_{p\pm}(t_0) = 0,3$  angenommen und die Relaxation in die leere s-Schale  $f_s(t_0) = 0$  betrachtet. Verglichen wird dabei eine Rechnung in Markov-Näherung mit einer vollständigen quantenkinetischen Rechnung. Die Rechnung in Markov-Näherung vernachlässigt dabei nur Gedächtnis-Effekte der Besetzungen. In der Energieerhaltung bleibt durch Verwendung der in Kap. 3.2 berechneten Spektralfunktion die vollständige spektrale Information erhalten.

Bei Elektronen findet der Anstieg der Besetzungswahrscheinlichkeit für die s-Schale innerhalb einer Pikosekunde statt. Die Löcher zeigen einen etwas langsameren Anstieg der Besetzungswahrscheinlichkeit, da es dort nicht den nahezu vollständigen Überlapp der Spektralfunktionen an den Seitenbanden gibt. Für Elektronen und Löcher stellt sich nach ca. 1,5 ps eine stationäre Besetzungswahrscheinlichkeit ein. Diese stimmt in guter Näherung mit derjenigen einer thermischen Gleichgewichtsverteilung überein, wie sie die Fermi-Dirac-Verteilung für das Subsystem der Quantenpunkte beschreibt. Beachtet man, dass die p-Schale zweifach entartet ist, so erkennt man auch die Teilchenzahl-Erhaltung.

Der Anstieg der Besetzungswahrscheinlichkeit ist bei Elektronen und Löchern für Zeiten unter einer Pikosekunde von Oszillationen überlagert. Diese können gerade als Schwebungen zwischen Resonanzen in der Spektralfunktion identifiziert werden. Für Elektronen (Löcher) findet man eine Oszillationsperiode von ca. 515 fs (165 fs), was in der Spektralfunktion einem Abstand von ca.  $0,22 \hbar\omega_{LO}$  ( $0,7 \hbar\omega_{LO}$ ) ent-



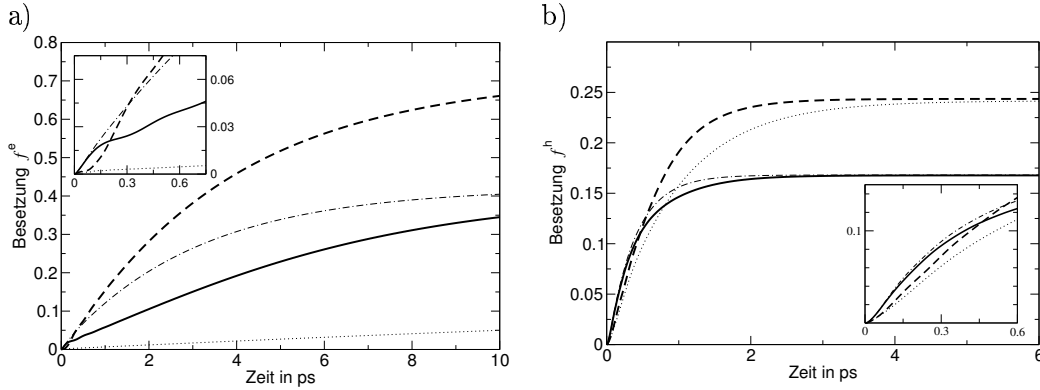
**Abb. 4.4:** Ladungsträger-Relaxation (s-Schale  $\rightarrow$  p-Schale) in Quantenpunkten für Elektronen (a) und Löcher (b). Jeweils Nicht-Markov'sche Rechnung (durchgezogene Linie) und Rechnung in Markov-Näherung mit vollständiger Spektralfunktion aus Kap. 3 (gepunktete Linie).

spricht. In der Spektralfunktion Abb. 3.11 findet man diese Abstände gerade zwischen den Haupt-Resonanzen der Quantenpunkt-Niveaus und den nächsten Seitenbanden-Resonanzen. Bei Elektronen (Abb. 3.11 (a)) ist dies für beide Quantenpunkt-Niveaus gerade die Aufspaltung der Hauptresonanz. Analog findet man diese Abstände bei Löchern (Abb. 3.11 (b)) für die p-Schale oberhalb der Hauptresonanz und für die s-Schale unterhalb. Damit erhält man eine Interpretation als Rabi-Oszillation zwischen den entsprechenden Resonanzen in der Spektralfunktion [17, 18]. Dies wird deutlich, wenn man die zwei beteiligten Resonanzen der Spektralfunktion als diskrete Energie-Niveaus betrachtet. Das monochromatische Phonon-Bad liefert eine nicht-resonante Kopplung der Energie-Niveaus, wodurch eine Oszillation der Besetzungswahrscheinlichkeit zwischen den Energie-Niveaus entsteht [23, 40]. Eine endliche Linienbreite der Resonanzen in der Spektralfunktion liefert dabei eine Dämpfung der Rabi-Oszillationen, was zu der beobachteten Relaxation führt.

Ein Vergleich der quantenkinetischen Rechnung mit derjenigen in Markov-Näherung aber mit der vollständigen Renormierung durch die retardierte Green'sche Funktion zeigt, dass beide Rechnungen die gleiche stationäre Besetzungswahrscheinlichkeit liefern. Dabei dämpft die Markov-Näherung die Rabi-Oszillationen bei den Löchern. Für Elektronen verschwinden die Rabi-Oszillationen ganz.

### Ladungsträgereinfang der Quantenpunkte

Neben der Relaxation von Elektronen ist auch der Elektronen-Einfang von Quantenpunkten aufgrund des Abstandes von Bandkante und p-Schale ( $\Delta E = 1,1 \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) für energieerhaltende Streuprozesse verboten. Die Ergebnisse einer quantenkinetischen Rechnung für eine Temperatur von  $T = 300$  K und mit den Materialparametern aus Anh. B.2 sind in Abb. 4.5 für Elektronen und Löcher dargestellt. Dabei ist der Anstieg der Besetzungswahrscheinlichkeit jeweils für direkten Einfang und für eine Kombination von Einfang und Relaxation abgebildet. Für die Rechnungen wurde eine thermische Verteilung  $f_{\mathbf{k}}$  (Fermi-Dirac-Verteilung) der Ladungsträger in der Benetzungsschicht angenommen. Betrachtet wurde dann die Einstreuung in die zur Anfangszeit  $t_0$  unbesetzten Quantenpunkt-Niveaus  $f_s = f_{p\pm} = 0$ . Nicht berücksichtigt wurde dabei eine Entvölkerung der Zustände in der Benetzungsschicht, d.h.  $f_{\mathbf{k}}(t) = f_{\mathbf{k}}(t_0)$ .



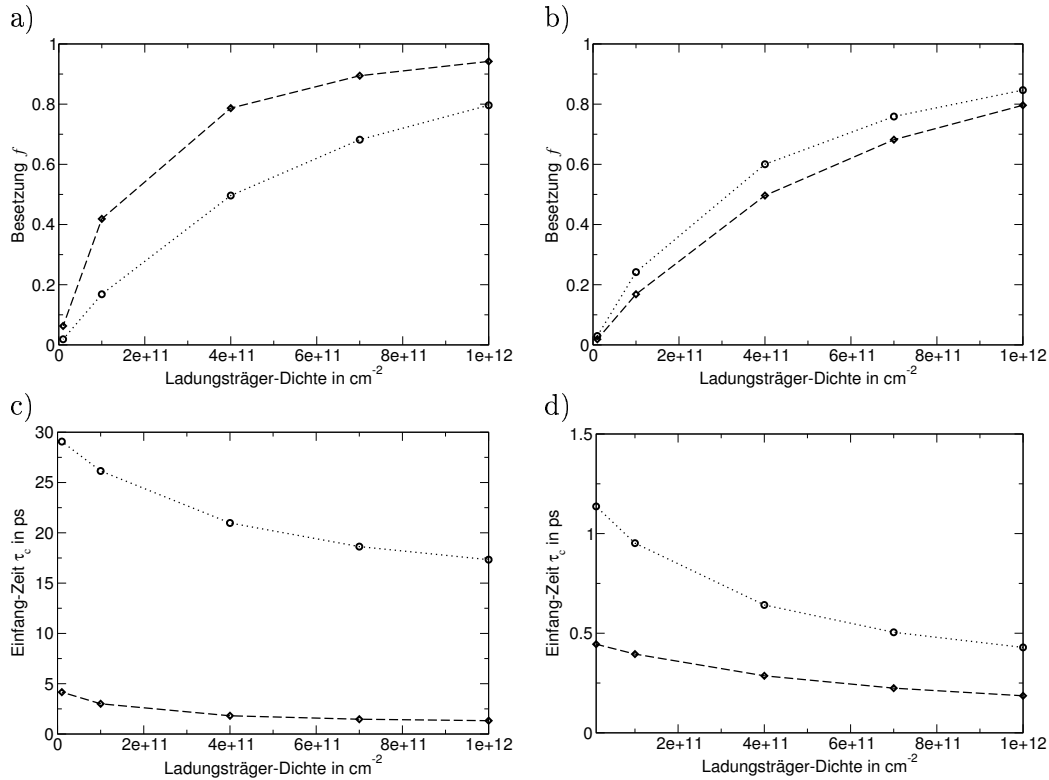
**Abb. 4.5:** Direkter Einfang von Ladungsträgern aus der Benetzungsschicht durch s-Schale (a) und p-Schale (b). Jeweils für Elektronen (durchgezogene Linie) und Löcher (gepunktete Linie) bei einer Temperatur von 300 K und einer Ladungsträger-Dichte von  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  in der Benetzungsschicht.

