

Mikroskopische Beschreibung des Ladungsträgereinfangs in Halbleiter-Heterostrukturen durch Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Master-Thesis

vorgelegt am: 31. Januar 2011

im Institut für Theoretische Physik der Universität Bremen

Name:	Alexander Steinhoff
Matrikelnummer:	2145679
Fachbereich:	1
Erstgutachter:	Prof. Dr. Frank Jahnke
Zweitgutachter:	Prof. Dr. Gerd Czycholl

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Theoretische Grundlagen	7
2.1	Phononen	7
2.2	Elektronen im Festkörper	9
2.2.1	Zustandsdichte	11
2.3	Modell	12
2.3.1	Elektronische Zustände	13
2.4	Boltzmann-Gleichung	16
3	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	17
3.1	Hamiltonoperator	17
3.2	Streuprozesse und kinetische Gleichungen	20
3.3	Matrixelemente	24
3.3.1	Volumenmaterial	24
3.3.2	Quantenfilm	25
3.3.3	Volumenmaterial/Quantenfilm	28
3.4	Streuterme	30
3.4.1	Optische Phononen	30
3.4.2	Akustische Phononen	34
4	Anwendung	37
4.1	Streuung innerhalb der Teilsysteme	37
4.1.1	Wechselwirkung mit optischen Phononen	37
4.1.2	Wechselwirkung mit akustischen Phononen	41
4.2	Einfang der Elektronen aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm	45
4.2.1	Wechselwirkung mit optischen Phononen	45
4.2.2	Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen	50
5	Zusammenfassung und Ausblick	53
A	Anhang	55
A.1	Parameter	55
A.2	Numerik	55

Kapitel 1

Einleitung

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist der maßgebliche Prozess für die Relaxation von Ladungsträgern in Halbleitern. Somit ist ihre Untersuchung beispielsweise für das Verständnis der Ladungsträgerdynamik in optoelektronischen Halbleiterbauelementen wie Laserdioden von Bedeutung. Diese werden häufig mit Doppel-Heterostrukturen realisiert, in denen das optische Medium in einem Quantenfilm aus direktem Halbleitermaterial besteht, welcher in ein Halbleiter-Volumenmaterial mit größerer Bandlücke eingeschlossen ist [1]. Durch eine entsprechende Polung der Diode werden Ladungsträger in die aktive Schicht injiziert und dort konzentriert. Ein wesentlicher Vorteil einer solchen Bauweise ist, dass die Emissionswellenlänge des Lasers nicht nur vom Material, sondern auch von der Dicke des Quantenfilmes abhängt und somit in einem gewissen Rahmen maßgeschneidert werden kann [2]. In dieser Arbeit wird das für derartige Heterostrukturen typische Materialsystem Indiumgalliumarsenid/Galliumarsenid untersucht.

Die zur Erzeugung von Besetzungsinversion erforderliche Anregung einer Ladungsträgerverteilung in Leitungs- und Valenzband geschieht üblicherweise im Volumenmaterial und in einiger Entfernung vom Γ -Punkt, an dem die stimulierte Emission stattfindet. Es ist daher, etwa zur Abschätzung der für die Injektion relevanten Zeitskalen, von Interesse, die Relaxation der Ladungsträger und insbesondere ihre Einstreuung aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm zu modellieren.

In den letzten Jahren wurden darüber hinaus in zunehmendem Maße 0-dimensionale Systeme, sogenannte Quantenpunkte, als mögliche Grundlage für optoelektronische Bauelemente diskutiert [3, 4]. Aufgrund der weiteren Reduzierung der Dimensionalität erlauben derartige Quantenpunkt-basierte Bauelemente eine noch bessere Steuerbarkeit der optischen Eigenschaften als Quantenfilmlaser. Ein entsprechendes Halbleitersystem ist schematisch in Abb. 1.1 dargestellt.

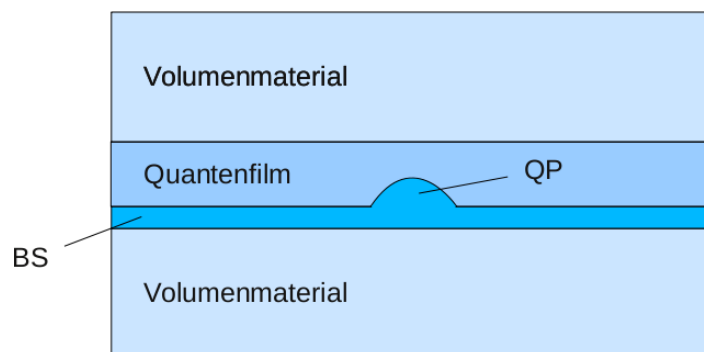


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung eines Halbleiterbauelementes mit einem Quantenpunkt (QP) als aktives Medium. Der Quantenpunkt ist auf einer Benetzungsschicht (BS) mit einer Dicke von wenigen Atomlagen gewachsen und zur Verbesserung des Ladungsträgereinfanges in einen Quantenfilm eingebettet [5]. Benetzungsschicht und Quantenfilm werden wiederum umschlossen von einem Volumenmaterial.

Zur Erzeugung einer Besetzungsinversion innerhalb des Quantenpunktes müssen zunächst Ladungs-

träger in Leitungs- und Valenzband des Volumenmaterials angeregt werden, um über den Quantenfilm in die lokalisierten Zustände des Quantenpunktes zu gelangen. Während der letzte Schritt der Kaskade bereits im Detail beschrieben wurde [6, 7], kann die in dieser Arbeit erfolgende Untersuchung der Einstreuung in den Quantenfilm dazu beitragen, das Bild zu vervollständigen.

Abgesehen von konkreten Anwendungen ist die vorliegende Beschreibung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung auch grundsätzlich von Interesse, da die hierbei auftretenden Matrixelemente aus Volumen- und Quantenfilmzuständen allgemein verwendbar sind.

Zur Beschreibung der Ladungsträgerdynamik in Heterostrukturen unter Einfluss der Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird im Folgenden die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsverteilung von Elektronen nahe des Leitungsbandminimums untersucht. Dies geschieht in einer mikroskopischen Betrachtung unter Berücksichtigung der Streuung sowohl an optischen Phononen über die polare Kopplung als auch an akustischen Phononen über die Deformationspotential-Kopplung, wobei die Phononen von einem thermischen Reservoir bereitgestellt werden.

Dazu werden zunächst im zweiten Kapitel die wesentlichen theoretischen Grundlagen eingeführt und das betrachtete Modellsystem beschrieben. Zur Gewinnung der elektronischen Zustände des Quantenfilmes in Einhüllenden-Näherung wird dieser in zwei verschiedenen Ansätzen als endlich tiefer oder unendlich tiefer Potentialtopf modelliert. Die Zustände des Volumenmaterials werden sowohl in einfachster Näherung als ebene Wellen angesetzt, als auch zur Berücksichtigung des Einflusses des Quantenfilmes auf dessen gebundene Zustände orthogonalisiert.

Im dritten Kapitel erfolgt eine Herleitung des Wechselwirkungs-Hamiltonoperators in zweiter Quantisierung, mit dem im Weiteren die Bewegungsgleichungen der Besetzungswahrscheinlichkeiten beliebiger elektronischer Zustände aufgestellt werden. Dazu werden eine Hartree-Fock-Faktorisierung sowie eine Markov-Näherung durchgeführt, sodass man kinetische Gleichungen in Form einer semiklassischen Boltzmann-Gleichung erhält. Die dabei auftretenden Matrixelemente der optischen und akustischen Elektron-Phonon-Wechselwirkung werden für die Streuung zwischen Zuständen innerhalb des Volumenmaterials und des Quantenfilmes sowie für die Einstreuung aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm aufgestellt und ausführlich diskutiert. Nach dem Einsetzen der Matrixelemente in die allgemeinen Bewegungsgleichungen werden diese so weit wie möglich für das betrachtete System ausformuliert. Im Zuge dessen wird die Auswirkung der Ebene-Welle-Näherung für die Volumenzustände untersucht.

Die numerische Lösung und Auswertung der kinetischen Bewegungsgleichungen geschieht in mehreren Schritten im vierten Kapitel; Zunächst wird die Elektronendynamik unter Streuung der Elektronen an optischen Phononen in isolierten Volumen- und Quantenfilmsystemen bei Verwendung der verschiedenen Quantenfilmmodelle miteinander verglichen. Ebenso wird die Streueffizienz akustischer Phononen in beiden Teilsystemen gegenübergestellt und die Unterschiede der Wirkungsweisen optischer und akustischer Phononen, bedingt durch ihre verschiedenartigen Dispersionen, werden aufgezeigt.

In einem weiteren Schritt werden die Teilsysteme zu einer Heterostruktur gekoppelt und die Einstreuung von Elektronen aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm unter Wechselwirkung mit optischen Phononen bei verschiedenen Temperaturen und Anregungsdichten wird untersucht. Zuletzt wird zusätzlich die Streuung an akustischen Phononen in der gesamten Heterostruktur berücksichtigt und ihre Relevanz bei der Überführung des Systems in ein thermisches Gleichgewicht demonstriert. Die Zeitskalen, auf denen die einzelnen Streuprozesse wirken, werden verglichen.

Das letzte Kapitel enthält eine Zusammenfassung aller Ergebnisse sowie einen Ausblick auf mögliche Erweiterungen dieser Arbeit.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel wird die Modellierung des betrachteten Halbleitersystems beschrieben. Des Weiteren werden kurz einige Konzepte und Näherungen vorgestellt, die im weiteren Verlauf der Arbeit Anwendung finden.

2.1 Phononen

Eine ganze Reihe der Eigenschaften von Festkörpern, wie Wärmeleitfähigkeit, Schallleitfähigkeit und spezifische Wärme, wird wesentlich durch die Dynamik der Atomkerne bestimmt, welche in der Born-Oppenheimer-Näherung als unabhängig von der Elektronendynamik betrachtet wird. Weiter kann man annehmen, dass die Atomkerne zu hinreichend kleinen Auslenkungen aus ihrer Gitterposition angeregt werden, so dass der Kristall als ein System gekoppelter harmonischer Oszillatoren beschrieben werden kann. Eine quantenmechanische Betrachtung zeigt, dass die Schwingungsmoden der Atomkerne quantisiert sind, diese quantisierten Gitterschwingungen werden als *Phononen* bezeichnet.

Einen einfachen Zugang zu den möglichen Normalmoden, also kollektiven Anregungen von Atomen, in einem Kristall mit zweiatomiger Basis bietet die klassische Behandlung einer linearen Kette von alternierend mit Abstand d angeordneten Atomen der Sorten A und B [8]. Die Atome an den Gitterpositionen $n, n+1, \dots$ besitzen die Massen m_A und m_B und seien harmonisch mit der Federkonstante C jeweils an ihre nächsten Nachbarn gekoppelt. Dies führt auf die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} m_A \frac{d^2 x_n^A}{dt^2} &= C(x_{n-1}^B + x_{n+1}^B - 2x_n^A), \\ m_B \frac{d^2 x_{n+1}^B}{dt^2} &= C(x_{n+2}^A + x_n^A - 2x_{n+1}^B), \end{aligned} \quad (2.1)$$

aus denen mit einem Ansatz ebener Wellen,

$$\begin{aligned} x_n^A(t) &= E_A e^{i(nqd - \omega t)}, \\ x_{n+1}^B(t) &= E_B e^{i((n+1)qd - \omega t)}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

die Dispersionsrelation

$$\omega_{1,2}^2(q) = C \frac{m_A + m_B}{m_A m_B} \pm \frac{C}{m_A m_B} \sqrt{m_A^2 + m_B^2 + 2m_A m_B \cos(2qd)} \quad (2.3)$$

folgt. Hierbei entspricht $\omega_1(q)$ mit dem positiven Summanden der Dispersion optischer Phononen, bei denen die Atome gegenphasig schwingen, und $\omega_2(q)$ der Dispersion akustischer Phononen, bei denen die Atome in Phase schwingen. Die Bezeichnungen rühren daher, dass optische Phononen in ionischen Kristallen an elektromagnetische Felder koppeln können, während die Gitterschwingungen akustischer Phononen Schallwellen transportieren. Das Spektrum der Phononen besteht also aus zwei Zweigen, wobei anhand von (2.3) gezeigt werden kann, dass die Frequenz des akustischen Zweiges für $q \rightarrow 0$ verschwindet, während sie für den optischen Zweig einen konstanten Wert größer 0 annimmt. Die hier

betrachteten Schwingungen sind longitudinal, die Auslenkung erfolgt also in Ausbreitungsrichtung. Im Allgemeinen existieren in einem d-dimensionalen Kristall mit zweiatomiger Basis $2d$ Dispersionszweige, von denen jeweils d Zweige zu optischen und d Zweige zu akustischen Phononen gehören. Es sind in mehr als einer Dimension auch transversale Auslenkungen möglich, also solche senkrecht zur Ausbreitungsrichtung. Abb. 2.1 zeigt beispielhaft den Verlauf der Phononendispersion in Galliumarsenid.

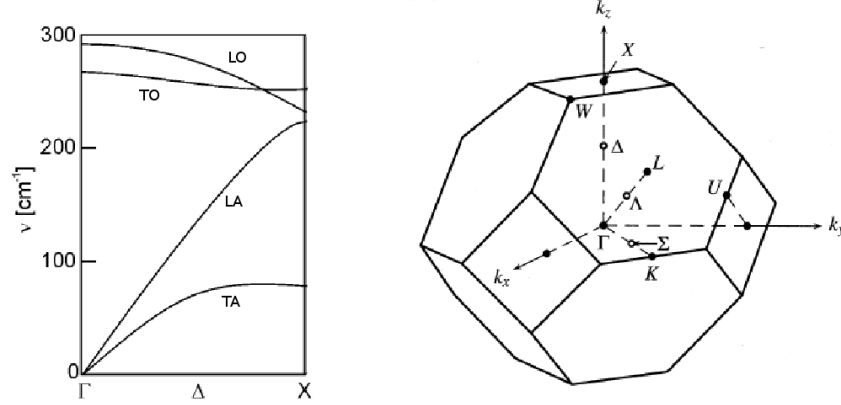


Abbildung 2.1: Dispersion der Phononen in GaAs entlang einer Symmetrieachse des reziproken Gitters sowie die zu GaAs gehörende Brillouin-Zone mit speziellen Punkten [9, 10].

In dieser Arbeit wird nur die Kopplung von Elektronen an longitudinal optische (LO-) und longitudinal akustische (LA-)Phononen berücksichtigt, zu den Kopplungsmechanismen siehe Kapitel 3.1. Zudem werden Halbleitersysteme betrachtet, in denen sich die angeregten Elektronenzustände nahe des Leitungsbandminimums befinden. Es sind dann an der Elektron-Phonon-Wechselwirkung praktisch nur Phononen großer Wellenlängen, also kleiner Wellenzahlen q , beteiligt [11]. Im Grenzfall $q \rightarrow 0$ kann die Dispersion der akustischen Phononen als linear und die Dispersion der optischen Phononen als konstant angenommen werden, vgl. auch Abb. 2.1:

$$\begin{aligned}\omega_{LA} &= c_{LA}|q|, \\ \omega_{LO} &= E_{LO}/\hbar = \text{const.}\end{aligned}\tag{2.4}$$

Letzteres wird als Einstein-Modell bezeichnet.

Auch quantenmechanisch lassen sich Gitterschwingungen als harmonische Oszillatoren beschreiben, der entsprechende Hamiltonoperator lautet [12]

$$H = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}).\tag{2.5}$$

Bei den $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ und $b_{\mathbf{q}}$ handelt es sich um bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die den Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned}[b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] &= \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \\ [b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}] &= [b_{\mathbf{q}}^{\dagger}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = 0\end{aligned}\tag{2.6}$$

genügen und Phononen der Mode \mathbf{q} erzeugen bzw. vernichten. Die Phononenmoden sind demnach quantisiert und können mit beliebig vielen Phononen besetzt werden. Im thermodynamischen Gleichgewicht stellt sich eine Bose-Verteilung der Besetzungswahrscheinlichkeiten der Phononen ein:

$$n_{\mathbf{q}}^{\text{eq}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega(\mathbf{q})} - 1}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.\tag{2.7}$$

2.2 Elektronen im Festkörper

Wie im Fall der zuvor diskutierten Phononen handelt es sich auch bei der Beschreibung von Elektronen in einem Festkörper um ein Vielteilchenproblem, in das zudem die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen eingeht. Im Rahmen der Bloch-Theorie wird dieses jedoch zu einem effektiven Einteilchen-Problem umformuliert, in dem die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch ein effektives Potential $U(\mathbf{r})$ berücksichtigt wird [13]. Die Elektronen werden dann, von relativistischen Effekten abgesehen, durch die folgende Einteilchen-Schrödinger-Gleichung in erster Quantisierung beschrieben:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Der Born-Oppenheimer-Näherung entsprechend, handelt es sich bei $U(\mathbf{r})$ um ein kristallperiodisches Potential:

$$U\left(\mathbf{r} + \sum_i n_i \mathbf{a}_i\right) = U(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

mit ganzen Zahlen n_i und den Basisvektoren \mathbf{a}_i des zugrundeliegenden Bravais-Gitters. Die Lösungen von Gl. (2.8) sind die Bloch-Funktionen

$$\Psi_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \langle \mathbf{r} | \nu, \mathbf{k} \rangle \quad (2.10)$$

mit den gitterperiodischen Bloch-Faktoren $u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Die Bloch-Zustände $|\nu, \mathbf{k}\rangle$ werden klassifiziert durch einen Bandindex ν und einen Wellenzahlvektor \mathbf{k} , ein Index für den Elektronenspin wird zur Abkürzung der Schreibweise nicht explizit angeschrieben. Im thermodynamischen Limes, in dem der Kristall als unendlich groß angenommen wird, bilden die \mathbf{k} ein Kontinuum. Sie können aus Symmetriegründen auf die erste Brillouin-Zone beschränkt werden.