Bei Elektronen findet man für direkten Einfang in die p-Schale eine deutliche Zunahme der Besetzungswahrscheinlichkeit. Der direkten Einfang in die s-Schale ist nur gering, da dieser aufgrund des energetischen Abstandes zur Bandkante ( $\Delta E = -2,2 \hbar\omega_{\text{LO}}$ ) nur durch Multiphonon-Prozesse möglich ist. Betrachtet man die Kombination von Einfang und Relaxation, so findet man aufgrund der schnellen Relaxation auch in der s-Schale eine deutliche Zunahme der Besetzungswahrscheinlichkeit. Bei Löchern ist der Unterschied zwischen direktem Einfang und einer Kombination aus Einfang und Relaxation gering, da bereits der direkte Einfang durch Einphonon-Prozesse den Hauptbeitrag liefert. Den Anstieg der Besetzungswahrscheinlichkeiten  $f$  für die einzel-

nen Quantenpunkt-Niveaus in Abb. 4.5 kann man näherungsweise durch die Funktion

$$f(t) = f_0 \left( 1 - e^{-t/\tau_c} \right) \quad (4.25)$$

beschreiben. Drüber sind Einfangzeiten  $\tau_c$  und stationäre Besetzungswahrscheinlichkeiten  $f_0$  definiert. Für Ladungsträger-Dichten im Bereich von  $10^{10} \text{ cm}^{-2}$  bis  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ist dies in Abb. 4.6 für Elektronen und Löcher dargestellt. Die Funktion (4.25) wurde dafür mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate [28] an die Zeitentwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten angepasst.



**Abb. 4.6:** Stationäre Besetzungswahrscheinlichkeiten (oben) und Einfang-Zeiten (unten) für den Ladungsträger-Einfang von Quantenpunkten in Abhängigkeit von der Ladungsträger-Dichte in der Benetzungsschicht. Dargestellt ist für Elektronen (a), (c) und Löcher (b), (d) jeweils der Einfang durch die p-Schale (gestrichelte Linie) und die s-Schale (gepunktete Linie) bei einer Temperatur von 300 K.

In dem betrachteten Bereich der Ladungsträger-Dichten erhält man für den direkten Einfang von Elektronen in die p-Schale Einfangzeiten von 1,5 ps bis 4 ps. Der direkte Einfang von Elektronen in die s-Schale liefert Einfangzeiten oberhalb von 15 ps. Für

Löcher ergeben sich für den direkten Einfang in die beiden Quantenpunkt-Niveaus Eingangzeiten, die kleiner als 1 ps sind. Die Ergebnisse für die s-Schale der Elektronen sind dabei nur als Abschätzung zu verstehen. Aufgrund des langsamen Anstiegs der Besetzungswahrscheinlichkeit liefert die Extrapolation durch die Funktion (4.25) nur ungenaue Ergebnisse. Die stationären Besetzungswahrscheinlichkeiten der s-Schale für Elektronen sind offensichtlich falsch, da sie unterhalb denen der energetisch höheren p-Schale liegen. Auch die Einfangzeiten der s-Schale für Elektronen sind ungenau, liefern aber eine Abschätzung der Größenordnung.

Ein Vergleich dieser Ergebnisse mit den Einfangzeiten durch Coulomb-Streuung kann mit den Ergebnissen aus [24] durchgeführt werden. Die Einfangzeiten für Coulomb- und Elektron-Phonon-Streuung wurden dort in Markov-Näherung für das gleiche Modellsystem berechnet. Für den Einfang von Löchern durch Elektron-Phonon-Streuung stimmen die Ergebnisse der quantenkinetischen Rechnung gut mit der Lösung der Boltzmann-Gleichung überein. Dies ist auch zu erwarten, da der Einfang von Löchern in dem betrachteten Modellsystem bereits durch energieerhaltende Streuprozesse möglich ist. Für die Elektronen hingegen ist die quantenkinetische Beschreibung notwendig, da die Lösung der Boltzmann-Gleichung keinen Ladungsträger-Einfang erlaubt. Vergleicht man die Einfangzeiten der Elektron-Phonon-Streuung mit denen der Coulomb-Streuung, so findet man dass die Elektron-Phonon-Streuung in dem betrachteten Bereich der Ladungsträger-Dichte dominiert.



## 5. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde eine quantenkinetische Beschreibung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Quantenpunkt-Strukturen vorgestellt. Das betrachtete System besteht aus selbstorganisiert gewachsenen Quantenpunkten auf einer Benetzungsschicht, wobei mit dem Materialsystem InAs/GaAs eine schwache polare Kopplung betrachtet wird. Die theoretische Beschreibung erfolgte mit der Methode der Green'schen Funktionen im Nicht-Gleichgewicht.

Untersucht wurden zunächst die spektralen Eigenschaften des Systems. Für die Benetzungsschicht führte die Betrachtung der Spektralfunktion auf die Beschreibung der Ladungsträger als Polaronen. Das Polaron-Bild konnte dann von der Benetzungsschicht auf Quantenpunkte übertragen werden. Die Kopplung zweier diskreter Niveaus führte zu einer energetischen Aufspaltung der Resonanzen in deren Spektralfunktion, was auf die Bildung von Hybrid-Zuständen zurückzuführen ist. Dies zeigt, dass die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in diskreten Systemen auch für schwach polare Materialien als starke Kopplung beschrieben werden muss. In gekoppelten Systemen aus Benetzungsschicht und Quantenpunkten findet man für Ladungsträger in diskreten Energie-Niveaus eine endliche Lebensdauer aufgrund der Anwesenheit des Kontinuums von Zuständen der Benetzungsschicht. Dies führt zu verbreiterten Resonanzen in der Spektralfunktion.

Nach der Betrachtung der spektralen Eigenschaften wurde die Kinetik von Ladungsträgern in der Halbleiter-Struktur zunächst am Beispiel der Relaxation einer Nichtgleichgewichtsverteilung von Ladungsträger in der Benetzungsschicht untersucht. Anschließend wurde die Relaxation und der Ladungsträger-Einfang für Quantenpunkte studiert, deren Energie-Niveaus nicht den Abstand einer Phonon-Energie haben. Nach Fermi's Goldener Regel erwartet man in solchen Systemen keine Relaxation, was in der Literatur als *Phonon Bottleneck* diskutiert wurde. In der quantenkinetischen Rechnung konnte aber eine schnelle Relaxation, sowie ein schneller Ladungsträger-Einfang beobachtet werden. Die Erklärung dafür liefert die Energieerhaltung während der Streuprozesse. In der quantenkinetischen Beschreibung wird diese durch den Überlapp von Spektralfunktionen bestimmt und es gehen damit die spektralen Eigenschaften des Systems ein. Verbreiterungen der Resonanzen der Spektralfunktion aufgrund einer endlichen Lebensdauer der Ladungsträger in den entsprechenden Zuständen und Seitenbanden liefertn dabei die möglichen Streukanäle. Die Streuprozesse

finden daher nicht zwischen freien Teilchen, sondern zwischen Polaronen statt.