Der Hamiltonoperator in Gl. (2.8) kann auch in zweiter Quantisierung aufgestellt werden. Dazu werden fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_{\nu \mathbf{k}}^\dagger$ und $a_{\nu \mathbf{k}}$ eingeführt, die Elektronen im Zustand $|\mathbf{k}\rangle$ des Bandes ν erzeugen bzw. vernichten [14]. Sie erfüllen die Antikommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [a_{\nu \mathbf{k}}, a_{\nu' \mathbf{k}'}^\dagger]_+ &= \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \delta_{\nu \nu'}, \\ [a_{\nu \mathbf{k}}, a_{\nu' \mathbf{k}'}]_+ &= [a_{\nu \mathbf{k}}^\dagger, a_{\nu' \mathbf{k}'}^\dagger]_+ = 0, \end{aligned} \quad (2.11)$$

welche implizit das Pauli-Prinzip enthalten, nach dem elektronische Zustände nur die Besetzungszahlen 0 oder 1 besitzen können. Damit ist

$$H = \sum_{\nu, \mathbf{k}} \varepsilon_{\nu \mathbf{k}} a_{\nu \mathbf{k}}^\dagger a_{\nu \mathbf{k}} \quad (2.12)$$

mit den effektiven Einteilchen-Energien $\varepsilon_{\nu \mathbf{k}}$.

Effektive-Masse-Näherung

Wie bereits in Kapitel 2.1 erwähnt, sollen in dieser Arbeit Systeme betrachtet werden, in denen sich die angeregten Elektronen nahe des Leitungsbandminimums befinden, d.h. die Bloch-Funktionen der Elektronen besitzen kleine Wellenzahlen \mathbf{k} . Es ist daher nicht notwendig, den Verlauf der Dispersion $\varepsilon_{\nu \mathbf{k}}$ in der gesamten Brillouin-Zone zu kennen, sondern nur in einem kleinen Bereich um ihr Zentrum bei $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Eine Methode zur lokalen Beschreibung der Bandstruktur ist die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Störungsrechnung. Sie wird im Detail in [15] erläutert und soll hier nur skizziert werden.

Es wird ausgegangen von einer Gleichung für die Bloch-Faktoren $u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$,

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right\} u_{\nu, \mathbf{k}} = \varepsilon_{\nu \mathbf{k}} u_{\nu, \mathbf{k}}, \quad (2.13)$$

die man umschreiben kann zu

$$[H(\mathbf{k} = \mathbf{0}) + W(\mathbf{k})] u_{\nu, \mathbf{k}} = \varepsilon_{\nu \mathbf{k}} u_{\nu, \mathbf{k}}. \quad (2.14)$$

Hierbei ist $H(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ der Hamiltonoperator des Kristalls, dessen Eigenfunktionen die Bloch-Faktoren am Γ -Punkt $u_{\nu, \mathbf{0}}$ sind,

$$H(\mathbf{k} = \mathbf{0}) u_{\nu, \mathbf{0}} = \varepsilon_{\nu \mathbf{0}} u_{\nu, \mathbf{0}}, \quad (2.15)$$

und $W(\mathbf{k})$ ein Operator, der für kleine \mathbf{k} als Störung aufgefasst werden kann. Unter der Annahme nicht-entarteter Bandkanten führt die Anwendung von Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie auf eine Korrektur zweiter Ordnung der Energien $\varepsilon_{\nu \mathbf{0}}$:

$$\varepsilon_{\nu \mathbf{k}} = \varepsilon_{\nu \mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{|\mathbf{k} \cdot \langle \nu \mathbf{0} | \mathbf{p} | \nu' \mathbf{0} \rangle|^2}{\varepsilon_{\nu \mathbf{0}} - \varepsilon_{\nu' \mathbf{0}}} = \varepsilon_{\nu \mathbf{0}} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} k_{\alpha} \frac{1}{(m^*)_{\nu}^{\alpha, \beta}} k_{\beta}; \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (2.16)$$

mit dem Tensor der effektiven Masse $(m^*)_{\nu}^{\alpha, \beta}$. Für ihn gilt

$$\frac{1}{(m^*)_{\nu}^{\alpha, \beta}} = \frac{1}{m} \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{m^2} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{\langle \nu \mathbf{0} | p^{\alpha} | \nu' \mathbf{0} \rangle \langle \nu' \mathbf{0} | p^{\beta} | \nu \mathbf{0} \rangle}{\varepsilon_{\nu \mathbf{0}} - \varepsilon_{\nu' \mathbf{0}}}. \quad (2.17)$$

Die Dispersion kann also in der Nähe des Γ -Punktes durch eine Parabel angenähert werden, wobei der Einfluss des Festkörpers auf die Elektronen durch die Verwendung einer effektiven Masse an Stelle der freien Elektronenmasse berücksichtigt wird. In dieser Arbeit ist nur die effektive Masse der Elektronen am Leitungsbandminimum von Interesse, dort ist der Tensor (2.17) isotrop und damit die effektive Masse ein Skalar:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.18)$$

Sie wird im Folgenden zur Vereinfachung der Notation mit m bezeichnet, wobei gegebenenfalls zwischen den effektiven Massen in GaAs und InGaAs zu unterscheiden ist. Abb. 2.2 illustriert die Gültigkeit der Näherung anhand der Bandstruktur von Galliumarsenid.

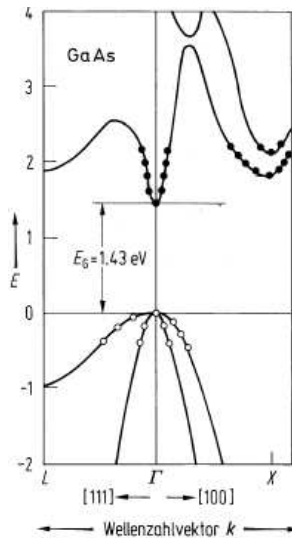


Abbildung 2.2: Bandstruktur der Elektronen in GaAs entlang ausgewählter Richtungen im reziproken Raum [16].

2.2.1 Zustandsdichte

Eine Größe, die Informationen über die energieabhängige Verteilung von Zuständen im Halbleiter enthält, ist die (auf das Volumen des Halbleiters normierte) *Zustandsdichte* [12]

$$D(E) = \frac{1}{V} \sum_{\nu, \mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\nu \mathbf{k}}). \quad (2.19)$$

Sie ist so definiert, dass $D(E)dE$ der Anzahl elektronischer Zustände pro Volumen V mit Energien zwischen E und $E + dE$ entspricht. Hierbei ist zu beachten, dass \mathbf{k} einen Spinindex mit einschließt, der in der Summe einen zusätzlichen Faktor 2 ergibt.

Durch Einsetzen der quadratischen Dispersionsrelationen quasifreier Elektronen (2.18) in (2.19) und Überführung der Summe in ein Integral können die in dieser Arbeit benötigten Zustandsdichten im Leitungsband von zwei- und dreidimensionalen Systemen berechnet werden:

$$\begin{aligned} D^{3d}(E) &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^{3d}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}, \\ D^{2d}(E) &= \frac{m^{2d}}{\pi \hbar^2}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Sie sind in Abb. 2.3 im relevanten Energiebereich aufgetragen.

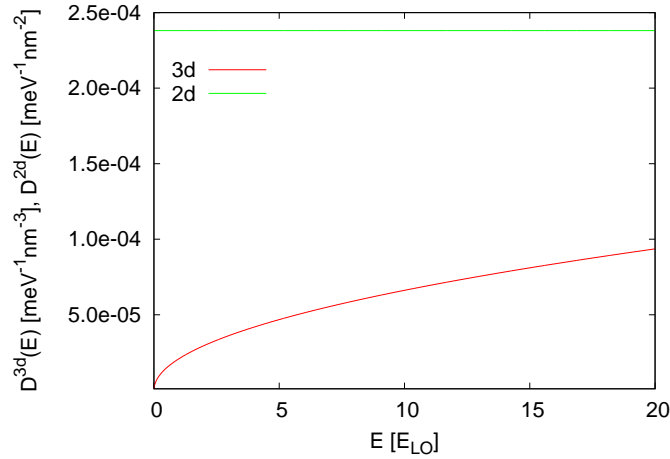


Abbildung 2.3: Zustandsdichten im Leitungsband des GaAs-Volumenmaterials (3d) und des InGaAs-Quantenfilmes (2d) unter Verwendung der Effektive-Masse-Näherung für die Elektronendispersion, siehe dazu auch Gl. (2.20).

2.3 Modell

Nachdem in den vorangegangenen Abschnitten die wesentlichen Grundlagen zur Beschreibung von Elektronen und Phononen in Festkörpern eingeführt wurden, soll an dieser Stelle das konkrete Modell vorgestellt werden, anhand dessen die Elektron-Phonon-Wechselwirkung untersucht wird.

Es handelt sich bei dem betrachteten System um eine Heterostruktur aus verschiedenen Halbleitermaterialien, welche in Schichten übereinander angeordnet sind. Derartige Strukturen sind durch moderne Kristallwachstumsverfahren wie die Molekularstrahlepitaxie realisierbar. Eine schematische Darstellung der Struktur sowie eine Beschreibung ihrer physikalischen Eigenschaften erfolgt in Abb. 2.4, die verwendeten Parameter und elektronischen Zustände werden weiter unten im Text erläutert.

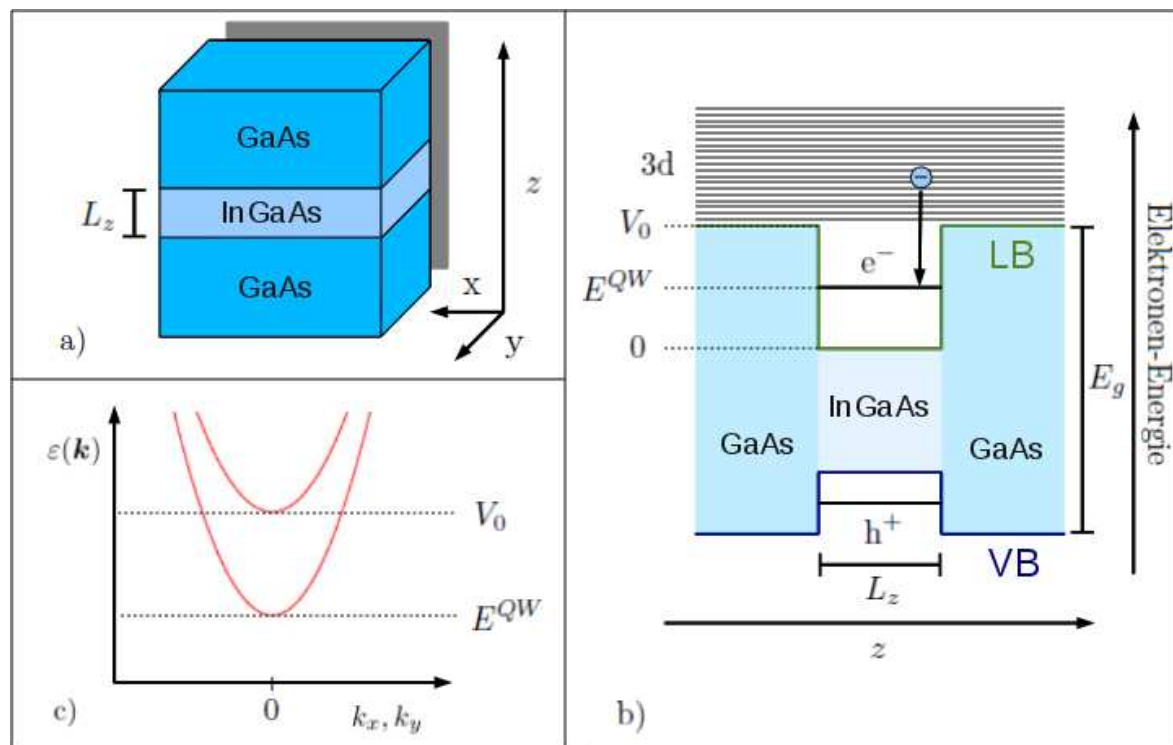


Abbildung 2.4: Modell der in dieser Arbeit betrachteten Halbleiter-Heterostruktur, die Werte der Parameter finden sich im Text.

a) Ortsdarstellung: In ein Volumenmaterial aus Galliumarsenid (GaAs) ist ein Indiumgalliumarsenid- (InGaAs-)Quantenfilm der Dicke L_z eingebettet.

b) Energiedarstellung: Beide Materialien besitzen verschiedene Bandlücken E_g , daher findet in z -Richtung ein Einschluss von Elektronen e^- im Leitungsband (LB) und von Löchern h^+ im Valenzband (VB) statt. Bei Filmdicken L_z im nm-Bereich kommt es zu einer Quantisierung der Energieniveaus im Quantenfilm. Die Unterkannte des InGaAs-Leitungsbandes sei der Energienullpunkt. Die Parameter des Systems werden so gewählt, dass nur ein gebundener elektronischer Zustand im Quantenfilm existiere, dessen Energie als E^{QW} bezeichnet werden soll.

c) Dispersion: Wegen der freien Beweglichkeit der Elektronen in x - und y -Richtung schließt sich oberhalb der Bindungsenergie ein Subband an, dessen Zustände energetisch über die GaAs-Bandkante bei $E = V_0$ hinaus reichen. Die Elektronen im Volumenmaterial (3d) bewegen sich auch in z -Richtung frei und besetzen daher Zustände mit beliebigen Energien im GaAs-Leitungsband. Durch Streuung an Phononen können sie in Zustände des InGaAs-Subbandes übergehen.

Bei den in Abb. 2.4 erwähnten Löchern handelt es sich um Elektronenfehlstellen im Valenzband der Halbleiter, welche sich analog zu Elektronen als positive Ladungsträger beschreiben lassen und eine eigene Dynamik besitzen. Sie können mit Elektronen unter spontaner Emission von Photonen rekombinieren und somit Einfluss auf die elektronischen Besetzungswahrscheinlichkeiten nehmen. Dies geschieht jedoch auf einer längeren Zeitskala als die Elektron-Phonon-Wechselwirkung, so dass diese Arbeit auf die Beschreibung der Elektronen beschränkt bleiben soll.

Der Quantenfilm soll eine Dicke von 6.5nm besitzen und aus einem GaAs-Kristall bestehen, in dem 15% der Ga-Atome durch In-Atome ersetzt wurden ($\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$). Hierbei handelt es sich um realistische Werte. Aus dem In-Gehalt ergibt sich eine Absenkung der Bandlücke des Quantenfilmes von $E_{g,\text{GaAs}} = 1.42\text{eV}$ auf $E_{g,\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}} = 1.21\text{eV}$ [17]. Nach einer üblichen Abschätzung werden zwei Drittel der resultierenden Bandlückendifferenz dem Leitungsband zugeschlagen, woraus ein Einschlusspotential der Elektronen von $V_0 = 140\text{meV}$ folgt. Sieht man von einer atomistischen Beschreibung der Heterostruktur, etwa in einer Tight-Binding-Rechnung, ab, so kann der Quantenfilm in guter Näherung als Potentialtopf mit endlicher Tiefe behandelt werden. Eine Lösung der entsprechenden Schrödinger-Gleichung ergibt, dass bei den gegebenen Parametern nur ein gebundener Zustand existiert (siehe auch Kap. 2.3.1). Alternativ kann dieser Zustand als Grundzustand eines unendlich tiefen Potentialtopfes angesetzt werden, der eine einfachere Form besitzt. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird die Auswirkung einer solchen Ersetzung untersucht werden.