In dieser Arbeit wurde in den kinetischen Gleichungen nur die Teilchen-Streuung betrachtet. Ein nächster Schritt wäre daher die Untersuchung der Polarisationsdynamik im Rahmen der vorgestellten quantenkinetischen Beschreibung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Der Polarisationszerfall durch Streuung an Phononen ist z.B. auch für die Berechnung optischer Gewinn-Spektren<sup>1</sup> zur Simulation von Lasern interessant. Dafür muss man zusätzlich zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung noch die Licht-Materie Wechselwirkung und die Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigen. Mit diesen Erweiterungen kann dann auch die optische Anregung von Halbleiter-Quantenpunkten studiert und z.B. mit Pump-Probe Experimenten verglichen werden.

Eine aktuelle Herausforderung stellt auch die Beschreibung der Elektron-Phonon Wechselwirkung in Nitrit-Materialien wie z.B. AlGaIn dar. Diese Materialien sind für die Herstellung von Laser-Dioden die im blauen Spektralbereich emittieren von großem Interesse. Aufgrund der Kristallstruktur bilden sie allerdings Piezofelder aus, was eine neue Modellierung der Quantenpunkte erfordert.

---

<sup>1</sup>engl.: gain spectra

# Anhang



## A. Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

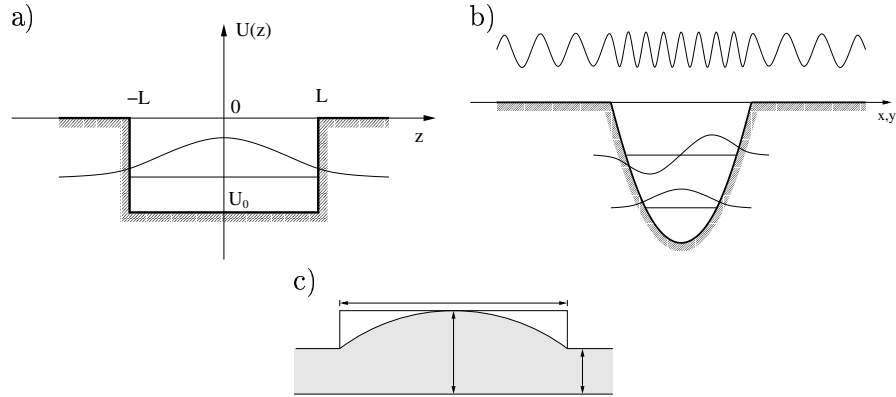
In Kap. 2 wurde die Beschreibung eines Vielteilchen-Systems durch Green'sche Funktionen vorgestellt. Diese Beschreibung ist allgemein und enthält keine expliziten Modellannahmen. Auch die Darstellung in einer Einteilchen-Basis (Abschn. 2.7) und die Wahl der Selbstenergie (Abschn. 2.8) sind nicht abhängig vom betrachteten System. Die Modellannahmen gehen nur implizit über die Matrixelemente der Wechselwirkung ein. Daher kann die Diskussion der Modellannahmen an dieser Stelle separat erfolgen.

Zu Beginn wird in diesem Anhang die Geometrie der betrachteten Halbleiter-Struktur aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht vorgestellt. Die Einteilchen-Wellenfunktionen für Ladungsträger in dieser Struktur werden dann zur Konstruktion einer orthogonalen Basis verwendet. Dem folgt eine Rekapitulation der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in polaren Kristallen (Fröhlich-Kopplung) und die Berechnung der Wechselwirkungsmatrixelemente. Bei der expliziten Berechnung der Matrixelemente kann gezeigt werden, dass die Elektron-Phonon-Wechselwirkung für die betrachtete Selbstenergie analog zur Coulomb-Wechselwirkung behandelt werden kann. Dabei benötigte Überlapp-Integrale werden abschließend in ihrer analytischen Form angegeben.

### A.1. Modellierung, Zustände und Wellenfunktionen

Die Geometrie der Quantenpunkte wird als flach, linsenförmig und zylindersymmetrisch angenommen und ist in Abb. A.1 (c) skizziert. Reale Geometrien (vgl. Abb. 1.1) werden damit in guter Näherung beschrieben und für das Einschluss-Potential können dabei vereinfachende Annahmen gemacht werden.

Nach dem Bloch-Theorem [14, 34, 6] kann die Wellenfunktion von Elektronen in einem translationssymmetrischen Kristall als Produkt aus einer einhüllenden ebenen Welle  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  und einer gitterperiodischen Bloch-Funktion  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{G})$  dargestellt werden, wobei  $\mathbf{G}$  ein Gittervektor ist. In Halbleiter-Nanostrukturen ist die Translations-Symmetrie eines Volumenkristalls in mindestens einer Dimension gebrochen. Daher nähert man in *Envelope-Function-Approximation* [14, 34] die Bloch-Funktionen durch



**Abb. A.1:** Schematische Skizze der Wellenfunktionen im modellierten Potential und der Geometrie von Quantenpunkten und Benetzungsschicht: (a) Konstantes Einschlusspotential in Wachstumsrichtung mit Grundzustand-Wellenfunktion (unterschiedliche Breite  $2L$  für Quantenpunkt und Benetzungsschicht). (b) Harmonisches Einschlusspotential in der Wachstumsebene mit Wellenfunktion für gebundene Zustände und kontinuierliche Streuzustände. (c) Fläche, linsenförmige und zylindersymmetrische Geometrie der Quantenpunkte auf einer Benetzungsschicht.

ihren Wert nahe der Bandkante ( $\mathbf{k} \approx 0$ ) und nimmt an, dass sich die Einhüllende nur langsam über einer Elementarzelle ändert. Die Translationssymmetrie des Volumenkristalls bleibt dabei für Quantenfilme in der Wachstumsebene erhalten. Für das betrachtete System aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht ist dies nicht gegeben. Bei einer schwachen Variation des Potentials in der Wachstumsrichtung kann man analog zum Quantenfilm die Einhüllende näherungsweise als Produkt aus einer Wellenfunktion  $\xi(z)$  in Wachstumsrichtung  $z$  und einer Wellenfunktion  $\varphi(\boldsymbol{\rho})$  in der dazu senkrechten Wachstumsebene  $x$ - $y$  darstellen, wobei  $\boldsymbol{\rho}$  einen Vektor in der  $x$ - $y$ -Ebene bezeichnet:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \varphi(\boldsymbol{\rho}) \xi(z) u_{\mathbf{k} \approx 0}(\mathbf{r}) . \quad (\text{A.1})$$

Die entsprechenden Wellenfunktionen für die Einhüllende sind in Abb. A.1 skizziert.

Als Vereinfachung wird das Einschluss-Potential in  $z$ -Richtung über den Quantenpunkten als konstant angenommen (Abb. A.1 (c)). Aufgrund der unterschiedlichen Höhe von Quantenpunkten und Benetzungsschicht erhält man damit zwei 1D Potentialtöpfe unterschiedlicher Breite  $2L$  aber gleicher Potentialtiefe  $U_0$ . Die Berechnung der Wellenfunktion  $\xi(z)$  ist ein Standardproblem der Quantenmechanik und soll hier nur kurz, [8] folgend, rekapituliert werden. Für den gebundenen Grundzustand ( $0 < E < U_0$ , gerade Parität) erhält man eine transzendente Bestimmungsgleichung

$$\kappa \tan(\kappa L) - \kappa' = 0 \quad (\text{A.2})$$

für die Parameter  $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$  und  $\kappa' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$ . Durch diese Parameter ist die Wellenfunktion

$$\xi^{\text{fin}}(z) = \sqrt{\frac{\kappa'}{1 + \kappa' L}} \begin{cases} \cos(\kappa L) e^{\kappa'(z+L)} & \text{für } -L > z \\ \cos(\kappa z) & \text{für } -L < z < +L \\ \cos(\kappa L) e^{-\kappa'(z+L)} & \text{für } z > +L \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

vollständig bestimmt. Im Allgemeinen entstehen mehrere Subbänder, die aber für dünne Quantenfilme energetisch weit auseinander liegen. Für den betrachteten Energiebereich der Phonon-Energie ( $\hbar\omega_{\text{LO}} = 36$  meV) genügt es daher sich auf den Grundzustand zu beschränken.