Die Zustände im Volumenmaterial stellen Streuzustände von Elektronen dar, welche über den Potentialtopf hinweglaufen. Um sie zu berechnen, müsste prinzipiell die Schrödinger-Gleichung des Potentialtopfes für Energien $E > V_0$ abhängig von k_x , k_y und k_z gelöst werden, was hier nicht geschehen soll. Wird der Einfluss des Quantenfilmes komplett vernachlässigt, so werden die freien Elektronen durch einfache ebene Wellen beschrieben, die sich im Kristall ausbreiten. In einer besseren Näherung kann er jedoch durch Orthogonalisierung der ebenen Wellen auf die Zustände im Quantenfilm zumindest teilweise berücksichtigt werden. Man erhält so außerdem eine echte Basis des Hilbertraumes des Systems. Die beiden Näherungen werden an späterer Stelle numerisch miteinander verglichen.

Schließlich besitzen auch die Phononen eine eigene Dynamik, welche an die Dynamik der Elektronen gekoppelt ist. Sie soll allerdings zur Vereinfachung des Modells nicht berücksichtigt werden. Stattdessen wird angenommen, dass der Kristall ein thermisches Reservoir von optischen und akustischen Phononen bereitstellt, mit denen die Elektronen in Wechselwirkung treten können. Dies bedeutet, dass die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Phononen gemäß der Bose-Verteilungsfunktion (2.7) durch die Gittertemperatur vorgegeben sind und im Zuge der Elektron-Phonon-Wechselwirkung nicht beeinflusst werden.

Es soll zudem lediglich die Streuung an Phononen im GaAs-Volumenmaterial betrachtet werden, da der Quantenfilm im Vergleich zu den relevanten Phonon-Wellenlängen ($|\mathbf{q}| \simeq 0$) sehr dünn ist.

2.3.1 Elektronische Zustände

Im Folgenden sollen die zur Beschreibung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung benötigten elektronischen Zustände angegeben werden. Dies sind zum einen die dreidimensionalen (3d-)Zustände des Volumenmaterials und zum anderen die quasi-zweidimensionalen (Quasi-2d-)Zustände des Quantenfilmes. Hierbei wird, wie schon bei der in Kapitel 2.2 eingeführten Effektive-Masse-Näherung, von der Annahme Gebrauch gemacht, dass man sich auf Zustände nahe des jeweiligen Leitungsbandminimums beschränken kann. Sie führt auf die sogenannte *Einhüllenden-Näherung*, welche mit der Effektive-Masse-Näherung in engem Zusammenhang steht und insbesondere für die in dieser Arbeit erfolgende Betrachtung von Halbleiter-Heterostrukturen von Bedeutung ist [15].

Die wesentliche Annahme der Einhüllenden-Näherung ist, dass in jeder Schicht des Systems die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r})$ nach den Bloch-Faktoren an den Kanten von endlich vielen Bändern des jeweiligen Materials entwickelt werden kann:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} f_{\nu}(\mathbf{r}) u_{\nu,0}(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

Die Beschränkung auf endlich viele Bänder sowie die Verwendung der Bloch-Faktoren bei $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ist gerechtfertigt, wenn hinreichend kleine \mathbf{k} betrachtet werden. In dieser Arbeit wird nur das Leitungsband berücksichtigt, da die entsprechenden Energien $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ in (In)GaAs klein sind gegenüber den Bandlücken. Zudem wird angenommen, dass die Bloch-Faktoren $u_{\mathbf{0}}(\mathbf{r})$ in allen Schichten identisch sind.

Die Wellenfunktionen werden also dargestellt als Produkt der schnell oszillierenden Funktionen $u_{\mathbf{0}}(\mathbf{r})$, deren Periodizität der des jeweiligen Kristalls entspricht, mit den langsam oszillierenden Einhüllenden $f(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})u_{\mathbf{0}}(\mathbf{r}). \quad (2.22)$$

Es kann weiter gefolgert werden, dass die Einhüllenden $f(\mathbf{r})$ in einen Anteil parallel zum Quantenfilm und einen Anteil in z-Richtung faktorisieren [15],

$$f(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}} \chi(z), \quad (2.23)$$

wo $\boldsymbol{\rho}$ und \mathbf{k}_{\parallel} zweidimensionale Orts- bzw. Wellenzahlvektoren sind und $A = L^2$ die Fläche des Quantenfilmes bezeichnet.

Die 3d-Zustände der Elektronen im Volumenmaterial werden, wie zuvor diskutiert, in einfachster Näherung durch ebene Wellen dargestellt. Dies entspricht dem Bloch-Theorem in einem periodischen Kristall unter Anwendung der Einhüllenden-Näherung:

$$\varphi_{\nu, \mathbf{k}}^{3d}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu, \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu, \mathbf{0}}(\mathbf{r}). \quad (2.24)$$

Die Einhüllenden der Quasi-2d-Zustände des Quantenfilmes faktorisieren gemäß (2.23):

$$\varphi_{\nu, \mathbf{k}}^{2d}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu, \mathbf{k}_{\parallel}, n \rangle = \frac{1}{L} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}} \chi_n(z) u_{\nu, \mathbf{0}}(\mathbf{r}). \quad (2.25)$$

Die Funktion $\chi_n(z)$ stellt den n -ten gebundenen Zustand im Quantenfilm dar, dessen genaue Form durch die Modellierung des Quantenfilmes bestimmt wird. Wird hierzu das Modell des unendlich tiefen Potentialtopfes verwendet, der sich von $z = -L_z/2$ bis $z = L_z/2$ erstreckt, so ergibt sich als niedrigster gebundener Zustand

$$\chi_1^{\text{inf}}(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \cos\left(\frac{\pi}{L_z} \cdot z\right) \quad (2.26)$$

mit der Energie

$$E^{QW} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^{2d} L_z^2} = 156 \text{ meV}. \quad (2.27)$$

Damit läge der Zustand energetisch oberhalb der GaAs-Bandkante. Die Näherung des unendlich tiefen Potentialtopfes kann also in diesem Fall nur für die Zustände, nicht jedoch für ihre Energien verwendet werden.

In einem Potentialtopf mit endlicher Tiefe V_0 lautet der niedrigste Zustand [18]

$$\chi_1^{\text{fin}}(z) = \alpha \begin{cases} \exp(\kappa z), & \text{falls } -\infty < z \leq -L_z/2 \\ \frac{\exp(-\kappa L_z/2)}{\cos(k L_z/2)} \cos(k z), & \text{falls } -L_z/2 < z < L_z/2 \\ \exp(-\kappa z), & \text{falls } L_z/2 \leq z < \infty \end{cases} \quad (2.28)$$

$$\text{mit } \alpha = e^{k L_z/2} \left[\left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \left(\frac{L_z}{2} + \frac{1}{\kappa} \right) \right]^{-\frac{1}{2}},$$

wobei κ und k dem (transzendenten) Gleichungssystem

$$k \cdot \tan(k L_z/2) = \kappa, \quad k^2 + \kappa^2 = \frac{2m^{2d}}{\hbar^2} V_0^2 \quad (2.29)$$

genügen. Die Energie des Zustandes beträgt

$$E^{QW} = V_0 - \frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m^{2d}} = 52.6 \text{ meV}. \quad (2.30)$$

Weiter kann nach [18] gezeigt werden, dass es sich dabei in diesem Fall um den einzigen gebundenen Zustand handelt. Der Index für die Quantenzahl n wird daher im Folgenden zur Vereinfachung der Notation weggelassen. Abb. 2.5 zeigt zum Vergleich den gebundenen Zustand in beiden Näherungen.

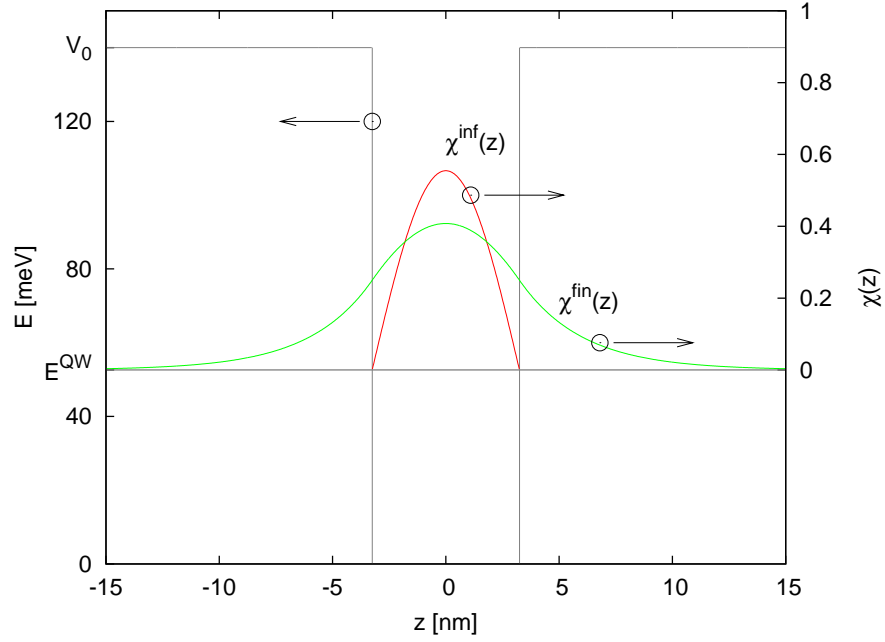


Abbildung 2.5: Gebundener Zustand im eindimensionalen Quantentrog mit der Breite $L_z = 6.5 \text{ nm}$ bei unendlicher Tiefe ($\chi^{\text{inf}}(z)$) und bei endlicher Tiefe $V_0 = 140 \text{ meV}$ ($\chi^{\text{fin}}(z)$). Die Zustände sind bei der Energie E^{QW} eingezeichnet, welche der Rechnung im endlich tiefen Trog entspricht (siehe Gl. (2.30)).

Ein 3d-Zustand im Leitungsband, der zu allen Quasi-2d-Zuständen (2.25) des ersten Subbandes orthogonal ist, lässt sich folgendermaßen aus den ebenen Wellen (2.24) konstruieren, wie man sich leicht überzeugt:

$$|\mathbf{k}\rangle_{\text{OPW}} = |\mathbf{k}\rangle - \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} |\mathbf{k}'_{\parallel}, 1\rangle \langle \mathbf{k}'_{\parallel}, 1 | \mathbf{k}\rangle. \quad (2.31)$$

Unter der Annahme kleiner Wellenzahlen $|\mathbf{k}|$ und gleicher Bloch-Faktoren in GaAs und InGaAs gilt (siehe dazu auch Kap. 3.3.1)

$$\langle \mathbf{k}'_{\parallel}, 1 | \mathbf{k}\rangle = \delta_{\mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \langle \chi | k_z \rangle. \quad (2.32)$$

Somit faktorisieren in der Einhüllenden-Näherung wie erwartet auch die orthogonalisierten ebenen Wellen:

$$|\mathbf{k}\rangle_{\text{OPW}} = |\mathbf{k}_{\parallel}\rangle (|k_z\rangle - |\chi\rangle \langle \chi | k_z \rangle). \quad (2.33)$$

2.4 Boltzmann-Gleichung

Die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}} - (\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})) \nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} = \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \Big|_{\text{St}} \quad (2.34)$$

ist die grundlegende Differentialgleichung der kinetischen Gastheorie. Wie jedoch im Verlauf dieser Arbeit gezeigt wird, kann sie in einfachster Näherung auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in einem Festkörper beschreiben, wobei die $f_{\mathbf{k}}$ die Besetzungswahrscheinlichkeiten der elektronischen Zustände $|\mathbf{k}\rangle$ darstellen. Eine Herleitung und detaillierte Diskussion der Gleichung findet sich beispielsweise in [19], an dieser Stelle sollen nur einige wichtige Eigenschaften angeführt werden.

Auf der linken Seite der Gleichung steht das sogenannte Strömungsglied, das den Einfluss äußerer Felder und Kräfte auf das System enthält. Es ist im Gleichgewicht mit den Effekten von Zwei-Teilchen-Stößen innerhalb des Systems, die vom Stoßterm auf der rechten Seite der Gleichung beschrieben werden. Die Wirkung der Stöße wird durch Fermis Goldene Regel bestimmt, die genaue Form des Stoßtermes ist jedoch von der Art der Streuprozesse abhängig.

Während ein abgeschlossenes System endlicher Größe der Ergodenhypothese zufolge jedem Punkt im Phasenraum, also auch seinem Anfangszustand, beliebig nahe kommt [20], kann in einem unendlich großen System Irreversibilität angenommen werden. Dies ist aufgrund des hier verwendeten thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \text{const.}$) gegeben. Es ist jedoch nicht gesagt, dass das System durch die im Stoßterm beschriebenen Stöße in endlicher Zeit einen Gleichgewichtszustand erreicht. Für ein Fermi-Gas mit Coulomb-Wechselwirkung wird die Überführung des Systems gemäß der Boltzmann-Gleichung in ein thermisches Gleichgewicht in [19] gezeigt. Es stellt sich dann eine Fermi-Verteilung der Elektronen ein,

$$f_{\mathbf{k}}^{\text{eq}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \mu)} + 1}, \quad (2.35)$$

wobei \mathbf{v} die Driftgeschwindigkeit und μ das chemische Potential bezeichnet. Der in dieser Arbeit betrachtete Elektron-Phonon-Wechselwirkungsprozess in einem Festkörper wird durch Stoßterme der Form

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \Big|_{\text{St}} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} w(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \pm \mathbf{q}) \left[(1 - f_{\mathbf{k}}) f_{\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{2} + n_{\pm \mathbf{q}}^{\text{eq}} \pm \frac{1}{2} \right) - f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) \left(\frac{1}{2} + n_{\pm \mathbf{q}}^{\text{eq}} \mp \frac{1}{2} \right) \right] \quad (2.36)$$

mit der intrinsischen Streurate

$$w(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \pm \mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}|^2 \delta(\Delta E_{\pm}) \quad (2.37)$$

beschrieben. Die Tatsache, dass ein auf diese Art wechselwirkendes System nach Anregung einer Nichtgleichgewichtsverteilung in ein thermisches Gleichgewicht relaxiert, wird in Kapitel 4 numerisch untersucht.

Kapitel 3

Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Die im vorigen Kapitel eingeführten theoretischen Grundlagen und Modellannahmen werden nun dazu verwendet, eine mathematische Beschreibung der Streuung von Elektronen an optischen und akustischen Phononen in dem betrachteten System aus Volumenmaterial und Quantenfilm zu erarbeiten. Dazu wird in einem ersten Schritt die Herleitung des entsprechenden Wechselwirkungs-Hamiltonoperators in harmonischer Näherung skizziert [11], mit dem dann die kinetischen Gleichungen in Faktorisierungs- und Markov-Näherung aufgestellt werden. Diese bestimmen die zeitliche Entwicklung der elektronischen Besetzungswahrscheinlichkeiten für zunächst beliebige elektronische Zustände und werden weiter auf das betrachtete Modellsystem spezifiziert.

3.1 Hamiltonoperator

Wie in Kapitel 2.2 erläutert, bewegen sich die Elektronen im gitterperiodischen Kristallpotential des Festkörpers

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (3.1)$$

wobei sich die Atomrümpfe an den festen Positionen \mathbf{R}_j befinden, die durch die jeweilige Kristallstruktur vorgegeben sind. Sieht man von der expliziten Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen ab, so wird das System also durch den folgenden freien Hamiltonoperator beschrieben:

$$H_0 = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right). \quad (3.2)$$

Zur Einführung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in harmonischer Näherung werden kleine Auslenkungen \mathbf{Q} der Atomrümpfe um ihre Gleichgewichtspositionen $\mathbf{R}_j^{(0)}$ berücksichtigt und die Rumpfpotentiale linear nach den Auslenkungen entwickelt:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j u(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j^{(0)} + \mathbf{Q}_j)) = \sum_j u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)}) - \sum_j \mathbf{Q}_j \cdot \nabla u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)}). \quad (3.3)$$

Der erste Term kann wiederum mit dem Operator der kinetischen Energie zu einem gitterperiodischen Hamiltonoperator (3.2) zusammengefasst werden, dessen Eigenzustände Bloch-Zustände sind, während der zweite Term auf einen Elektron-Phonon-Wechselwirkungs-Hamiltonoperator

$$H_{e-p} = \sum_i \tilde{u}(\mathbf{r}_i), \quad \tilde{u}(\mathbf{r}_i) = - \sum_j \mathbf{Q}_j \cdot \nabla u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)}) \quad (3.4)$$

führt. Dieser wird zweckmäßig mithilfe der Teilchendichte $\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ in Integralform formuliert:

$$H_{e-p} = \int d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \tilde{u}(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Ersetzt man die Rumpfpotentiale durch ihre Fourierreihen $u(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$, so folgt

$$\tilde{u}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{q}} i\mathbf{q} \cdot \sum_j \mathbf{Q}_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j^{(0)}}. \quad (3.6)$$

Die Auslenkungen \mathbf{Q}_j werden durch Entwicklung nach bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $b_{\mathbf{q}}^\dagger$ bzw. $b_{\mathbf{q}}$ quantisiert, welche in Kapitel 2.1 eingeführt wurden:

$$\mathbf{Q}_j = \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V}} e_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j^{(0)}} [b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger]. \quad (3.7)$$

Einsetzen in (3.6) ergibt

$$H_{e-p} = - \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V}} i\mathbf{q} u_{\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) [b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger]. \quad (3.8)$$

Man beachte, dass hier ein Faktor $q = \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ auftritt, der für transversale Phononen verschwindet, da bei diesen die Auslenkung senkrecht zur Ausbreitungsrichtung erfolgt. Sie liefern also in harmonischer Näherung keinen Beitrag zur Streuung von Elektronen. Das ist im Falle optischer Phononen auch anschaulich klar, da durch die transversale Auslenkung der Kristallionen gegeneinander kaum Polarisierung erzeugt wird, an die Elektronen koppeln können.

Die Teilchendichte $\rho(\mathbf{r})$ kann in zweiter Quantisierung durch Feldoperatoren $\psi(\mathbf{r})$ und $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ ausgedrückt werden,

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}),$$

welche die Vernichtung bzw. Erzeugung von Teilchen am Ort \mathbf{r} bewirken und mit den elektronischen Einteilchen-Zuständen $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ definiert sind durch

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}), \quad \psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Hierbei werden die in Kapitel 2.2 eingeführten fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ und $a_{\mathbf{k}}$ verwendet, die Elektronen in den Zuständen $|\mathbf{k}\rangle$ erzeugen bzw. vernichten. Die Funktionen $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sollen an dieser Stelle noch allgemein gehalten werden und können entweder Zustände des Volumenmaterials oder des Quantenfilmes darstellen, siehe auch Kapitel 2.3.1. Es ist zu beachten, dass der Index \mathbf{k} in beiden Fällen neben dem Wellenvektor \mathbf{k} selbst auch einen Bandindex ν einschließt, der zur Vereinfachung der Notation nicht explizit angeschrieben wird. Es folgt nun

$$\int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) a_{\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}' \rangle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}. \quad (3.9)$$

Damit erhält man schließlich als Wechselwirkungs-Hamiltonoperator

$$H_{e-p} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} [b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger] \quad (3.10)$$

mit den Kopplungs-Matrixelementen

$$M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} := M_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{k} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}' \rangle = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V}} q u_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{k} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}' \rangle. \quad (3.11)$$

Die genaue Form der Matrixelemente wird sowohl durch die Art der wechselwirkenden Phononen als auch durch die Art ihrer Wechselwirkung bestimmt. Die möglichen Wechselwirkungsarten wiederum sind abhängig vom betrachteten Wellenlängenregime, weshalb insbesondere die Annahme großer Phononenwellenlängen von Bedeutung ist. Im Folgenden werden jeweils ein Mechanismus für die Wechselwirkung mit akustischen und mit optischen Phononen berücksichtigt, für die die Matrixelemente

nach den Wellenzahlen \mathbf{q} parametrisiert werden können.

Sieht man von piezoelektrischen Effekten ab, so findet die Kopplung von Elektronen an akustische Phononen im Wesentlichen über das Deformationspotential D statt. Dies ist eine Konstante, die dem langwelligen Grenzwert des Ionenpotentials $u_{\mathbf{q}}$ entspricht, welches in Gl. (3.11) entsprechend ersetzt wird. Das Betragsquadrat des Faktors $M_{\mathbf{q}}$ lautet dann

$$|M_{\mathbf{q}}^{LA}|^2 = \frac{\hbar D^2}{2\rho c_{LA}V} |\mathbf{q}| = M_{LA}^2 |\mathbf{q}|. \quad (3.12)$$

Im Falle optischer Phononen stellt die sogenannte polare Kopplung den entscheidenden Kopplungsmechanismus dar, die in ionischen Kristallen sehr stark sein kann. Hierbei erzeugen die entgegengesetzt schwingenden positiv und negativ geladenen Atomrümpfe eine (Dipol-)Polarisation, die mit einem langreichweitigen elektrischen Feld verbunden ist, an dem Elektronen gestreut werden. Für die Faktoren $M_{\mathbf{q}}$ ergibt sich unter Annahme einer konstanten Phononendispersion sowie großer Wellenlängen nach längerer Rechnung (siehe [11]):

$$|M_{\mathbf{q}}^{LO}|^2 = \frac{\hbar\omega_{LO}}{2V} \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon} \right) = M_{LO}^2 \frac{1}{q^2}. \quad (3.13)$$

3.2 Streuprozesse und kinetische Gleichungen

In diesem Abschnitt soll der zuvor berechnete Wechselwirkungs-Hamiltonoperator dazu verwendet werden, Bewegungsgleichungen für die Besetzungswahrscheinlichkeiten der elektronischen Zustände herzuleiten [21]. Dazu wird im Heisenberg-Bild eine Hierarchie von Gleichungen entwickelt und in niedrigster Näherung mittels Faktorisierung abgebrochen. Dies entspricht einer störungstheoretischen Behandlung der (harmonischen) Elektron-Phonon-Wechselwirkung in erster Ordnung und führt auf einfache Wechselwirkungsprozesse, nämlich die spontane und stimulierte Emission sowie die Absorption von Phononen. Die Anwendung von Störungstheorie höherer Ordnung, etwa über den Formalismus Greenscher Funktionen, würde darüber hinaus die Berücksichtigung von Polaron-Effekten wie der Renormierung der Elektronenenergien ermöglichen [22, 23]. Darauf soll in dieser Arbeit jedoch verzichtet werden. Zusätzlich werden in einer Markov-Näherung Gedächtniseffekte des Systems vernachlässigt. Wie sich herausstellt, besitzen die Bewegungsgleichungen in dieser niedrigsten Näherung die Form einer semiklassischen Boltzmann-Gleichung und liefern damit eine quantenmechanische Begründung des dort auftretenden Stoßtermes.

Der vollständige Hamiltonoperator des Systems aus Elektronen und Phononen lautet

$$\begin{aligned} H &= H_e + H_p + H_{e-p} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'} [b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Zunächst werden die Heisenberg-Bewegungsgleichungen für bosonische und fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aufgestellt:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}}(t) &= [H, a_{\mathbf{k}}(t)] \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'}, a_{\mathbf{k}}] + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} [a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}''}, a_{\mathbf{k}}] (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \\ &= -\varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}''} a_{\mathbf{k}''} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \\ -i\hbar \frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \\ -i\hbar \frac{d}{dt} b_{\mathbf{q}} &= -\hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'}, \\ -i\hbar \frac{d}{dt} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} &= \hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten in den elektronischen Zuständen $|\mathbf{k}\rangle$ und in den phononischen Zuständen $|\mathbf{q}\rangle$ sind gegeben durch die Erwartungswerte $f_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle$ bzw. $n_{\mathbf{q}} = \langle b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \rangle$. Hier ist nur die zeitliche Entwicklung der elektronischen Verteilungsfunktionen von Interesse, deren Bewegungsgleichungen mit (3.15) lauten:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle &= -i\hbar [\langle \dot{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \dot{a}_{\mathbf{k}} \rangle] \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} [\langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle] \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}'', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}''} [\langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}''} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}''} b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aus der Definition (3.11) der Matrixelemente folgt

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{q}} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}}^* \langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle^* = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}}^* \langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle^* \quad \text{und} \\ \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'} b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}}^* \langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle^*, \end{aligned}$$

womit sich (3.16) vereinfachen lässt zu

$$\frac{d}{dt}\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = -\frac{2}{\hbar} \Im \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} \left[\langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{q}}^\dagger \rangle \right]. \quad (3.17)$$

Es treten hier Korrelationen dritter Ordnung auf, sogenannte phononenassistierte Polarisationen, die wiederum über ihre Bewegungsgleichungen an Korrelationen höherer Ordnung gekoppelt sind:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle &= -i\hbar \left[\langle \dot{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger \dot{a}_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \dot{b}_{\mathbf{q}} \rangle \right] \\ &= \varepsilon_{\mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle + \sum_{\mathbf{k}'', \mathbf{q}'} M_{\mathbf{q}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}''}^\dagger a_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}'} + b_{-\mathbf{q}'}^\dagger) b_{\mathbf{q}} \rangle \\ &\quad - \varepsilon_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle - \sum_{\mathbf{k}'', \mathbf{q}'} M_{\mathbf{q}', \mathbf{k}, \mathbf{k}''} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}''} (b_{\mathbf{q}'} + b_{-\mathbf{q}'}^\dagger) b_{\mathbf{q}} \rangle \\ &\quad - \hbar \omega_{\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle - \sum_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}''}^\dagger a_{\mathbf{k}'''} \rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Faktorisierungs-Näherung

Um dieses Hierarchieproblem zu lösen und geschlossene Bewegungsgleichungen für die elektronischen Besetzungswahrscheinlichkeiten zu erhalten, werden die Gleichungen (3.18) von den Korrelationen vierter Ordnung entkoppelt. Dies geschieht in einer Hartree-Fock-Näherung durch Faktorisierung der entsprechenden Erwartungswerte:

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}} \rangle &= \delta_{\mathbf{ml}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{n}} \rangle - \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{n}} \rangle \\ &= \delta_{\mathbf{ml}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{n}} \rangle - \{ \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{n}} \rangle \langle a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{l}} \rangle \delta_{\mathbf{kn}} \delta_{\mathbf{ml}} - \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{l}} \rangle \langle a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}} \rangle \delta_{\mathbf{kl}} \delta_{\mathbf{mn}} \}, \\ \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}'} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \rangle \langle b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}'} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die Kronecker-Deltas sorgen dafür, dass nur Besetzungswahrscheinlichkeiten und keine Polarisationen berücksichtigt werden. Dies entspricht der Random Phase Approximation, in der zusätzlich zur Faktorisierung angenommen wird, dass sich in den Summen über Polarisationen alle nichtdiagonalen Beiträge herausmitteln. Dementsprechend werden auch die Erwartungswerte $\langle b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \rangle$ und $\langle b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle$ vernachlässigt. Einsetzen in (3.18) ergibt

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle &= (\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle \\ &\quad + M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{q}} \\ &\quad - \left(M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'} - M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}''} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}''} \right), \end{aligned} \quad (3.20)$$

was sich formal integrieren lässt zu

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}) (t-t')} \times \\ &\quad \left[M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} (n_{\mathbf{q}} (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'})) + f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} - f_{\mathbf{k}'} - \sum_{\mathbf{k}''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}''} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}''} \right]_{t'}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Analog erhält man

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{q}}^\dagger \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_{-\mathbf{q}}) (t-t')} \times \\ &\quad \left[M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} ((1 + n_{-\mathbf{q}}) (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'})) - f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} + f_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}''} \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}''} \right]_{t'}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Mit (3.21) und (3.22) ließe sich nun durch Einsetzen in (3.17) ein geschlossenes System von Bewegungsgleichungen der elektronischen Besetzungswahrscheinlichkeiten aufstellen. Es soll an dieser Stelle jedoch noch eine wesentliche Näherung durchgeführt und diskutiert werden, die sogenannte Markov-Näherung.

Markov-Näherung

In den Bewegungsgleichungen der phononenassistierten Polarisierungen (3.21) und (3.22) treten Zeitintegrale auf, die die zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten zu einer bestimmten Zeit t von den Besetzungswahrscheinlichkeiten zu allen vergangenen Zeiten $t' < t$ abhängig machen, also eine Art Gedächtnis des Systemes darstellen. Die Markov-Näherung besteht darin, diese Gedächtniseffekte zu vernachlässigen, indem die Verteilungsfunktionen $f_{\mathbf{k}}(t')$ unter dem Integral durch ihre Werte zur aktuellen Zeit t ersetzt werden. Dies ist gerechtfertigt, da das System groß ist und ein Kontinuum von Zuständen $|\mathbf{k}'\rangle$ zur Verfügung stellt, was ein im Vergleich zur Dynamik der Verteilungsfunktionen schnelles Abklingen der Integranden gewährleistet. Mit der Dirac-Identität folgt für das verbleibende Zeitintegral

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} = i\hbar(P \frac{1}{E} - i\pi\delta(E)), \quad (3.23)$$

wobei $P \frac{1}{E}$ den Hauptwert des entsprechenden Integrales bezeichnet. Einsetzen in die Bewegungsgleichung (3.17) liefert

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} \times \\ &\quad \left[\left[M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} (n_{\mathbf{q}}(f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'})) + f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} - f_{\mathbf{k}'} \right] - \sum_{\mathbf{k}''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}''} \langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}' \mathbf{k}} f_{\mathbf{k}''} \right] \delta(E_1) \\ &\quad + \left[M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} ((1 + n_{-\mathbf{q}})(f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'})) - f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} + f_{\mathbf{k}'} \right] + \sum_{\mathbf{k}''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}''} \langle a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}' \mathbf{k}} f_{\mathbf{k}''} \right] \delta(E_2) \Big] \\ &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 \times \\ &\quad \left[(n_{\mathbf{q}}(f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'})) + f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} - f_{\mathbf{k}'} \right] \delta(E_1) + ((1 + n_{-\mathbf{q}})(f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'})) - f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} + f_{\mathbf{k}'} \Big] \delta(E_2) \\ &\quad + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'', \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}''} M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'', \mathbf{k}''} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}''} (\delta(-\hbar\omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\hbar\omega_{-\mathbf{q}})) \end{aligned} \quad (3.24)$$

mit $E_1 = \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ und $E_2 = \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{-\mathbf{q}}$. Der letzte Term entfällt, da $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ im Falle optischer Phononen stets größer als 0 ist, während es im Falle akustischer Phononen nur für $\mathbf{q} = 0$ verschwindet. Dann verschwindet allerdings gemäß (3.12) auch das Kopplungs-Matrixelement. Die verbleibenden Terme können zum besseren Verständnis der einzelnen Streuprozesse neu angeordnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 \times \\ &\quad \left[-f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'})(1 + n_{-\mathbf{q}})\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{-\mathbf{q}}) - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'}n_{\mathbf{q}})\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \right. \\ &\quad \left. + (1 - f_{\mathbf{k}})f_{\mathbf{k}'}(1 + n_{\mathbf{q}})\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) + (1 - f_{\mathbf{k}})f_{\mathbf{k}'}n_{-\mathbf{q}}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{-\mathbf{q}}) \right] \\ &= (1 - f_{\mathbf{k}})S_{\mathbf{k}}^{\text{in}} - f_{\mathbf{k}}S_{\mathbf{k}}^{\text{out}}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Es gibt drei elementare Prozesse, die die Besetzungswahrscheinlichkeit durch Einstreuung aus anderen Zuständen erhöhen oder durch Ausstreuung in andere Zustände verringern können: Der erste und der dritte Term stellen die spontane und stimulierte Emission von Phononen mit dem Impuls $-\mathbf{q}$ bzw.

\mathbf{q} dar, der zweite und der vierte Term beschreiben die Absorption von Phononen mit dem Impuls \mathbf{q} bzw. $-\mathbf{q}$. Man beachte, dass die Ausstreuung aus dem Zustand $|\mathbf{k}\rangle$ mit der Gesamtrate $S_{\mathbf{k}}^{\text{out}}$ seiner Besetzungswahrscheinlichkeit proportional ist, während die Einstreuung mit der Gesamtrate $S_{\mathbf{k}}^{\text{in}}$ gemäß der fermionischen Natur der Elektronen von $(1 - f_{\mathbf{k}})$ abhängt.

Die Delta-Distributionen entsprechen der exakten Energieerhaltung bei allen Streuprozessen, welche eine Folge der Markov-Näherung und somit der Annahme nicht zu schneller Dynamik geschuldet ist. Auf sehr kurzen Zeitskalen hingegen ist diese Näherung wegen der Heisenberg'schen Unschärferelation $\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$ nicht mehr zu rechtfertigen. Die Dynamik des Systems kann dann nicht durch eine semi-klassische Boltzmann-Statistik wie in Gl. (3.25) bzw. (2.36) beschrieben werden. Stattdessen wird die quantenkinetische Gleichung benötigt, welche eine Zeitintegration über die Vergangenheit des Systems enthält.