Das Einschluss-Potential in der Wachstumsebene über den Quantenpunkten kann in guter Näherung als harmonisch angenommen werden. Baer [1] hat in seiner Diplomarbeit gebundene Zustände in zylindersymmetrischen und elliptischen Quantenpunkt-Geometrien untersucht. Durch Lösung der Schrödingergleichung hat er Wellenfunktionen und Energieeigenwerte zum exakten Potential berechnet und mit den Ergebnissen eines harmonischen (2D) Einschlusspotentials in der Wachstumsebene verglichen. Es konnte eine sehr gute Übereinstimmung gezeigt werden. Für die Wellenfunktionen  $\varphi(\boldsymbol{\varrho})$  werden daher die von 2D harmonischen Oszillatoren angenommen, welche aus der Standardliteratur [5] bekannt sind. Für die untersten zwei gebundenen Zustände erhält man:

$$\varphi_{m=0}(\boldsymbol{\varrho} - \mathbf{R}) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\beta^2 |\boldsymbol{\varrho} - \mathbf{R}|^2}{2}}, \quad (\text{A.4a})$$

$$\varphi_{m=\pm 1}(\boldsymbol{\varrho} - \mathbf{R}) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\beta^2 |\boldsymbol{\varrho} - \mathbf{R}|^2}{2}} \cdot \beta |\boldsymbol{\varrho} - \mathbf{R}| e^{\pm i\phi}, \quad (\text{A.4b})$$

wobei  $\mathbf{R}$  die Position des Quantenpunktes auf der Benetzungsschicht und der Phasenfaktor  $e^{\pm i\phi}$  die Winkelabhängigkeit in der Wachstumsebene beschreibt. Der Hamilton-Operator des 2D harmonischen Oszillators hat die Energie-Eigenwerte

$$E_{x,y} = (n_x + n_y + 1) \hbar^2 \beta^2 / \mu \quad (\text{A.5})$$

mit den Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}$  und der Masse  $\mu$ . Der Parameter  $\beta$  bestimmt dabei den Abstand der Energie-Niveaus und hat die Dimension einer inversen Länge. Wegen der Drehimpuls-Eigenschaften bezeichnet man, in Analogie zur Atomphysik, den Grundzustand  $m = 0$  als *s*-Schale und den ersten angeregten Zustand  $m = \pm 1$  als *p*-Schale.

In der Benetzungsschicht sind die Wellenfunktionen  $\varphi(\boldsymbol{\varrho})$  durch ausgedehnte Streuzustände in der Wachstumsebene gegeben. Weit ab von Quantenpunkten liegt ein räumlich homogenes System vor und die Wellenfunktionen  $\varphi(\boldsymbol{\varrho})$  sind daher ebene Wellen:

$$\varphi_{\mathbf{k}}^0(\boldsymbol{\varrho}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\varrho}}. \quad (\text{A.6})$$

In der Nähe der Quantenpunkte gilt dies nicht mehr. Weiterhin stellen Quantenpunkt-Zustände und ebene Wellen keine orthogonale Basis dar, welche aber mit der OPW<sup>1</sup>-Methode konstruiert werden kann [24, 6]. Dabei werden die ebenen Wellen (A.6) durch Subtraktion des Überlapps mit den Quantenpunkt-Wellenfunktion auf diese orthogonalisiert:

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \left[ |\varphi_{\mathbf{k}}^0\rangle - \sum_{\nu} |\varphi_{\nu}\rangle \langle \varphi_{\nu} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle \right]. \quad (\text{A.7})$$

Der Index  $\nu \in \{\mathbf{R}, m\}$  umfasst hierbei Quantenpunkt-Position  $\mathbf{R}$  und Drehimpuls-Quantenzahl  $m$ . Zur Bestimmung der Normierungskonstante  $N_{\mathbf{k}}$  berechnet man das Skalarprodukt

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left[ \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle - \sum_{\nu} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_{\nu} \rangle \langle \varphi_{\nu} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \right] \quad (\text{A.8})$$

Unpraktisch ist dabei die Summation über alle Quantenpunkt-Positionen  $\mathbf{R}$ . Wie in der Einleitung gezeigt, kann die Verteilung der Quantenpunkte auf der Benetzungsschicht als zufällig und homogen angenommen werden. Dies bedeutet, dass es im Grenzfall einer unendlich ausgedehnten Benetzungsschicht ( $A \rightarrow \infty$  mit  $N \rightarrow \infty$ ) eine konstante Quantenpunkt-Dichte  $n_{\text{QD}} = \frac{N}{A}$  gibt. Dabei ist  $A$  die Fläche der Benetzungsschicht und  $N$  die Anzahl der Quantenpunkte. Damit kann dann im Folgenden über Quantenpunkt-Positionen gemittelt werden. In den Skalarprodukten der Form  $\langle \varphi_{\nu} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle$  sind Quantenpunkt-Positionen  $\mathbf{R}$  nach einer Transformation  $\boldsymbol{\varrho} \rightarrow \boldsymbol{\varrho} + \mathbf{R}$  nur in einem Phasenfaktor enthalten:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\nu} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle &= \int d^2 \boldsymbol{\varrho} \varphi_m(\boldsymbol{\varrho} - \mathbf{R}) \varphi_{\mathbf{k}}^0(\boldsymbol{\varrho}) \\ &= \int d^2 \boldsymbol{\varrho} \varphi_m(\boldsymbol{\varrho}) \varphi_{\mathbf{k}}^0(\boldsymbol{\varrho} + \mathbf{R}) \\ &= \langle \varphi_m | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Aus (A.8) ergibt sich damit

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left[ \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - \sum_{\mathbf{R}, m} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}} \right]. \quad (\text{A.10})$$

Die Summe über alle Quantenpunkt-Positionen  $\mathbf{R}$  kann damit ausgeführt werden und es verschwinden im Mittel alle Beiträge für  $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ :

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}} = N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} . \quad (\text{A.11})$$

---

<sup>1</sup>engl.: orthogonalized plane waves



Damit ergibt sich gemittelt über alle Quantenpunkt-Positionen  $\mathbf{R}$  aus (A.10) und (A.11) die Normierungskonstante

$$N_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - N \sum_m |\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_m \rangle|^2} . \quad (\text{A.12})$$

Wegen  $|\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_m \rangle|^2 \propto \frac{1}{A}$  enthält auch die Normierungskonstante nur die Quantenpunkt-Dichte  $n_{\text{QD}}$ .

## A.2. Matricelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung versteht man als Bewegung der Elektronen in einem zeitlich veränderlichen Potential, welches durch Auslenkungen  $\mathbf{u}_j$  der Gitter-Ionen am Gitter-Platz  $j$  aus der Ruhelage  $\mathbf{R}_j^0$  entsteht. Für kleine Auslenkungen liefert eine Taylor-Entwicklung des Coulomb-Potentials für die Beiträge aller  $N$  Ionen des Kristalls:

$$v(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0 - \mathbf{u}_j) = \sum_{j=1}^N [v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) - \nabla v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j + \dots] . \quad (\text{A.13})$$

Der erste Term der Entwicklung beschreibt das statische Potential der Gitter-Ionen in Ruhelage und wird üblicherweise im Hamilton-Operator des Elektronensystems berücksichtigt. Bei Ladungsneutralität des Kristalls wird dieser Term im Rahmen eines Jellium-Modells durch die Ladungsverteilung der Elektronen kompensiert [6, 14]. Der zweite Term liefert das gesuchte Potential und der entsprechende Hamilton-Operator lautet in 2. Quantisierung:

$$\hat{H}_{\text{e-ph}} = \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[ \sum_{j=1}^N \nabla v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) . \quad (\text{A.14})$$