3.3 Matricelemente

Nachdem im vorigen Abschnitt die Bewegungsgleichungen der Verteilungsfunktionen $f_{\mathbf{k}}$ in möglichst allgemeiner Form aufgestellt wurden, sollen sie nun in Bezug auf das konkrete Halbleitersystem spezifiziert werden, das Gegenstand dieser Arbeit ist und in Kapitel 2.3 vorgestellt wurde. Die Spezifizierung hat vor allem Einfluss auf die Matricelemente

$$M_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'} := M_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{k} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}' \rangle, \quad (3.26)$$

in welche die elektronischen Zustände direkt eingehen, weshalb in diesem Abschnitt eine systematische Diskussion der Matricelemente erfolgen soll. Sie werden außerdem charakterisiert durch die Art der wechselwirkenden Phononen und bestimmen wesentlich die Stärke der Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Es wird begonnen mit dem einfachsten und bekanntesten Fall, der Streuung innerhalb des Volumenmaterials, um dann die kompliziertere Streuung innerhalb des Quantenfilmes sowie die Streuung zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm zu behandeln. Je nach Dimension des betrachteten Materiales und der Art der verwendeten Näherungen für die elektronischen Zustände kann die Rechnung mehr oder weniger einfach analytisch erfolgen. In allen Fällen werden jeweils optische und akustische Phononen betrachtet. Im Anschluss an die Berechnung der Matricelemente werden diese dazu verwendet, die Streuterme in Gl. (3.25) für optische und akustische Phononen so weit wie möglich auszuformulieren.

Für die weiteren Rechnungen bietet es sich an, die Streuterme ohne die Matricelemente in (3.25) zu einer Funktion $g(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k})$ zusammenzufassen:

$$\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 g(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (3.27)$$

3.3.1 Volumenmaterial

Die Elektronen des Volumenmaterials werden in zwei verschiedenen Ansätzen entweder durch ebene Wellen oder durch orthogonalisierte ebene Wellen beschrieben. Dies geschieht, wie in Kapitel 2.3.1 beschrieben, im Rahmen der Einhüllenden-Näherung.

Im ersten Fall lauten damit die Wellenfunktionen

$$\varphi_{\nu, \mathbf{k}}^{3d}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu, \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu, \mathbf{0}}(\mathbf{r}) \quad (3.28)$$

und für das Matricelement (3.26) folgt

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} &= M_{\mathbf{q}} \int d^3 \mathbf{r} \frac{1}{V} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu', \mathbf{0}}^*(\mathbf{r}) u_{\nu, \mathbf{0}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{M_{\mathbf{q}}}{V} \sum_{\mathbf{R}} \int_{EZ} d^3 \mathbf{r} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{\nu', \mathbf{0}}^*(\mathbf{r}) u_{\nu, \mathbf{0}}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.29)$$

wo das Integral über den gesamten Kristall in eine Summe von Integralen über die Einheitszellen (EZ) an den Gitterplätzen \mathbf{R} zerlegt wurde. Es wird nun angenommen, dass wegen der Beschränkung auf kleine Wellenzahlen $|\mathbf{k}| \ll 1/a$ mit der Gitterkonstante a die ebenen Wellen auf den Einheitszellen nahezu konstant sind und daher vor das Integral gezogen werden können:

$$M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} = \frac{M_{\mathbf{q}}}{V} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}} \int_{EZ} d^3 \mathbf{r} u_{\nu', \mathbf{0}}^*(\mathbf{r}) u_{\nu, \mathbf{0}}(\mathbf{r}). \quad (3.30)$$

Die Bloch-Faktoren $u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ bilden aber gerade ein Orthonormalsystem auf der Einheitszelle, sodass das Matricelement die folgende einfache Form erhält:

$$M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} = M_{\mathbf{q}} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}') \delta_{\nu, \nu'}. \quad (3.31)$$

Man beachte, dass es sich bei beiden Delta-Symbolen um Kronecker-Deltas handelt. Das erste Kronecker-Delta hat die physikalische Bedeutung einer Impulserhaltung, die aus der Verwendung ebener Wellen

mit großen Wellenlängen folgt, während das zweite die Banddiagonalität der phononischen Streuprozesse in Einhüllenden-Näherung repräsentiert. Somit braucht nur das Leitungsband des Volumenmaterials berücksichtigt zu werden, in dem die Elektronen zu Beginn angeregt werden sollen, und der Bandindex kann entfallen. Ebenso wird im Weiteren von den Bloch-Faktoren abgesehen, die im Grenzfall großer Wellenlängen stets analog zur obigen Rechnung behandelt werden können. Der Unterschied zwischen den Matrixelementen für optische und akustische Phononen besteht lediglich in dem Faktor $M_{\mathbf{q}}$, der entweder durch (3.12) oder durch (3.13) gegeben ist.

Im zweiten Fall werden die ebenen Wellen auf die gebundenen Quasi-2d-Zustände orthogonalisiert, siehe Gl. (2.33), so dass für das Matrixelement folgt:

$$\begin{aligned}
 M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}} &= M_{\mathbf{q}, \text{OPW}} \langle \mathbf{k}' | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle_{\text{OPW}} \\
 &= M_{\mathbf{q}} (\langle k'_z | - \langle \chi | k'_z \rangle \langle \chi |) \langle \mathbf{k}'_{\parallel} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}_{\parallel} \rangle (| k_z \rangle - | \chi \rangle \langle \chi | k_z \rangle) \\
 &= M_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}'_{\parallel} | e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}} | \mathbf{k}_{\parallel} \rangle (\langle k'_z | - \langle \chi | k'_z \rangle \langle \chi |) e^{iq_z z} (| k_z \rangle - | \chi \rangle \langle \chi | k_z \rangle) \\
 &= M_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}'_{\parallel} | e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}} | \mathbf{k}_{\parallel} \rangle (\langle k'_z | e^{iq_z z} | k_z \rangle - \langle k'_z | e^{iq_z z} | \chi \rangle \langle \chi | k_z \rangle \\
 &\quad - \langle \chi | e^{iq_z z} | k_z \rangle \langle \chi | k'_z \rangle + \langle \chi | e^{iq_z z} | \chi \rangle \langle \chi | k_z \rangle \langle \chi | k'_z \rangle),
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

wobei $\boldsymbol{\rho}$ den Anteil des Ortsvektors parallel zum Quantenfilm bezeichnet. In x- und y-Richtung ergibt sich dann wie im bereits diskutierten Fall die Impulserhaltung, während in z-Richtung zunächst zusätzliche Terme auftreten. Diese sind jedoch proportional zu $\frac{1}{L}$ und verschwinden daher im Grenzfall des unendlich großen Festkörpers, so dass auch in z-Richtung die Impulserhaltung folgt. Die Verwendung orthogonalisierter ebener Wellen hat demnach auf die Matrixelemente der Streuung im Volumenmaterial keinen Einfluss.

3.3.2 Quantenfilm

Zur Berechnung der Matrixelemente der Streuung im Quantenfilm sowie der später folgenden Streuung zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm ist es zweckmäßig, die elektronischen Zustände $|\mathbf{k}\rangle$ und $|\mathbf{k}'\rangle$ in einen Anteil parallel zum Quantenfilm und einen Anteil in z-Richtung zu faktorisieren, was in der Einhüllenden-Näherung für alle hier verwendeten Zustände zulässig ist. Gleichung (3.27) wird damit zu

$$\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 | \langle \mathbf{k}'_{\parallel} | e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}} | \mathbf{k}_{\parallel} \rangle |^2 | \langle \lambda' | e^{iq_z z} | \lambda \rangle |^2 g(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}). \tag{3.33}$$

Hierbei bezeichnet λ je nach Dimension des elektronischen Zustandes die z-Komponente des freien Wellenvektors k_z oder die Quantenzahl des gebundenen Quantentrogzustandes n . Bei den Zuständen parallel zum Quantenfilm handelt es sich stets um ebene Wellen, so dass in der bekannten Weise die Impulserhaltung in der x-y-Ebene folgt:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}) | \langle \lambda' | e^{iq_z z} | \lambda \rangle |^2 g(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}) \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', q_z} |M_{\sqrt{q_z^2 + (\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel})^2}}|^2 | \langle \lambda' | e^{iq_z z} | \lambda \rangle |^2 g(q_z, \mathbf{k}', \mathbf{k}).
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Im thermodynamischen Limes kann die Summe über q_z durch ein Integral ersetzt werden, so dass man schließlich die kinetischen Gleichungen in der folgenden Form erhält:

$$\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} \frac{L}{2\pi} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(q_z, \mathbf{k}', \mathbf{k}). \tag{3.35}$$

Hierbei wurden neue Matrixelemente

$$\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 = \int dq_z |M_{\sqrt{q_z^2 + (\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel})^2}}|^2 | \langle \lambda' | e^{iq_z z} | \lambda \rangle |^2 \tag{3.36}$$

mit den Formfaktoren

$$|F(q_z)|^2 = |\langle \lambda' | e^{iq_z z} | \lambda \rangle|^2 \quad (3.37)$$

eingeführt, welche dem Überlapp der streuenden elektronischen Zustände mit der ebenen Welle des beteiligten Phonons in z-Richtung entsprechen.

Die Matrixelemente sollen zuerst für den Fall der Wechselwirkung mit **optischen** Phononen diskutiert werden. Man beachte, dass dann wegen der konstanten Phononendispersion die Funktion $g(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ keine q_z -Abhängigkeit enthält und somit unabhängig von den Matrixelementen stehen kann. Bei der darauf folgenden Betrachtung akustischer Phononen gilt dies jedoch nicht mehr, weshalb die Matrixelemente $\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2$ lediglich als abkürzende Schreibweise, nicht aber als eigenständige Faktoren betrachtet werden dürfen.

Da in diesem Unterabschnitt die Streuung innerhalb des Quantenfilmes behandelt wird, ist sowohl für λ als auch für λ' die Quantenzahl $n = 1$ des einzigen gebundenen Quasi-2d-Zustandes in z-Richtung einzusetzen. Es werden drei verschiedene Näherungen verwendet, in denen der Quantenfilm entweder als unendlich tief und unendlich schmaler Potentialtopf, als unendlich tiefer Potentialtopf mit endlicher Breite und als Potentialtopf mit endlicher Tiefe und endlicher Breite beschrieben wird. Die Zustände in z-Richtung sind dann

$$\langle z | n = 1 \rangle = \chi^{\text{inf}}(z)$$

für den unendlich tiefen Potentialtopf und

$$\langle z | n = 1 \rangle = \chi^{\text{fn}}(z)$$

für den endlich tiefen Potentialtopf, siehe Kapitel 2.3.1.

Setzt man zunächst den Potentialtopf als unendlich tief an, so ergibt sich für den Formfaktor in Ortsdarstellung

$$|F(q_z)|^2 = \left| \int dz |\chi^{\text{inf}}(z)|^2 e^{iq_z z} \right|^2. \quad (3.38)$$

Im Grenzfall des unendlich dünnen Quantenfilmes erhält man

$$|F(q_z)|^2 = 1 \quad (3.39)$$

und somit unter Verwendung von $q_{\parallel} = \sqrt{(\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel})^2}$

$$\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 = \int dq_z |M_{\sqrt{q_z^2 + q_{\parallel}^2}}|^2 = M_{LO}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{1}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} = M_{LO}^2 \left[\frac{1}{q_{\parallel}} \arctan \left(\frac{q_z}{q_{\parallel}} \right) \right]_{-\infty}^{\infty} = M_{LO}^2 \frac{\pi}{q_{\parallel}}. \quad (3.40)$$

Die polare Kopplung führt also in einem echt zweidimensionalen System zu einer $\frac{1}{q}$ -Abhängigkeit des Matrixelementes anstatt der $\frac{1}{q^2}$ -Abhängigkeit des dreidimensionalen Systems, entsprechend der Form der Fouriertransformierten des Coulomb-Potentials.

Berücksichtigt man die endliche Ausdehnung des Filmes, so hat man zusätzlich das Überlappintegral zu berechnen. Es bietet sich in diesem Fall jedoch an, den Formfaktor aufzuspalten und die q_z -Integration vorzuziehen:

$$\begin{aligned} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 &= M_{LO}^2 \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz' |\chi^{\text{inf}}(z)|^2 |\chi^{\text{inf}}(z')|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{e^{iq_z(z-z')}}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} \\ &= M_{LO}^2 \frac{\pi}{q_{\parallel}} \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz' |\chi^{\text{inf}}(z)|^2 |\chi^{\text{inf}}(z')|^2 e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \\ &= M_{LO}^2 \frac{\pi}{q_{\parallel}} \left\{ \frac{2}{q_{\parallel} L_z} + \frac{q_{\parallel} L_z}{(q_{\parallel} L_z)^2 + 4\pi^2} + 2(e^{-q_{\parallel} L_z} - 1) \left(\frac{1}{q_{\parallel} L_z} - \frac{q_{\parallel} L_z}{(q_{\parallel} L_z)^2 + 4\pi^2} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Unter Verwendung der Zustände $\chi^{\text{fin}}(z)$ des endlich tiefen Potentialtopfes führt dieses Vorgehen allerdings nicht mehr zu einem derart kompakten Ergebnis, weshalb in diesem Fall zunächst das Überlappintegral berechnet wird:

$$\begin{aligned}
 F(q_z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz |\chi^{\text{fin}}(z)|^2 e^{iq_z z} \\
 &= \alpha^2 \left(\int_{-\infty}^{-L_z/2} dz e^{2\kappa z} e^{iq_z z} + \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \left(\frac{e^{-\kappa L_z/2}}{\cos(kL_z/2)} \right)^2 \cos^2(kz) e^{iq_z z} + \int_{L_z/2}^{\infty} dz e^{-2\kappa z} e^{iq_z z} \right) \\
 &= \alpha^2 \left(\frac{e^{-L_z(2\kappa+iq_z)/2}}{2\kappa+iq_z} + \frac{e^{L_z(iq_z-2\kappa)/2}}{2\kappa-iq_z} + \right. \\
 &\quad \left. \frac{e^{-\kappa L_z}}{\cos^2(kL_z/2)} \left(\frac{q_z \cdot \cos(kL_z) \cdot \sin(q_z L_z/2) - 2k \cdot \sin(kL_z) \cdot \cos(q_z L_z/2)}{q_z^2 - 4k^2} + \frac{\sin(q_z L_z/2)}{q_z} \right) \right). \tag{3.42}
 \end{aligned}$$

Die Integration über q_z erfolgt dann numerisch:

$$\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 = M_{LO}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{1}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dz |\chi^{\text{fin}}(z)|^2 e^{iq_z z} \right|^2. \tag{3.43}$$

Hierbei ist zu beachten, dass im letzten Summanden des Ausdrucks (3.42) für $q_z = 0$ durch 0 dividiert wird, es muss daher der Grenzwert $q_z \rightarrow 0$ betrachtet werden. Dieser entspricht jedoch einfach der Normierung der Quasi-2d-Zustände. Abb. 3.1 zeigt den Formfaktor in Abhängigkeit von q_z .

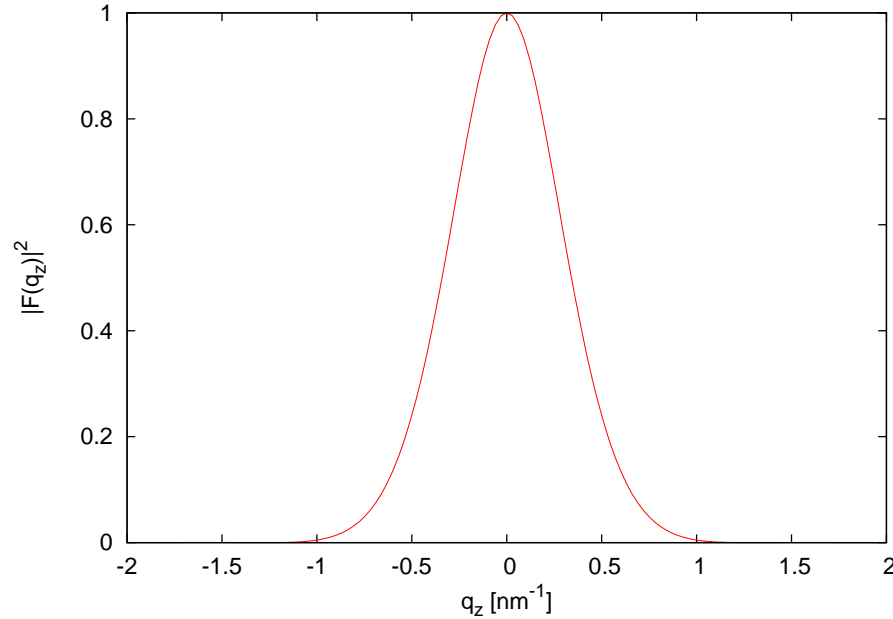


Abbildung 3.1: Formfaktor $|F(q_z)|^2$ für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Quantenfilm unter Verwendung der Zustände des endlichen Potentialtopfes (siehe Gl. (3.42)).

Die drei Ergebnisse (3.40), (3.41) und (3.43) werden in Kapitel 4.1.1 dazu verwendet werden, die Stärke der Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Quantenfilm unter den verschiedenen Näherungen quantitativ miteinander sowie mit der Stärke der Wechselwirkung im Volumenmaterial zu vergleichen.

Die Matrixelemente der Wechselwirkung mit **akustischen** Phononen unterscheiden sich von jenen für die optischen Phononen lediglich durch die Form der Faktoren $M_{\mathbf{q}}$, weshalb viele der bisherigen Ergebnisse übernommen werden können. Es soll sich hier allerdings auf die beste Näherung, also die

Verwendung der Zustände des endlichen Potentialtopfes, beschränkt werden. Das Matrixelement lautet

$$\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 = M_{LA}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \sqrt{q_z^2 + q_{\parallel}^2} |F(q_z)|^2 \quad (3.44)$$

mit dem Überlappintegral $F(q_z)$ aus Gl. (3.42).

3.3.3 Volumenmaterial/Quantenfilm

Zur Berechnung der Matrixelemente der Streuung von Elektronen zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm wird wiederum von Gl. (3.35) ausgegangen, wobei λ und λ' nun verschiedene Quantenzahlen darstellen. Dementsprechend haben sowohl die Modellierung des Quantenfilmes als endlich oder unendlich tiefer Potentialtopf als auch die Wahl von ebenen Wellen oder orthogonalisierten ebenen Wellen Einfluss auf die Rechnung. Es sollen jedoch an dieser Stelle ausschließlich die Zustände $\chi^{\text{fin}}(z)$ des endlich tiefen Quantenfilmes verwendet werden.

Es ist des Weiteren zu beachten, dass prinzipiell sowohl in den kinetischen Gleichungen der 3d- ($\lambda' = n$) als auch der Quasi-2d-Zustände ($\lambda' = k_z$) entsprechende Streuterme auftreten. Wie sich allerdings zeigen lässt, leisten die Streuterme in den Gleichungen der 3d-Zustände keinen Beitrag und können daher vernachlässigt werden. Dazu betrachte man Gleichung (3.35) für den Fall, dass $|\mathbf{k}\rangle$ die 3d- und $|\mathbf{k}'\rangle$ die Quasi-2d-Zustände bezeichnet. Dann gilt im thermodynamischen Limes:

$$\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \frac{L}{2\pi} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(q_z, \mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_n \frac{L^2}{(2\pi)^2} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \frac{L}{2\pi} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(q_z, \mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (3.45)$$

Die Matrixelemente $\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2$ enthalten mit M_{LO}^2 bzw. M_{LA}^2 einen Faktor $\frac{1}{V}$ und durch den Beitrag der 3d-Zustände im Überlapp einen Faktor $\frac{1}{L}$. Da es nur eine geringe Zahl von diskreten, in z -Richtung gebundenen Zuständen im Quantenfilm gibt, kann die Summe über n nicht in ein Integral überführt werden und liefert somit keinen Faktor $\frac{L}{2\pi}$. Insgesamt ist damit die zeitliche Änderung der Besetzungswahrscheinlichkeiten der 3d-Zustände durch Streuung in Quasi-2d-Zustände proportional zu $\frac{1}{L}$ und verschwindet im Grenzfall des unendlich großen Festkörpers. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten werden also durch die Anwesenheit des Quantenfilmes nicht beeinflusst. Der physikalische Grund dafür ist, dass das Volumenmaterial wegen seiner höheren Dimensionalität für den Quantenfilm wie ein Reservoir wirkt, das zwar Ladungsträger zur Verfügung stellt, seinerseits jedoch durch die Wechselwirkung keine Veränderung erfährt. Insbesondere wird die Isotropie des Volumensystemes nicht beeinträchtigt, was für die Behandlung von Summen über die 3d-Zustände von Bedeutung ist.

Es seien nun $|\mathbf{k}\rangle$ die Quasi-2d- und $|\mathbf{k}'\rangle$ die 3d-Zustände. Im Gegensatz zur Streuung im Quantenfilm wird hier grundsätzlich auf die analytische Berechnung des q_z -Integrales verzichtet und lediglich jeweils das Überlappintegral gelöst, um das Matrixelement analog zu Gl. (3.43) zu erhalten. Mit den Zuständen des endlichen Potentialtopfes und ebenen Wellen findet man für den Überlapp

$$\begin{aligned} F(q_z, k'_z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \chi^{\text{fin}}(z) e^{i(q_z - k'_z)z} \\ &= \alpha \left(\frac{e^{-L_z(\kappa + i(q_z - k'_z))/2}}{\kappa + i(q_z - k'_z)} + \frac{e^{L_z(i(q_z - k'_z) - \kappa)/2}}{\kappa - i(q_z - k'_z)} + 2 \frac{e^{-\kappa L_z/2}}{\cos(k L_z/2)} \times \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{(q_z - k'_z) \cdot \cos(k L_z/2) \cdot \sin((q_z - k'_z) L_z/2) - k \cdot \sin(k L_z/2) \cdot \cos((q_z - k'_z) L_z/2)}{(q_z - k'_z)^2 - k^2} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Man beachte, dass der Überlapp im Gegensatz zur reinen Quantenfilm-Streuung formal auch von k'_z abhängig ist. Unter Verwendung orthogonalisierter ebener Wellen lautet das Überlappintegral schließlich

$$F(q_z, k'_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \chi^{\text{fin}}(z) e^{i(q_z - k'_z)z} - \int_{-\infty}^{\infty} dz |\chi^{\text{fin}}(z)|^2 e^{i(q_z - k'_z)z} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dz \chi^{\text{fin}}(z) e^{ik'_z z}, \quad (3.47)$$

wobei in (3.47) die schon bekannten Integrale (3.42) und (3.46) eingehen. Die Matrixelemente ergeben sich dann zu

$$\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 = M_{LO}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{1}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} |F(q_z, k'_z)|^2. \quad (3.48)$$

Es lässt sich bereits anhand der Formfaktoren erkennen, dass alle folgenden Ergebnisse dramatisch von der Wahl der 3d-Zustände abhängen werden. Wie in Abb. 3.2 für $k'_z = 0$ zu sehen ist, besitzt

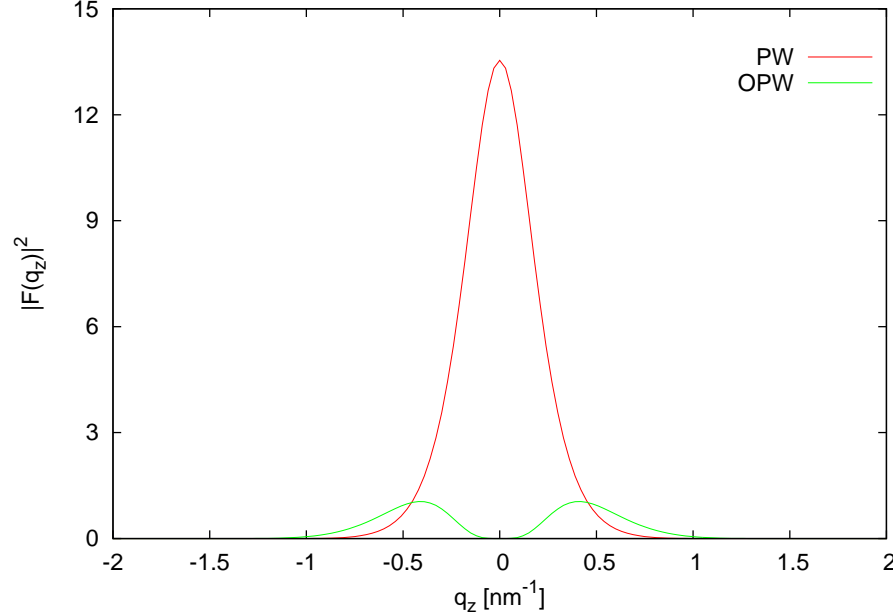


Abbildung 3.2: Formfaktoren $|F(q_z, k'_z = 0)|^2$ für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung zwischen 3d- und Quasi-2d-Zuständen unter Verwendung ebener Wellen (PW) und orthogonalisierter ebener Wellen (OPW) als 3d-Zustände zum Vergleich der beiden Näherungen (siehe Gl. (3.46) und (3.47)).

$|F(q_z, k'_z)|^2$ bei $q_z = 0$ im Fall ebener Wellen ein relativ hohes Maximum, während er bei Verwendung orthogonalisierter ebener Wellen an derselben Stelle gemäß deren Definition verschwindet. Für größere Werte von $|k'_z|$ wird allerdings der Faktor $\int_{-\infty}^{\infty} dz \chi^{\text{fin}}(z) e^{ik'_z z}$ immer kleiner, so dass die Formfaktoren in beiden Näherungen vergleichbar werden. Um die tatsächlichen Auswirkungen der Näherungen auf die Stärke der Elektron-Phonon-Wechselwirkung quantitativ zu untersuchen, müssen die Streuterme in (3.27) betrachtet werden, in welche die Formfaktoren für verschiedene Werte von k'_z mit verschiedener Gewichtung eingehen. Dies wird in Kapitel 3.4.1 geschehen. Es ist außerdem anhand von Gl. (3.48) zu erwarten, dass die Streuung zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm bei Verwendung orthogonalisierter ebener Wellen im Vergleich zur Streuung innerhalb des Quantenfilmes schwach ist: Die Formfaktoren werden in den Matrixelementen stets mit einer Lorentzfunktion multipliziert, welche gerade Werte um $q_z = 0$ stark gewichtet. Diese sind aber in ersterer Situation sehr klein, während sie in letzterer nahe 1 liegen, vgl. Abb. 3.1 und 3.2.

Letztlich werden noch die Matrixelemente für die Streuung an **akustischen** Phononen unter Verwendung orthogonalisierter ebener Wellen analog zu (3.48) angegeben:

$$\widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 = M_{LA}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \sqrt{q_z^2 + q_{\parallel}^2} |F(q_z, k'_z)|^2 \quad (3.49)$$

mit $F(q_z, k'_z)$ aus (3.47). Anders als im Falle optischer Phononen werden nun durch die Faktoren $M_{\mathbf{q}}$ im q_z -Integral große Werte von $|q_z|$ stärker gewichtet als kleine, so dass der Formfaktor (3.47) gegenüber (3.42) an Bedeutung gewinnt. Es ist also nicht zu erwarten, dass die Streuung zwischen den Teilsystemen im Vergleich zur Streuung innerhalb der Teilsysteme schwach ist.

3.4 Streuterme

Ausgehend von den Gleichungen (3.27) für die Streuung im Volumenmaterial bzw. (3.35) für die Streuung im Quantenfilm und zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm werden nun die Streuterme in den kinetischen Gleichungen der verschiedenen Teilsysteme so weit wie möglich ausformuliert und die Auswirkungen der in den vorigen Abschnitten eingeführten Näherungen diskutiert. Hierbei wird die Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen getrennt behandelt, da sich durch die verschiedenen Phononendispersionen konzeptionelle Unterschiede in der Rechnung ergeben.

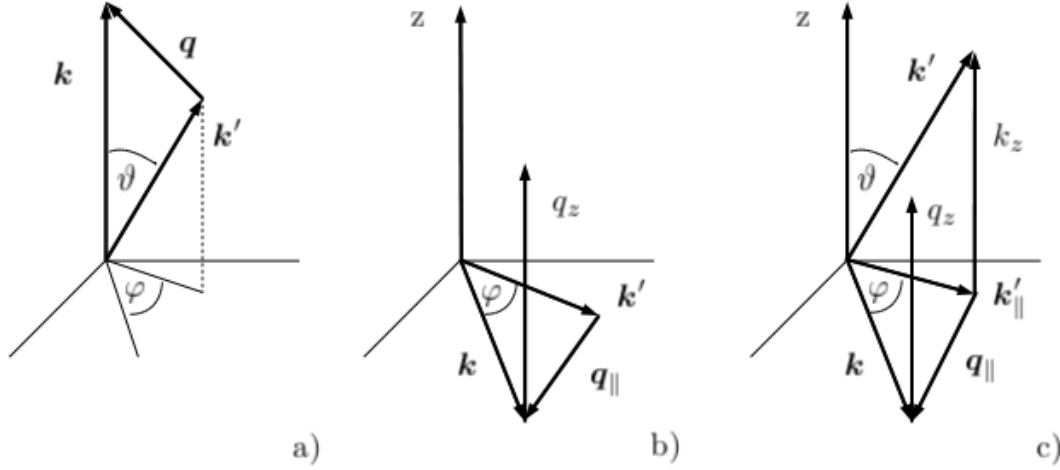


Abbildung 3.3: Geometrische Veranschaulichung der Impulserhaltung. a) Dreidimensionale Impulserhaltung im Volumenmaterial b) Planparallele Impulserhaltung im Quantenfilm, unabhängig von q_z c) Planparallele Impulserhaltung beim Übergang zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm, unabhängig von q_z und k_z

3.4.1 Optische Phononen

Volumenmaterial

Wie in Kapitel 3.3.3 gezeigt wurde, hat die Einstreuung von Elektronen aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm keinen Einfluss auf die Besetzungswahrscheinlichkeiten der 3d-Zustände, sodass in deren Bewegungsgleichungen lediglich ein Beitrag der Streuung innerhalb des Volumenmaterials eingeht. Um diesen zu berechnen, ist im Prinzip über die dreidimensionalen Wellenvektoren \mathbf{k}' zu summieren, die im thermodynamischen Limes in ein Kontinuum übergehen. Unter der Annahme einer isotropen Besetzung dieses Zustandskontinuums im \mathbf{k} -Raum kann über Kugelkoordinaten integriert werden, die verwendete Geometrie zeigt Abb. 3.3a). Mit (3.31) und (3.13) folgt dann:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} f_k &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}') g(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{k}) \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |M_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}|^2 g(k', k) \\
 &= \frac{V}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta M_{LO}^2 \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} g(k', k) \\
 &= \frac{M_{LO}^2 V}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \frac{1}{k'^2 + k^2 - 2k'k \cdot \cos\vartheta} g(k', k) \\
 &= \frac{M_{LO}^2 V}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_{-1}^1 \frac{du}{k'^2 + k^2 - 2k'ku} g(k', k) \\
 &= \frac{M_{LO}^2 V}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dk' k' \frac{1}{k} \ln \left| \frac{k + k'}{k - k'} \right| g(k', k).
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

Die weitere Rechnung erfordert die Auswertung der Delta-Distributionen, die in der Funktion $g(k', k)$ enthalten sind, wobei eine konstante Phononen- und eine quadratische Elektronendispersion angenommen werden:

$$\delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \pm \hbar\omega_{\mp q}) = \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \hbar\omega_{LO}\right) = \frac{2m}{\hbar} \delta\left(k'^2 - k^2 \pm \frac{2m\omega_{LO}}{\hbar}\right). \quad (3.51)$$

Für die Delta-Distribution gilt allgemein

$$\delta(h(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x - x_i)}{|h'(x_i)|} \quad (3.52)$$

mit einer beliebigen Funktion $h(x)$ mit endlich vielen einfachen Nullstellen x_i . Damit ist

$$\delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \pm \hbar\omega_{\mp q}) = \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{k'_{\mp}} \delta(k' - k'_{\mp}). \quad (3.53)$$

Die $k'_{\mp} = \sqrt{k^2 \mp \frac{2m\omega_{LO}}{\hbar}}$ entsprechen dabei den elektronischen Zuständen, die um eine Phononenenergie E_{LO} unterhalb bzw. oberhalb des Zustandes $|k\rangle$ liegen. Die exakte Energieerhaltung, die aus der Markov-Näherung folgt, zusammen mit der als konstant angenommenen Phonondispersion sorgt also dafür, dass Elektronen durch die Wechselwirkung mit optischen Phononen aus jedem Zustand in genau zwei andere Zustände gestreut werden können. Einsetzen in (3.50) liefert unter Verwendung der Definition der Delta-Distribution, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k = \frac{V \cdot m}{2\pi\hbar^3} & \left[\left((1 - f_k) f_{k'_+} (1 + n_q) - f_k (1 - f_{k'_+}) n_q \right) W_+^{3d}(k) \right. \\ & \left. + \left((1 - f_k) f_{k'_-} n_{-q} - f_k (1 - f_{k'_-}) (1 + n_{-q}) \right) W_-^{3d}(k) \Theta(k'_-) \right] \end{aligned} \quad (3.54)$$

mit den Wechselwirkungsfaktoren

$$W_{\pm}^{3d}(k) = M_{LO}^2 \frac{1}{k} \ln \left| \frac{k + k'_{\pm}}{k - k'_{\pm}} \right|. \quad (3.55)$$

Sie legen bei gegebener Gittertemperatur die Raten fest, mit denen die Ein- und Ausstreuung von Elektronen in bzw. aus dem Zustand $|k\rangle$ erfolgt. Für verschwindendes k existiert der Grenzwert

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{k'_+}{k} \ln \left| \frac{k + k'_+}{k - k'_+} \right| = 2.$$

Die Θ -Funktion entspricht der Tatsache, dass es für Zustände $|k\rangle$ mit einer Energie unterhalb E_{LO} keinen Zustand $|k'_-\rangle$ gibt, mit dem sie wechselwirken können.