Nun entwickelt man das Wechselwirkungspotential in eine Fourier-Reihe, die Auslenkung in Normalmoden und die Feldoperatoren nach Eigenfunktionen [6]:

$$\hat{\Psi}^{(\dagger)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}^{(*)}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\alpha}^{(\dagger)} \quad (\text{A.15a})$$

$$\nabla v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) = \sum_{\mathbf{\kappa}} i\mathbf{\kappa} v_{\mathbf{\kappa}} e^{i\mathbf{\kappa}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0)} \quad (\text{A.15b})$$

$$\mathbf{u}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\zeta, \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q},\zeta}}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j^0} \left( \hat{b}_{\mathbf{q},\zeta} + \hat{b}_{-\mathbf{q},\zeta}^\dagger \right) . \quad (\text{A.15c})$$

Dabei bezeichnet  $N$  die Anzahl der Ionen des Kristalls,  $\zeta$  einen Zweig der Phonon-Dispersion und  $v_{\kappa}$  das fouriertransformierte Coulomb-Potential. Aufgrund des Skalarproduktes  $\mathbf{q}\mathbf{e}_q$  (nach Ausführen der  $j$ -Summe) tragen nur longitudinale Phononen bei. Die Beiträge akustischer Phononen verschwinden für  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  und es verbleiben nur longitudinal-optische (LO) Phononen. Beschränkt man sich auf einen Zweig der Phonon-Dispersion, so liefert dies dann den Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{\text{e-ph}} = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) \left( \hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\beta} \quad (\text{A.16})$$

mit den Wechselwirkungsmatrixelementen

$$M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) = -i \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}}}} v_{\mathbf{q}} \int d^3r \Phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Phi_{\beta}(\mathbf{r}) . \quad (\text{A.17})$$

Für  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  ist die Dispersion von LO-Phononen näherungsweise konstant. Man kann daher vereinfachend dispersionslose Phononen  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\text{LO}}$  annehmen. Für einen polaren Kristall mit zwei Ionen pro Elementarzelle erhält man aus (A.17) die Matrixelemente der Fröhlich-Kopplung [6, 34]:

$$M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{M_{\text{LO}}}{|\mathbf{q}|} \langle \Phi_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \Phi_{\beta} \rangle . \quad (\text{A.18})$$

Dabei ist die Kopplungsstärke im Vorfaktor

$$M_{\text{LO}}^2 = 4\pi\alpha \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} (\hbar\omega_{\text{LO}})^{3/2} \quad (\text{A.19})$$

durch den dimensionslosen Kopplungs-Parameter

$$\alpha = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar\omega_{\text{LO}}} \sqrt{\frac{2\mu\omega_{\text{LO}}}{\hbar}} \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (\text{A.20})$$

gegeben. Weiterhin wird durch Einführung der reduzierten Masse  $\mu$  über

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (\text{A.21})$$

eine effektive Kopplung angenommen, die für Elektronen und Löcher gleich ist.

### A.2.1. Analogie zur Coulomb-Wechselwirkung

Das polaronische RPA-Selbstenergie-Diagramm (Abb. 2.4 (a)) entspricht formal gerade dem abgeschirmten Austausch-Diagramm der Coulomb-Wechselwirkung. Die

Elektron-Phonon Wechselwirkungslinie (2.87) besteht dabei aus zwei Vertizes, verbunden durch einen Propagator freier Phononen. Da die Phononen als dispersionlos angenommen werden (Abschn. 2.8), liefert der Phonon-Propagator nur einen zeitabhängigen Vorfaktor. Es genügt daher sich in der folgenden Betrachtung auf Produkt der beiden Vertizes

$$M_{1,2,3,4} = \sum_{\mathbf{q}} M_{1,2}(\mathbf{q}) M_{3,4}(-\mathbf{q}) \propto V_{3,1,2,4} \quad (\text{A.22})$$

zu beschränken, welches formal eine Coulomb-Wechselwirkung darstellt. Einsetzen von (A.18) macht dies unmittelbar deutlich:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} M_{1,2}(\mathbf{q}) M_{3,4}(-\mathbf{q}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{M_{\text{LO}}^2}{q^2} \\ &\times \int d^3\mathbf{r} \Phi_1^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Phi_2(\mathbf{r}) \int d^3\mathbf{r}' \Phi_3^*(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \Phi_4(\mathbf{r}') . \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Betrachtet man die Wellenfunktionen in *Envelope-Function-Approximation* (A.1), so kann man die Integrationen über das Kristall-Volumen aufspalten in eine Integration über das Volumen einer Elementarzelle (EZ) und eine Summe über die Positionen  $\mathbf{R}_j$  aller Elementarzellen. Ändern sich sowohl Einhüllende als auch die Coulomb-artige Wechselwirkung nur schwach über einer Elementarzelle, so kann bei diesen die Ortsabhängigkeit innerhalb der Elementarzelle vernachlässigt werden. Das Integral über die Elementarzellen liefert dann wegen der Orthogonalität der Bloch-Funktionen [14, 34, 6] nur Intraband-Beiträge und die Summe über die Positionen aller Elementarzellen nähert man im Kontinuums-limes durch ein Integral. Für die Überlapp-Integrale aus (A.23) gilt daher:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} \Phi_1^*(\mathbf{r}) e^{\pm i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Phi_2(\mathbf{r}) &= \sum_j \int_{EZ} d^3r \Phi_1^*(\mathbf{R}_j + \mathbf{r}) e^{\pm i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j + \mathbf{r})} \Phi_2(\mathbf{R}_j + \mathbf{r}) \\ &\approx \sum_j \Phi_1^*(\mathbf{R}_j) e^{\pm i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j)} \Phi_2(\mathbf{R}_j) \int_{EZ} d^3r u_{\lambda_1}^*(0, \mathbf{r}) u_{\lambda_2}(0, \mathbf{r}) \\ &\approx \int d^3R \Phi_1^*(\mathbf{R}) e^{\pm i\mathbf{q}(\mathbf{R})} \Phi_2(\mathbf{R}) \delta(\lambda_1, \lambda_2) . \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

In (A.23) spaltet man dann die  $\mathbf{q}$ -Summe auf in ein Produkt aus einer Integration in Wachstumsrichtung  $q_z$  und einer Integration über die Wachstumsebene  $\mathbf{q}_{\parallel}$ . Mit der Faktorisierung der Einhüllenden (A.1) erhält man dann mit (A.24) aus (A.23):

$$\sum_{\mathbf{q}} M_{1,2}(\mathbf{q}) M_{3,4}(-\mathbf{q}) = \frac{1}{A} \int d^2 q_{\parallel} \frac{M_{\text{LO}}^2}{2|\mathbf{q}_{\parallel}|} F_{1,2,3,4}^{\text{QW}}(\mathbf{q}_{\parallel}) \times \int d^2 \boldsymbol{\varrho} \varphi_1^*(\boldsymbol{\varrho}) e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\varrho}} \varphi_2(\boldsymbol{\varrho}) \int d^2 \boldsymbol{\varrho}' \varphi_3^*(\boldsymbol{\varrho}') e^{-i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\varrho}'} \varphi_4(\boldsymbol{\varrho}') . \quad (\text{A.25})$$

Dabei ist die Abhängigkeit von der Wachstumsrichtung  $z$  in einem Formfaktor

$$F_{1,2,3,4}^{\text{QW}}(|\mathbf{q}_{\parallel}|) = \int dz \int dz' \xi_1^*(z) \xi_3^*(z') e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \xi_4(z') \xi_2(z) \quad (\text{A.26})$$

zusammengefasst, wobei die  $q_z$ -Integration mithilfe der Relation

$$\frac{1}{2\pi q_{\parallel}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_z \frac{q_{\parallel}}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} e^{\pm i q_z (z-z')} = \frac{1}{2q_{\parallel}} e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \quad (\text{A.27})$$

ausgeführt wurde. Zur Vereinfachung der Notation kann man den Index  $\parallel$  fallenlassen, wenn man alle Impuls-Vektoren  $\mathbf{q}$  als 2D Vektoren in der Wachstumsebene auffasst.