Quantenfilm

Die Bewegungsgleichungen der Quasi-2d-Zustände bestehen aus zwei Beiträgen, dem der Streuung innerhalb des Quantenfilmes und dem der Einstreuung aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm. Den ersten Beitrag erhält man prinzipiell durch Summation über die Subbänder des Quantentopfes, also die gebundenen Zustände $|n\rangle$ in z-Richtung, und die zweidimensionalen Wellenvektoren \mathbf{k}' . Diese wird wiederum ersetzt durch eine Integration über Polarkoordinaten gemäß Abb. 3.3b). Die

Auswertung der Delta-Distributionen erfolgt völlig analog zum dreidimensionalen Fall.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}f_k &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_n \sum_{\mathbf{k}'} \frac{L}{2\pi} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk' k' \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{L}{2\pi} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(k', k) \\
&= \frac{V \cdot m}{(2\pi)^2 \hbar^3} \left[\left((1 - f_k) f_{k'_+} (1 + n_q) - f_k (1 - f_{k'_+}) n_q \right) W_+^{2d}(k) \right. \\
&\quad \left. + \left((1 - f_k) f_{k'_-} n_{-q} - f_k (1 - f_{k'_-}) (1 + n_{-q}) \right) W_-^{2d}(k) \Theta(k'_-) \right]
\end{aligned} \tag{3.56}$$

$$\text{mit } k'_\pm = \sqrt{k^2 \pm \frac{2m\omega_{LO}}{\hbar}} \quad \text{und} \quad W_\pm^{2d}(k) = \int_0^{2\pi} d\varphi \widetilde{M}_{\mathbf{k}'_\pm}^2. \tag{3.57}$$

Auch im zweidimensionalen Fall wechselwirkt jeder elektronische Zustand mit je einem um E_{LO} höher und einem um E_{LO} tiefer liegenden Zustand, wobei die Stärke der Wechselwirkung nun durch die Faktoren $W_\pm^{2d}(k)$ festgelegt ist. In diese gehen, je nach verwendeter Näherung, die Matrixelemente (3.40), (3.41) oder (3.43) ein. Sie sind von der planparallelen Komponente des Phononenimpulses

$$q_\parallel = \sqrt{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} = \sqrt{k'^2 + k^2 - 2k'k \cdot \cos\varphi}$$

abhängig und müssen daher unter dem φ -Integral stehen. Die Integration kann jedoch in keinem der Fälle analytisch ausgeführt werden.

Zur Berechnung des zweiten Beitrages ist wieder über die dreidimensionalen Vektoren \mathbf{k}' zu summieren, wobei die Matrixelemente (3.48) mit den Formfaktoren (3.46) bzw. (3.47) einzusetzen sind. Diese sind sowohl von

$$q_\parallel = \sqrt{(\mathbf{k}'_\parallel - \mathbf{k})^2} \quad \text{mit} \quad k_\parallel = k' \cdot \sin\vartheta$$

als auch von $k'_z = k' \cdot \cos\vartheta$ abhängig (siehe Abb. 3.3c)).

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}f_k &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{L}{2\pi} \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \\
&= \frac{V \cdot L}{(2\pi)^3 \hbar} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \widetilde{M}_{\mathbf{k}'}^2 g(k', k)
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Die Delta-Distributionen sind wie gewohnt auszuwerten, enthalten jedoch zusätzliche Energiebeiträge durch die unterschiedliche Lage der Energienullpunkte beider Teilsysteme, siehe dazu auch Abb. 2.4c):

$$\begin{aligned}
\delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \pm \hbar\omega_{\mp q}) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^{3d}} + V_0 - \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^{2d}} + E^{QW}\right) \pm \hbar\omega_{LO}\right) \\
&= \frac{2m^{3d}}{\hbar^2} \delta\left(k'^2 - \frac{m^{3d}}{m^{2d}} k^2 + \frac{2m^{3d}}{\hbar^2} (V_0 - E^{QW} \pm \hbar\omega_{LO})\right) \\
&= \frac{m^{3d}}{\hbar^2} \frac{1}{k'_\mp} \delta(k' - k'_\mp) \\
\text{mit } k'_\mp &= \sqrt{\frac{m^{3d}}{m^{2d}} k^2 - \frac{2m^{3d}}{\hbar^2} (V_0 - E^{QW} \pm \hbar\omega_{LO})}.
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Es sind also nur solche Quasi-2d-Zustände durch Streuung aus 3d-Zuständen erreichbar, die um weniger als eine Phononenergie unterhalb der GaAs-Bandkante liegen. Einsetzen in (3.58) ergibt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}f_k &= \frac{V \cdot L \cdot m}{(2\pi)^3 \hbar^3} \left[\left((1 - f_k) f_{k'_+} (1 + n_q) - f_k (1 - f_{k'_+}) n_q \right) W_+^{2d,3d}(k) \right. \\
&\quad \left. + \left((1 - f_k) f_{k'_-} n_{-q} - f_k (1 - f_{k'_-}) (1 + n_{-q}) \right) W_-^{2d,3d}(k) \Theta(k'_-) \right]
\end{aligned} \tag{3.60}$$

mit den Wechselwirkungsfaktoren

$$W_{\pm}^{2d,3d}(k) = k'_{\pm} \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \widetilde{M}_{k_{\pm}}^2. \quad (3.61)$$

Anhand dieser Faktoren kann direkt der Einfluss der Matrixelemente auf die Streuraten zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm und somit, wie in Kapitel 3.3.3 erwähnt, die Güte der Ebene-Wellen-Näherung für die 3d-Zustände beurteilt werden. Abb. 3.4 zeigt dazu ihren Verlauf bei Verwendung von ebenen Wellen sowie von orthogonalisierten ebenen Wellen.

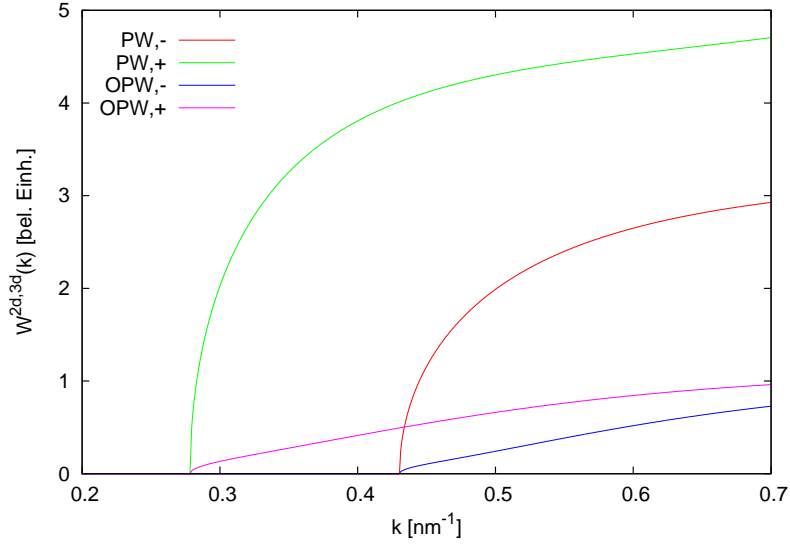


Abbildung 3.4: Wechselwirkungsfaktoren $W_{\pm}^{2d,3d}(k)$ für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung zwischen 3d- und Quasi-2d-Zuständen unter Verwendung ebener Wellen (PW) und orthogonalisierter ebener Wellen (OPW) als 3d-Zustände zum Vergleich der beiden Näherungen.

Offenbar werden die Streuraten bei Verwendung ebener Wellen aufgrund des größeren Überlapps wie erwartet stark überschätzt. Aus diesem Grund sollen in allen folgenden Rechnungen ausschließlich orthogonalisierte ebene Wellen zum Einsatz kommen.

Die Verwendung ebener Wellen kann außerdem neben der Überschätzung der Streuraten zu einem weiteren Problem führen, das aus der Singularität des Matrixelementes bei $q = 0$ resultiert. Die entsprechende Wechselwirkung ohne Impulsübertrag mit optischen Phononen kommt innerhalb der Teilsysteme nicht vor, da dort die Wellenvektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' stets verschiedene Längen besitzen und somit der Vektor \mathbf{q} im Volumenmaterial bzw. seine planparallele Komponente q_{\parallel} im Quantenfilm nicht verschwinden können, siehe auch Abb. 3.3a) und b). Wie man an Gl. (3.59) erkennt, gibt es jedoch Fälle, in denen dies bei der Streuung zwischen den Teilsystemen nicht gegeben ist; Wegen der verschiedenen Energienullpunkte der 3d- und der Quasi-2d-Zustände sind für niedrige Energien die Impulse k der Quantenfilm-Elektronen größer als die entsprechenden 3d-Impulse k'_{\pm} . Ist die Elektronenmasse im Volumenmaterial größer als im Quantenfilm, so wachsen die 3d-Impulse schneller mit der Energie an und übertreffen ab einer bestimmten Energie die Quasi-2d-Impulse. Dann gibt es für $\varphi = 0$ zu jedem Impuls k'_{\pm} einen Winkel ϑ , so dass die planparallele Komponente des Phononenimpulses verschwindet, siehe Abb. 3.3c). Mit den hier verwendeten Parametern geschieht dies ab etwa $k = 0.8 \text{ nm}^{-1}$. Im Grenzfall $q_z \rightarrow 0$ divergiert dann das Matrixelement (3.48), sofern der Überlapp $F(q_z)$ dort endlich ist. Dieses unphysikalische Verhalten wird durch die korrekte Verwendung orthogonaler Quasi-2d- und 3d-Zustände vermieden, wovon man sich durch Betrachtung des Grenzwertes

$$\lim_{q_z \rightarrow 0} \frac{1}{q_z^2} |F(q_z, k'_z)|^2$$

überzeugt.

3.4.2 Akustische Phononen

Volumenmaterial

Mit dem Matricelement (3.31) und dem Faktor (3.12) lauten die Streuterme für die Streuung innerhalb des Volumenmaterials

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}f_k &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} M_{LA}^2 |\mathbf{q}| g(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi M_{LA}^2 |\mathbf{q}| g(k', k), \end{aligned} \quad (3.62)$$

wobei zur Abkürzung der Schreibweise die Impulserhaltung $|\mathbf{q}| = \sqrt{k'^2 + k^2 - 2k'k \cdot \cos\vartheta}$ verwendet wird. Man beachte, dass nun die Phononendispersion ω_q von $|\mathbf{q}|$ abhängig ist. Für die Auswertung der Delta-Distributionen müssen dementsprechend sowohl Energie- als auch Impulserhaltung explizit beachtet werden:

$$\begin{aligned} \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \pm \hbar\omega_{\mp q}) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \hbar c_{LA} |\mathbf{q}|\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \delta\left(k'^2 - k^2 \pm \frac{2mc_{LA}}{\hbar} \sqrt{k'^2 + k^2 - 2k'k \cdot \cos\vartheta}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \left| 2k'_{\mp} \pm \frac{2mc_{LA}}{\hbar} \frac{k'_{\mp} - k \cdot \cos\vartheta}{\sqrt{k'^2_{\mp} + k^2 - 2k'_{\mp}k \cdot \cos\vartheta}} \right|^{-1} \delta(k' - k'_{\mp}). \end{aligned} \quad (3.63)$$

In der dritten Zeile wurde die Relation (3.52) verwendet. Die Wellenzahlen k'_{\pm} der energetisch höher bzw. niedriger liegenden Streupartner ergeben sich aus der Energie- und Impulserhaltung als Lösungen der Gleichung

$$k'^2_{\pm} - k^2 \mp \frac{2mc_{LA}}{\hbar} \sqrt{k'^2_{\pm} + k^2 - 2k'_{\pm}k \cdot \cos\vartheta} = 0 \quad (3.64)$$

und sind damit Funktionen von k und ϑ . Jeder elektronische Zustand $|k\rangle$ wechselwirkt also nicht mehr nur mit jeweils zwei anderen Zuständen, sondern mit einem Kontinuum von Zuständen aus zwei Intervallen, die energetisch oberhalb bzw. unterhalb von $|k\rangle$ liegen und im Zuge der Integration über ϑ durchlaufen werden. Dabei ist die Stärke der Wechselwirkung vom wechselwirkenden Zustand $|k'\rangle$ abhängig. Setzt man dieses Resultat in (3.62) ein und erweitert mit $|\mathbf{q}(k'_{\pm})|$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}f_k &= \frac{V \cdot m}{2\pi \hbar^3} M_{LA}^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \times \\ &\left[k'^2_{+} \frac{|\mathbf{q}(k'_{+})|^2}{\left| k'_{+} |\mathbf{q}(k'_{+})| - \frac{mc_{LA}}{\hbar} (k'_{+} - k \cdot \cos\vartheta) \right|} \cdot ((1 - f_k) f_{k'_{+}} (1 + n_q) - f_k (1 - f_{k'_{+}}) n_q) + \right. \\ &\left. k'^2_{-} \frac{|\mathbf{q}(k'_{-})|^2}{\left| k'_{-} |\mathbf{q}(k'_{-})| + \frac{mc_{LA}}{\hbar} (k'_{-} - k \cdot \cos\vartheta) \right|} \cdot ((1 - f_k) f_{k'_{-}} n_{-q} - f_k (1 - f_{k'_{-}}) (1 + n_{-q})) \Theta(k'_{-}) \right]. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten n_q der Phononenmoden sind ebenfalls von $|\mathbf{q}|$ und damit vom jeweiligen Zustand $|k'\rangle$ abhängig:

$$n_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar c_{LA} |\mathbf{q}|} - 1} \quad \text{mit} \quad |\mathbf{q}| = \sqrt{k'^2_{\pm} + k^2 - 2k'_{\pm}k \cdot \cos\vartheta}. \quad (3.66)$$

Quantenfilm

Für die Streuung an akustischen Phononen im Quantenfilm gestaltet sich die Rechnung komplizierter,

da sich die Impulserhaltung in diesem Fall auf die x-y-Ebene beschränkt, $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, und in $|\mathbf{q}|$ zusätzlich q_z als Variable eingeht:

$$|\mathbf{q}| = \sqrt{q_z^2 + k'^2 + k^2 - 2k'k \cdot \cos\varphi}. \quad (3.67)$$

Die Streuterme lauten mit dem Matricelement (3.44) und dem Überlapp (3.42)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}f_k &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z M_{LA}^2 |\mathbf{q}| |F(q_z)|^2 g(q_z, \mathbf{k}', \mathbf{k}) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^{\infty} dk' k' \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} dq_z M_{LA}^2 |\mathbf{q}| |F(q_z)|^2 g(q_z, k', k). \end{aligned} \quad (3.68)$$

Energie- und Impulserhaltung ergeben

$$\begin{aligned} \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \pm \hbar\omega_{\mp q}) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \hbar c_{LA} |\mathbf{q}|\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \delta\left(k'^2 - k^2 \pm \frac{2mc_{LA}}{\hbar} \sqrt{q_z^2 + k'^2 + k^2 - 2k'k \cdot \cos\varphi}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \left| 2k'_{\mp} \pm \frac{2mc_{LA}}{\hbar} \frac{k'_{\mp} - k \cdot \cos\varphi}{\sqrt{q_z^2 + k'^2 + k^2 - 2k'_{\mp}k \cdot \cos\varphi}} \right|^{-1} \delta(k' - k'_{\mp}), \end{aligned} \quad (3.69)$$

wo die k'_{\pm} jeweils Lösungen der Gleichung

$$k'_{\pm}^2 - k^2 \mp \frac{2mc_{LA}}{\hbar} \sqrt{q_z^2 + k'_{\pm}^2 + k^2 - 2k'_{\pm}k \cdot \cos\varphi} = 0$$

und damit Funktionen von k , φ und q_z sind. Sie bilden wie im dreidimensionalen Fall ein Kontinuum, das bei Integration über φ und q_z durchlaufen wird, sind jedoch wegen der Variable q_z nur noch nach unten ($k'_+ > k$) bzw. nach oben ($k'_- < k$) durch die Energieerhaltung beschränkt. Es kann also jeder elektronische Zustand im Quantenfilm mit jedem anderen Zustand über akustische Phononen wechselwirken. Eingeschränkt wird diese Wechselwirkung allerdings durch das Auftreten des Formfaktors $|F(q_z)|^2$ in den Streutermen, der für große q_z sehr schnell abfällt (siehe Abb. 3.1), während alle anderen Beiträge höchstens linear mit q_z ansteigen. Gl. (3.68) wird damit zu