### Formfaktor

Die Berechnung der Formfaktoren (A.26) erfolgt numerisch mit den entsprechenden Wellenfunktionen (A.3). Die Parameter  $\kappa$  und  $\kappa'$  der Wellenfunktionen werden dabei numerisch durch Nullstellen-Bestimmung aus (A.2) ermittelt. Für den Fall eines Potentialtopfes mit unendlich hohem Potential kann der Formfaktor analytisch angegeben werden. Die Wellenfunktion des ersten Subbandes (Grundzustand) lautet [25]:

$$\xi^{\text{inf}}(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} z\right) . \quad (\text{A.28})$$

Bei vier gleichen Indizes erhält man dann den Formfaktor

$$F^{\text{QW}}(\mathbf{q}) = \frac{2}{qL} + \frac{qL}{(qL)^2 + 4\pi^2} + 2(e^{-qL} - 1) \left( \frac{1}{qL} - \frac{qL}{(qL)^2 + 4\pi^2} \right)^2 . \quad (\text{A.29})$$

### A.2.2. OPW-Überlapp-Integrale

Die Überlappintegrale in (A.25) müssen noch mit den OPW-Wellenfunktionen (A.7) und den Quantenpunkt-Wellenfunktionen (A.4) ausgewertet werden. Dies ist analytisch möglich. Für zwei Zustände  $|\alpha\rangle$  und  $|\beta\rangle$  gibt es zunächst vier mögliche Überlapp-Integrale. Man kann sich jedoch auf ein Überlapp-Integral beschränken, da sich daraus

durch komplexes Konjugieren

$$\langle \varphi_\alpha | e^{\pm i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_\beta \rangle^* = \langle \varphi_\beta | e^{\mp i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_\alpha \rangle \quad (\text{A.30})$$

und/oder Transformation von  $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$  alle anderen Überlapp-Integrale ergeben.

Vor der Bestimmung der eigentlichen Überlapp-Integrale erfolgt zunächst die Bestimmung von Skalarprodukten und Überlapp-Integralen mit ebenen Wellen (PW<sup>2</sup>), da diese später benötigt werden. Skalarprodukte von zwei Quantenpunkt-Zuständen oder zwei ebenen Wellen verschwinden wegen deren Orthogonalität. Die Skalarprodukte zwischen Quantenpunkt-Zuständen und ebenen Wellen verschwinden nicht und lauten:

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_m \rangle e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \quad (\text{A.31a})$$

mit

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_0 \rangle = \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}} \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2\beta^2}}, \quad (\text{A.31b})$$

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_{\pm 1} \rangle = \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_0 \rangle \frac{-i|\mathbf{k}|}{\beta} e^{\pm i \phi_{\mathbf{k}}}. \quad (\text{A.31c})$$

Für die Überlapp-Integrale mit ebenen Wellen erhält man:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_\nu | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle &= \langle \varphi_m | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}} \\ &= \langle \varphi_m | \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \rangle e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}} \end{aligned} \quad (\text{A.32a})$$

mit

$$\langle \varphi_0 | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle = \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}} \frac{1}{\beta} e^{-\frac{(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}{2\beta^2}}, \quad (\text{A.32b})$$

$$\langle \varphi_{\pm 1} | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle = \langle \varphi_0 | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle i \frac{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|}{\beta} e^{\mp i \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \quad (\text{A.32c})$$

und

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}). \quad (\text{A.32d})$$

---

<sup>2</sup>engl.: plane wave

### QD-QD

Für die Überlapp-Integrale zwischen zwei Quantenpunkt-Zuständen erhält man:

$$\langle \varphi_\nu | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\nu'} \rangle = \langle \varphi_m | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{m'} \rangle e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \quad (\text{A.33a})$$

mit

$$\langle \varphi_0 | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_0 \rangle = e^{\frac{-q^2}{4\beta^2}}, \quad (\text{A.33b})$$

$$\langle \varphi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\pm 1} \rangle = \left[ 1 - \frac{q^2}{4\beta^2} \right] e^{\frac{-q^2}{4\beta^2}}, \quad (\text{A.33c})$$

$$\langle \varphi_0 | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\pm 1} \rangle = i \frac{q}{2\beta} e^{i\phi_q} e^{\frac{-q^2}{4\beta^2}}, \quad (\text{A.33d})$$

$$\langle \varphi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mp 1} \rangle = \frac{-q^2}{4\beta^2} e^{\mp 2i\phi_q} e^{\frac{-q^2}{4\beta^2}}. \quad (\text{A.33e})$$

### QD-WL

Die Überlapp-Integrale zwischen einem Quantenpunkt-Zustand und einem OPW-Zustand (A.7) sind:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_\nu | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle &= \langle \varphi_m | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}} \\ &= \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \left[ \langle \varphi_m | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \rangle - \sum_{m'} \langle \varphi_m | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{m'} \rangle \langle \varphi_{m'} | \varphi_{\mathbf{k}}^0 \rangle \right] e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}}. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Durch Einsetzen der Überlappintegrale (A.33) und (A.32) sowie der Skalarprodukte (A.31) erhält man

$$\langle \varphi_0 | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \frac{2\sqrt{\pi}}{\beta\sqrt{A}} \left\{ e^{-\frac{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|^2}{2\beta^2}} - e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{-\frac{k^2}{2\beta^2}} \left( 1 + \frac{kq}{\beta^2} \cos(\phi_q - \phi_k) \right) \right\}, \quad (\text{A.35a})$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle &= \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \frac{2i\sqrt{\pi}}{\beta\sqrt{A}} \left\{ \frac{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}{\beta} e^{\mp i\phi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} e^{-\frac{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|^2}{2\beta^2}} + e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{-\frac{k^2}{2\beta^2}} \right. \\ &\quad \times \left. \left[ -\frac{q}{2} e^{\mp i\phi_q} - k e^{\mp i\phi_k} + \frac{q^2}{4\beta^2} k \left( e^{\mp i\phi_k} + e^{\pm i(\phi_k - 2\phi_q)} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.35b})$$

## WL-WL

Die Überlapp-Integrale zwischen zwei OPW-Zuständen (A.7) sind:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle &= \frac{1}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left[ \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \right. \\ &\quad + \sum_{\nu, \nu'} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_{\nu} \rangle \langle \varphi_{\nu} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\nu'} \rangle \langle \varphi_{\nu'} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \\ &\quad - \sum_{\nu} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\nu} \rangle \langle \varphi_{\nu} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \\ &\quad \left. - \sum_{\nu} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_{\nu} \rangle \langle \varphi_{\nu} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \right]. \quad (\text{A.36}) \end{aligned}$$

Ausführen der Summation über die Quantenpunkt-Positionen liefert dann wegen den Phasenfaktoren:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle &= \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{k}')}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left[ 1 + \sum_{m, m'} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{m'} \rangle \langle \varphi_{m'} | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \right. \\ &\quad \left. - \sum_m |\langle \varphi_m^0 | \varphi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle|^2 - \sum_m |\langle \varphi_{\mathbf{k}}^0 | \varphi_m \rangle|^2 \right]. \quad (\text{A.37}) \end{aligned}$$

Einsetzen der Überlapp-Integrale (A.33) und (A.32) sowie der Skalarprodukte (A.31) ergibt dann:

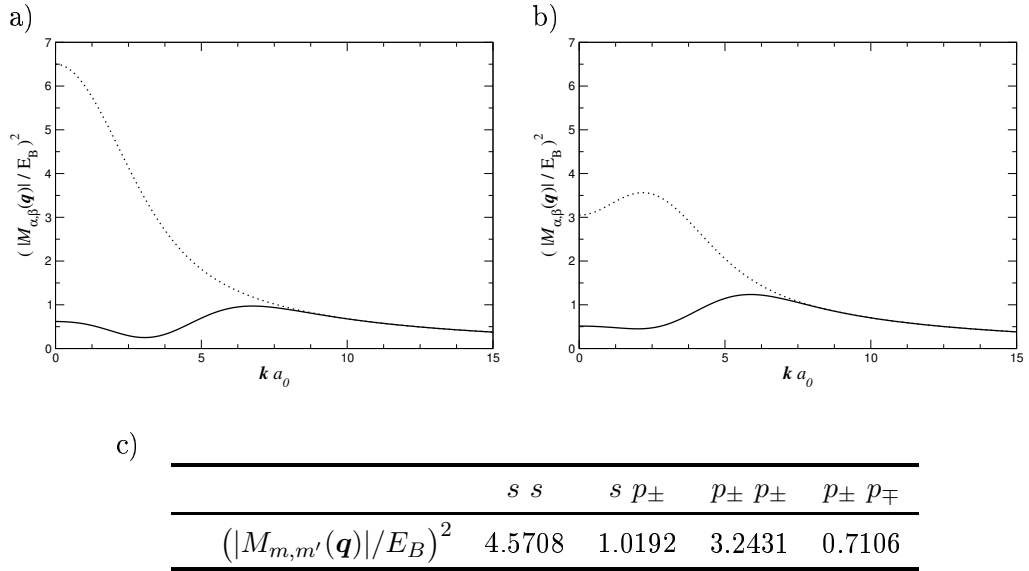
$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} | \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}) \frac{1}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left\{ 1 - n_{\text{QD}} \frac{4\pi}{\beta^2} \right. \\ &\quad \times \left[ e^{-\frac{k^2}{\beta^2}} \left( 1 + 2\frac{k^2}{\beta^2} \right) + e^{-\frac{k'^2}{\beta^2}} \left( 1 + 2\frac{k'^2}{\beta^2} \right) - e^{-\frac{k^2}{2\beta^2}} e^{-\frac{k'^2}{2\beta^2}} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} \right. \\ &\quad \times \left[ 1 + \frac{kq}{\beta^2} \cos(\phi_k - \phi_q) + \frac{k'}{\beta} \left( \frac{-q}{\beta} \cos(\phi_q - \phi_{k'}) \right) \right. \\ &\quad \left. \left. + 2\frac{k}{\beta} \left( \left( 1 - \frac{q^2}{4\beta^2} \right) \cos(\phi_k - \phi_{k'}) - \frac{q^2}{4\beta^2} \cos(\phi_k + \phi_{k'} - 2\phi_q) \right) \right] \right\}. \quad (\text{A.38}) \end{aligned}$$

### A.2.3. Numerisch berechnete Matricelemente

Betrachtet man nur die Benetzungsschicht oder nur die Quantenpunkte, so bilden die entsprechenden Wellenfunktionen jeweils eine orthogonale Basis. Für die Berechnung der Überlapp-Integrale können daher ebene Wellen als Basis zur Beschreibung der

Benetzungsschicht verwendet werden. Da die Wellenfunktionen der Quantenpunkte und ebene Wellen nicht orthogonal zueinander sind, muss bei einer Betrachtung des Gesamt-Systems aus Quantenpunkten und Benetzungsschicht eine orthogonale Basis erst konstruiert werden (Abschn. A.1). Verwendet man zur Berechnung der Überlapp-Integrale nicht die orthogonalisierten OPW-Zustände sondern ebene Wellen, so führt dies zu einer Überschätzung der Wechselwirkung [33].

In Abb. A.2 sind die berechneten Matricelemente (A.25) dargestellt. Abgebildet sind diejenigen Matricelemente, welche s- und p-Schale an die Benetzungsschicht koppeln. Zusätzlich aufgeführt sind die Matricelemente zwischen verschiedenen Quantenpunkt-Zuständen. Für kleine  $\mathbf{q}$  erkennt man dabei in Abb. A.2 (a) und (b) die Überschätzung der Wechselwirkung, wenn keine orthogonale Basis verwendet wird.



**Abb. A.2:** Matricelemente für Coulomb-artige Elektron-Phonon-Wechselwirkung zwischen Quantenpunkten und Benetzungsschicht (s-Schale (a) und p-Schale (b)), sowie zwischen den Zuständen eines Quantenpunktes (c). Dargestellt ist in (a) und (b) jeweils die Berechnung der Matricelemente mit OPW-Zuständen (durchgezogene Linie) und mit ebenen Wellen (gepunktete Linie).



## B. Numerik und Materialparameter

### B.1. Einheiten

In dieser Arbeit werden exzitonische Einheiten verwendet. Längen skalieren dabei im Bindungsradius  $a_0$  und Energien in der Bindungsenergie  $E_B$  von Exzitonen im Volumenmaterial. Diese Wahl mag angesichts der untersuchten Elektron-Phonon Wechselwirkung verwundern, ist aber in Hinblick auf geplante Rechnungen für optische Anregungen sinnvoll. Aus kinetischer Energie und Coulomb-Energie erhält man die Beziehungen:

$$\mathbf{x} = \mathbf{k} \cdot a_0 \quad (\text{B.1a})$$

$$E_B = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \quad (\text{B.1b})$$

$$\frac{e^2}{\varepsilon_0} = 8\pi a_0 E_B . \quad (\text{B.1c})$$

Für die Elektron-Phonon Wechselwirkungsmatrixelemente (A.18) erhält man daraus:

$$\frac{1}{V} \left( \frac{M_{\text{LO}}}{|\mathbf{q}|} \right)^2 = 4\pi\alpha \left( \frac{\hbar\omega_{\text{LO}}}{E_B} \right)^{3/2} \frac{1}{|\mathbf{x}|^2} E_B^2 \frac{a_0^3}{V} \quad (\text{B.2})$$

mit

$$\alpha = \sqrt{\frac{E_B}{\hbar\omega_{\text{LO}}}} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) . \quad (\text{B.3})$$

## B.2. Material-Parameter

Materialparameter			
Bandlücke	$E_G$	1, 52 eV	
Bindungsradius Exziton (3D)	$a_0$	142, 77 Å	
Bindungsenergie Exziton (3D)	$\hbar\omega_{LO}$	4, 036 meV	
Phonon-Energie	$E_B$	36 meV	
Elektron-Phonon-Kopplung	$\alpha$	0, 06	
Masse Elektronen	$m_e$	0, 067 $m_0$	
Masse Löcher	$m_h$	0, 150 $m_0$	
Statische Dielektrizitätskonst.	$\varepsilon_0$	12, 5	
Hochfrequente Dielektrizitätskonst.	$\varepsilon_\infty$	10, 9	
Lebensdauer von LO-Phononen	$\tau_{LO}$	5 ps	
Halbleiter-Struktur			
Höhe Quantenpunkt	$L_{QD}$	4, 3 nm	
Höhe Benetzungsschicht	$L_{WL}$	2, 2 nm	
Quantenpunktdichte	$n_{QD}$	$10^{10} \text{ cm}^{-2}$	
Quantenpunkte			
		Elektronen	Löcher
Energie s-Schale	$\epsilon_s$	$-2, 2 \hbar\omega_{LO}$	$-0, 8 \hbar\omega_{LO}$
Energie p-Schale	$\epsilon_p$	$-1, 1 \hbar\omega_{LO}$	$-0, 4 \hbar\omega_{LO}$
Bandversatz	$U_0$	350 meV	170 meV

**Tab. B.1:** In den Rechnungen verwendete Parameter für eine Halbleiter-Struktur aus selbst-organisiert gewachsenen InAs/GaAs Quantenpunkten auf einer Benetzungsschicht.

# Literaturverzeichnis

- [1] BAER, N.: *Optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantenpunkten*, Universität Bremen, Diplomarbeit, 2003
- [2] BINDER, R. ; KOCH, S.W.: Nonequilibrium semiconductor dynamics. In: *Prog. Quant. Electr.* **19** (1995), S. 307
- [3] BONITZ, H. ; SEMKAT, D. ; HAUG, H.: Non-Lorentzian spectral functions for Coulomb quantum kinetics. In: *Eur. Phys. J.* **9** (1999), S. 309
- [4] BÁNYAI, L. ; HAUG, H. ; GARTNER, P.: Self-consistent RPA retarded polaron Green function for quantum kinetics. In: *Eur. Phys. J B* **1** (1998), S. 209
- [5] COHEN-TANNOUDJI, C. ; DIU, B. ; LALOE, F.: *Quantum Mechanics - Volume One*. Paris : John Wiley & Sons, 1977
- [6] CZYCHOLL, Gerd: *Theoretische Festkörperphysik: Von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen*. Braunschweig : Vieweg Verlag, 2000
- [7] FERREIRA, R. ; BASTARD, G.: Carrier Capture and Intra-Dot Auger Relaxation in Quantum Dots. In: *phys. stat. sol. (a)* **178** (2000), S. 327
- [8] GALINDO, A. ; PASCUAL, P.: *Quantum Mechanics I*. Berlin : Springer-Verlag, 19??
- [9] GARTNER, P. ; BÁNYAI, L. ; HAUG, H.: Two-time electron-LO-phonon quantum kinetics and the generalized Kadanoff-Baym approximation. In: *Phys. Rev. B* **60** (1999), S. 14234
- [10] GARTNER, P. ; BÁNYAI, L. ; HAUG, H.: Self-consistent RPA for the intermediate-coupling polaron. In: *Phys. Rev. B* **66** (2002), S. 75205
- [11] HAMEAU, S. ; GULDNER, Y. ; VERZELEN, O. ; FERREIRA, R. ; BASTARD, G. ; ZEMAN, J. ; LEMAITRE, A. ; GÉRARD, J.M.: Strong Electron-Phonon Coupling Regime in Quantum Dots: Evidence for Everlasting Resonant Polarons. In: *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999), S. 4152

- [12] HAUG, H. ; BÁNYAI, L.: Improved spectral functions for quantum kinetics. In: *Solid State Comm.* **100** (1996), S. 303
- [13] HAUG, H. ; JAUHO, A.-P.: *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Berlin : Springer-Verlag, 1996
- [14] HAUG, H. ; KOCH, S.: *Quantum Theory of the optical and electronic properties of semiconductors*. Singapur : World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1990
- [15] HEITZ, R. ; VEIT, M. ; LEDENTSOV, N.N. ; HOFFMANN, A. ; BIMBERG, D. ; USTINOV, V.M. ; KOP'EV, P.S. ; ALFEROV, Zh.I.: Energy relaxation by multiphonon processes in InAs/GaAs quantum dots. In: *Phys. Rev. B* **56** (1997), S. 10435
- [16] INOSHITA, T. ; SAKAKI, H.: Electron relaxation in a quantum dot: Significance of multiphonon processes. In: *Phys. Rev. B* **46** (1992), S. 7260
- [17] INOSHITA, T. ; SAKAKI, H.: Electron-phonon interaction and the so-called phonon bottleneck effect in semiconductor quantum dots. In: *Physica B* **227** (1996), S. 373
- [18] INOSHITA, T. ; SAKAKI, H.: Density of states and phonon-induced relaxation of electrons in semiconductor quantum dots. In: *Phys. Rev. B* **56** (1997), S. R4355
- [19] JACOBI, K.: Atomic structure of InAs quantum dots on GaAs. In: *Progress in Surface Science* **71** (2003), S. 185
- [20] LIPAVSKÝ, P. ; ŠPIČKA, V. ; VELICKÝ, B.: Generalized Kadanoff-Baym ansatz for deriving quantum transport equations. In: *Phys. Rev. B* **34** (1986), S. 6933
- [21] MAGNUSDOTTIR, I. ; BISCHOFF, S. ; USKOV, A.V. ; MORK, J.: Geometry dependence of Auger carrier capture rates into cone-shaped self-assembled quantum dots. In: *Phys. Rev. B* **67** (2003), S. 205326
- [22] MAHAN, G. D.: *Many-Particle Physics*. New York : Plenum Press, 1981
- [23] MEYSTRE, P. ; SARGENT III, M.: *Elements of Quantum Optics*. Berlin : Springer-Verlag, 1990
- [24] NIELSEN, T.R. ; GARTNER, P. ; JAHNKE, F.: Many-body theory of carrier capture and relaxation in semiconductor quantum-dot lasers. In: *Phys. Rev. B* **69** (2004), S. 235314
- [25] NOLTING, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik*. Bd. 5: *Quantenmechanik Teil 1: Grundlagen*. 4. Auflage. Braunschweig : Vieweg Verlag, 1997

- [26] NOLTING, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik*. Bd. 5: *Quantenmechanik Teil 2: Methoden und Anwendungen*. 3. Auflage. Braunschweig : Vieweg Verlag, 1997
- [27] NOLTING, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik*. Bd. 7: *Viel-Teilchen-Theorie*. 5. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 2002
- [28] PRESS, William H. ; TEUKOLSKY, Saul A. ; FLANNERY, Brian P. ; VETTERLING, William T.: *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992
- [29] RICKAYZEN, G.: *Green's functions and condensed matter*. London : Academic Press Inc., 1980
- [30] RÜCKER, H. ; MOLINARI, E. ; LUGLI, P.: Microscopic calculation of the electron-phonon interaction in quantum wells. In: *Phys. Rev. B* **45** (1992), S. 6747
- [31] SAUVAGE, S. ; BOUCAUD, P. ; BRAS, F. ; FISHMAN, G. ; LOBO, R.P.S.M. ; GLOTIN, F. ; PRAZERES, R. ; ORTEGA, J.M. ; GÉRARD, F.M.: Polaron relaxation in InAs/GaAs self-assembled quantum dots. In: *phys. stat. sol. (b)* **238** (2003), S. 254
- [32] SAUVAGE, S. ; BOUCAUD, P. ; LOBO, R.P.S.M. ; BRAS, F. ; FISHMAN, G. ; PRAZERES, R. ; GLOTIN, F. ; ORTEGA, J.M. ; GÉRARD, F.M.: Long Polaron Lifetime in InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots. In: *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), S. 177402
- [33] SCHNEIDER, H.C. ; CHOW, W.W. ; KOCH, S.W.: Many-body effects in the gain spectra of highly excited quantum-dot lasers. In: *Phys. Rev. B* **64** (2001), S. 115315
- [34] SCHÄFER, W. ; WEGENER, M.: *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*. Berlin : Springer-Verlag, 2002
- [35] SEIFERT, W. u. a.: In-Situ Growth of Quantum Dot structures by the Stranski-Krastanow growth mode. In: *Prog. Crystal Growth and Charact.* **33** (1996), S. 423
- [36] STAUBER, T. ; ZIMMERMANN, R. ; CASTELLA, H.: Electron-phonon interaction in quantum dots: A solvable model. In: *Phys. Rev. B* **62** (2000), S. 7336
- [37] USKOV, A.V. ; ADLER, F. ; SCHWEIZER, H. ; PILKUHN, M.H.: Auger carrier relaxation in self-assembled quantum dots by collisions with two-dimensional carriers. In: *J. Appl. Phys.* **81** (1997), S. 7895

- [38] VERZELEN, O. ; FERREIRA, R. ; BASTARD, G.: Polaron lifetime and energy relaxation in semiconductor quantum dots. In: *Phys. Rev. B* **62** (2000), S. R4809
- [39] VERZELEN, O. ; FERREIRA, R. ; BASTARD, G. ; INOSHITA, T. ; SAKAKI, H.: Polaron Effects in Quantum Dots. In: *phys. stat. sol. (a)* **190** (2002), S. 213
- [40] VOGEL, W. ; WELSCH, D.-G. ; WALLENTOWITZ, S.: *Quantum Optics An Introduction*. Berlin : Wiley-VCH Verlag, 2001

# Danksagung

An dieser Stelle danke ich allen, die mich während der Anfertigung dieser Diplomarbeit begleitet und unterstützt haben. Insbesondere danke ich Prof. Frank Jahnke für seine sehr gute Betreuung und ständige Gesprächsbereitschaft. Weiterhin danke ich Paul Gartner und meinen Bürokollegen Michael Buck und Torben Nielsen. Sie hatten immer ein offenes Ohr für meine Fragen und standen stets für sehr anregende und erhellende Diskussionen zur Verfügung. Nicht zu vergessen sind alle weiteren Mitglieder der AG Halbleiterphysik, die zu einer angenehmen und fruchtbaren Arbeitsatmosphäre beigetragen haben.

Bei meinen langjährigen Kommilitonen Timo Aschenbrenner und Klaus Franke möchte ich mich für die gemeinsamen Studienjahre bedanken. Ich hoffe, dass noch einige im Rahmen einer Promotion hinzukommen.

Abschließend möchte ich noch meiner Freundin Jana Ollmann für den schönen privaten Ausgleich und die aufgebrachte Geduld sowie meinen Eltern und Großeltern für die nicht nur finanzielle Unterstützung während meines gesamten Studiums danken.