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}f_k &= \frac{V \cdot m}{(2\pi)^2 \hbar^3} M_{LA}^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} dq_z |F(q_z)|^2 \times \\ &\left[k'_+ \frac{|\mathbf{q}(k'_+)|^2}{\left| k'_+ |\mathbf{q}(k'_+)| - \frac{mc_{LA}}{\hbar} (k'_+ - k \cdot \cos\varphi) \right|} \cdot ((1 - f_k) f_{k'_+} (1 + n_q) - f_k (1 - f_{k'_+}) n_q) + \right. \\ &\left. k'_- \frac{|\mathbf{q}(k'_-)|^2}{\left| k'_- |\mathbf{q}(k'_-)| + \frac{mc_{LA}}{\hbar} (k'_- - k \cdot \cos\varphi) \right|} \cdot ((1 - f_k) f_{k'_-} n_{-q} - f_k (1 - f_{k'_-}) (1 + n_{-q})) \Theta(k'_-) \right]. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten n_q der Phononenmoden sind wiederum von den jeweiligen streuenden Zuständen $k'_{\pm}(k, \varphi, q_z)$ abhängig:

$$n_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar c_{LA} |\mathbf{q}|} - 1} \quad \text{mit} \quad |\mathbf{q}| = \sqrt{q_z^2 + k'^2_{\pm} + k^2 - 2k'_{\pm}k \cdot \cos\varphi}. \quad (3.71)$$

Wie im Falle der Streuung an optischen Phononen existiert ein zweiter Beitrag zu den Bewegungsgleichungen der Quasi-2d-Zustände, der der Wechselwirkung mit den 3d-Zuständen des Volumenmaterials entspricht. Die zugehörige Rechnung ist noch einmal komplizierter als jene für den ersten Beitrag, da nun über dreidimensionale Vektoren \mathbf{k}' summiert wird, deren z-Komponente zudem nicht in die Impulserhaltung eingeht:

$$|\mathbf{q}| = \sqrt{q_z^2 + k'^2_{\parallel} + k^2 - 2k'_{\parallel}k \cdot \cos\varphi} \quad \text{mit} \quad k'_{\parallel} = k' \cdot \sin\vartheta. \quad (3.72)$$

Mit dem Matricelement (3.49) und dem Überlapp (3.47) ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}f_k &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z M_{LA} |\mathbf{q}| |F(q_z, k'_z)|^2 g(q_z, \mathbf{k}', \mathbf{k}) \\ &= \frac{V \cdot L}{(2\pi)^3 \hbar} \int_0^{\infty} dk' k'^2 \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} dq_z M_{LA}^2 |\mathbf{q}| |F(q_z, k'_z)|^2 g(q_z, k', k)\end{aligned}\quad (3.73)$$

und aus der Auswertung der Delta-Distributionen folgt (siehe Gl. (3.59))

$$\begin{aligned}& \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \pm \hbar\omega_{\mp q}) \\ &= \frac{2m^{3d}}{\hbar^2} \delta\left(k'^2 - \frac{m^{3d}}{m^{2d}}k^2 + \frac{2m^{3d}}{\hbar^2} \left(V_0 - E^{QW} \pm \hbar c_{LA} \sqrt{q_z^2 + k_{\parallel}^{\prime 2} + k^2 - 2k'_{\parallel} k \cdot \cos\varphi}\right)\right) \\ &= \frac{2m^{3d}}{\hbar^2} \left| 2k'_{\mp} \pm \frac{2m^{3d} c_{LA}}{\hbar} \frac{k'_{\mp} \cdot \sin^2\vartheta - k \cdot \sin\vartheta \cdot \cos\varphi}{\sqrt{q_z^2 + k_{\mp, \parallel}^{\prime 2} + k^2 - 2k'_{\mp, \parallel} k \cdot \cos\varphi}} \right|^{-1} \delta(k' - k'_{\mp}),\end{aligned}\quad (3.74)$$

wobei bei der Anwendung von (3.52) zu beachten ist, dass $k'_{\parallel} = k' \cdot \sin\vartheta$. Die Wellenzahlen k'_{\pm} haben wiederum Energie- und Impulserhaltung zu erfüllen, abhängig von k , φ , ϑ und q_z . Man erhält damit als zweiten Beitrag

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}f_k &= \frac{V \cdot L \cdot m^{3d}}{(2\pi)^3 \hbar^3} M_{LA}^2 \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \times \\ &\left[k_+^{\prime 2} \frac{|\mathbf{q}(k'_+)|^2 |F(q_z, k'_{+,z})|^2}{\left| k'_+ |\mathbf{q}(k'_+)| - \frac{m^{3d} c_{LA}}{\hbar} (k'_+ \sin^2\vartheta - k \cdot \sin\vartheta \cdot \cos\varphi) \right|} \cdot ((1 - f_k) f_{k'_+} (1 + n_q) - f_k (1 - f_{k'_+}) n_q) + \right. \\ &\left. k_-^{\prime 2} \frac{|\mathbf{q}(k'_-)|^2 |F(q_z, k'_{-,z})|^2}{\left| k'_- |\mathbf{q}(k'_-)| + \frac{m^{3d} c_{LA}}{\hbar} (k'_- \sin^2\vartheta - k \cdot \sin\vartheta \cdot \cos\varphi) \right|} \cdot ((1 - f_k) f_{k'_-} n_{-q} - f_k (1 - f_{k'_-}) (1 + n_{-q})) \Theta(k'_-) \right]\end{aligned}\quad (3.75)$$

mit den phononischen Besetzungswahrscheinlichkeiten

$$n_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar c_{LA} |\mathbf{q}|} - 1} \quad \text{mit} \quad |\mathbf{q}| = \sqrt{q_z^2 + k_{\pm, \parallel}^{\prime 2} + k^2 - 2k'_{\pm, \parallel} k \cdot \cos\varphi}.\quad (3.76)$$

Kapitel 4

Anwendung

In diesem Kapitel werden die zuvor hergeleiteten kinetischen Gleichungen in Markov-Näherung dazu verwendet, die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion f_k numerisch zu untersuchen. Dies wird im ersten Abschnitt auf die relativ übersichtliche Situation getrennter Teilsysteme beschränkt und im zweiten Abschnitt auf das gekoppelte System aus Volumenmaterial und Quantenfilm ausgeweitet. Die hierbei verwendeten Anfangsverteilungen der Elektronen und die durch das Phononenreservoir vorgegebenen Gittertemperaturen werden jeweils in den Abschnitten angegeben, alle weiteren Parameter sind in Abschnitt A.1 im Anhang enthalten. Ebenfalls im Anhang findet sich zudem eine Erläuterung der verwendeten numerischen Methoden.

4.1 Streuung innerhalb der Teilsysteme

In diesem Abschnitt soll zunächst die Streuung von Elektronen an optischen und akustischen Phononen innerhalb des Volumenmaterials und des Quantenfilmes getrennt untersucht werden. Dies dient dazu, die grundlegenden Streuvorgänge zu erläutern sowie die Effizienz der verschiedenen Streumechanismen innerhalb der beiden Teilsysteme miteinander zu vergleichen. Dabei wird außerdem auf die Auswirkungen der im vorigen Kapitel eingeführten Näherungen für die Wechselwirkungs-Matrixelemente der optischen Phononen im Quantenfilm eingegangen.

4.1.1 Wechselwirkung mit optischen Phononen

Als erstes wird die zeitliche Entwicklung der elektronischen Besetzungswahrscheinlichkeiten innerhalb der Teilsysteme unter Einfluss der Streuung an optischen Phononen untersucht. Da in diesem Fall nur solche Zustände miteinander wechselwirken, die um eine Phononenenergie voneinander entfernt liegen, wird zur Berechnung ein energieäquidistantes Gitter gewählt.

Zu Beginn seien die Teilsysteme jeweils zu einer gaussförmigen Nichtgleichgewichtsverteilung angeregt, wie sie näherungsweise mit einem optischen Puls erzeugt werden kann. Die Elektronendichten $n_{3d} = 10^{17} \text{cm}^{-3}$ und $n_{2d} = 5.95 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$ sind zeitlich konstant und durch

$$n = \int dE D(E) f(E, t) \quad (4.1)$$

gegeben, wobei die Zustandsdichten $D(E)$ in Kapitel 2.2.1 eingeführt wurden und $f(E, t)$ die zu bestimmenden Verteilungsfunktionen darstellen.

Volumenmaterial

Zunächst wird die Streuung von Elektronen in einem reinen GaAs-Volumensystem betrachtet. Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ zeigt Abb. 4.1. Es ist die bekannte Struktur aus Replika der Anfangsverteilung zu erkennen, welche eine Folge der Wechselwirkung zwischen Zuständen mit energetischem Abstand von exakt einer optischen Phononenenergie ist, siehe auch [23] und [24]. Die relative Häufigkeit der beiden fundamentalen Prozesse, der Absorption und Emission von Phononen, ist gegeben durch das Verhältnis $n_q/(1 + n_q)$ und damit von der Gittertemperatur abhängig.

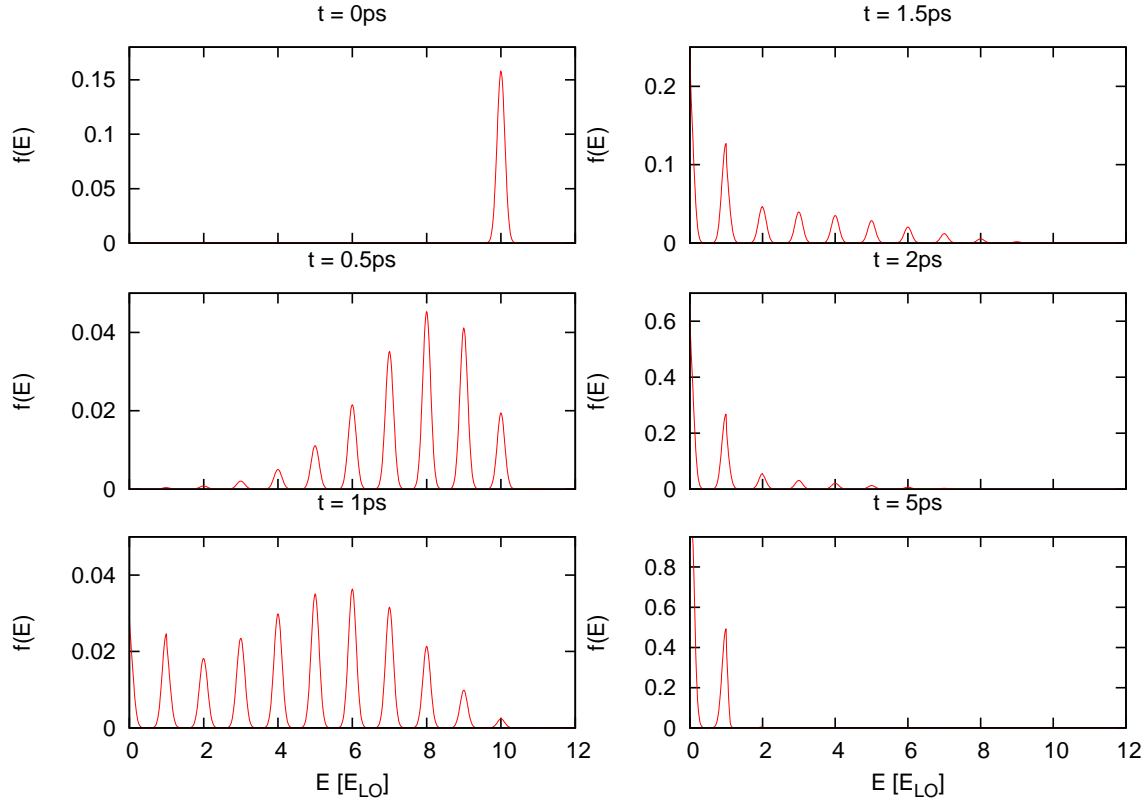


Abbildung 4.1: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im GaAs-Volumenmaterial bei einer Temperatur $T = 77\text{K}$ und einer Elektronendichte $n_{3d} = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ unter Streuung an optischen Phononen. Die Anfangsverteilung ist eine Gauss-Verteilung mit einer Halbwertsbreite von 9meV um $10E_{LO}$. Ein Elektron in einem bestimmten Zustand kann jeweils mittels Absorption oder Emission eines optischen Phonons in genau einen höheren bzw. tieferen Zustand gestreut werden, wobei diese Zustände exakt eine Phononenenergie entfernt liegen (siehe Kapitel 3.4.1). Dadurch entstehen Replika der Anfangsverteilung. Wegen der Beschränkung auf optische Phononen und der Rechnung in Markov-Näherung bleiben Zustände besetzt, die um weniger als eine Phononenenergie oberhalb des Energieminimums liegen, obgleich niedrigere Zustände frei sind, siehe auch die Erläuterung im Text.

Bei endlichen Temperaturen werden als Folge der spontanen Emission (entsprechend dem Summanden 1 im Faktor $(1 + n_q)$) stets mehr Phononen emittiert als absorbiert, weshalb das System gegen einen Gleichgewichtszustand mit niedrigerer Gesamtenergie strebt. Für die hier angenommene niedrige Temperatur von 77K ist $n_q = 0.0044 \ll 1$ und daher der Beitrag der Absorption sehr klein. In dem sogenannten detaillierten Gleichgewicht, das nach weniger als 5ps überwiegend durch spontane Emission von Phononen erreicht wird, wiegen sich für jeden elektronischen Zustand Ein- und Ausstreuung gerade auf. Es stellt allerdings kein thermisches Gleichgewicht dar. Der Grund hierfür ist die als konstant angenommene Dispersion der optischen Phononen zusammen mit der in Markov-Näherung exakten Energieerhaltung. Sie bewirken, dass für Elektronen, deren Energie geringer ist als eine Phononenenergie E_{LO} , kein Zustand existiert, in den sie relaxieren können und daher Relikte in der Verteilung bestehen bleiben. Es ist nicht zu erwarten, dass sich dieses Bild durch den Verzicht auf die Annahme einer konstanten Dispersion wesentlich verändern würde; Aufgrund der $\frac{1}{q^2}$ -Abhängigkeit der Matrixelemente werden große Wellenzahlen q so gering gewichtet, dass sich die tatsächlich vorhandene Dispersion der LO-Phononen kaum auswirkt. Die Berücksichtigung von Gedächtniseffekten würde im vorliegenden Fall relativ langsamer Dynamik lediglich zu einer leichten Aufweichung der Replika führen, erst die Annahme einer endlichen Lebensdauer der Zustände sorgt für eine thermische Verteilung der Elektronen. Keiner der beiden Effekte verursacht jedoch eine signifikante Abweichung

bei der Relaxationszeit [23]. Einen größeren Einfluss auf diese haben vermutlich Systemparameter wie die Tiefe und Breite des Potentialtopfes.

Wie man außerdem in Abb. 4.1 sieht, ist die Besetzungswahrscheinlichkeit der Zustände im Gleichgewicht im Vergleich zur Anfangsverteilung stark erhöht. Dies entspricht der Tatsache, dass die Zustandsdichte im Volumenmaterial für $k \rightarrow 0$ verschwindet und die Elektronendichte (4.1) erhalten bleibt.

Zur weiteren Veranschaulichung der Tatsache, dass das System gegen eine Gleichgewichtsverteilung mit niedrigerer Gesamtenergie strebt, sowie zur Abschätzung der dafür notwendigen Zeit, wird eine effektive Temperatur T_{eff} der Verteilung $f(E, t)$ eingeführt. Sie soll der Temperatur einer Fermi-Verteilung mit der gleichen inneren Energie

$$U(t) = \int dE D(E) f(E, t) E \quad (4.2)$$

und Elektronendichte (4.1) wie $f(E, t)$ entsprechen. Es ist also zu erwarten, dass sich T_{eff} im Falle einer Relaxation des Systems in ein thermisches Gleichgewicht der Gittertemperatur T_{lat} annähert. Man beachte, dass in der statistischen Physik einer Verteilung, die sich nicht im thermischen Gleichgewicht befindet, keine Temperatur zugeordnet werden kann. Die oben definierte effektive Temperatur kann demnach lediglich als weitere Hilfsgröße zur Beschreibung des Systemes aufgefasst werden, nicht jedoch als Temperatur im eigentlichen Sinne.

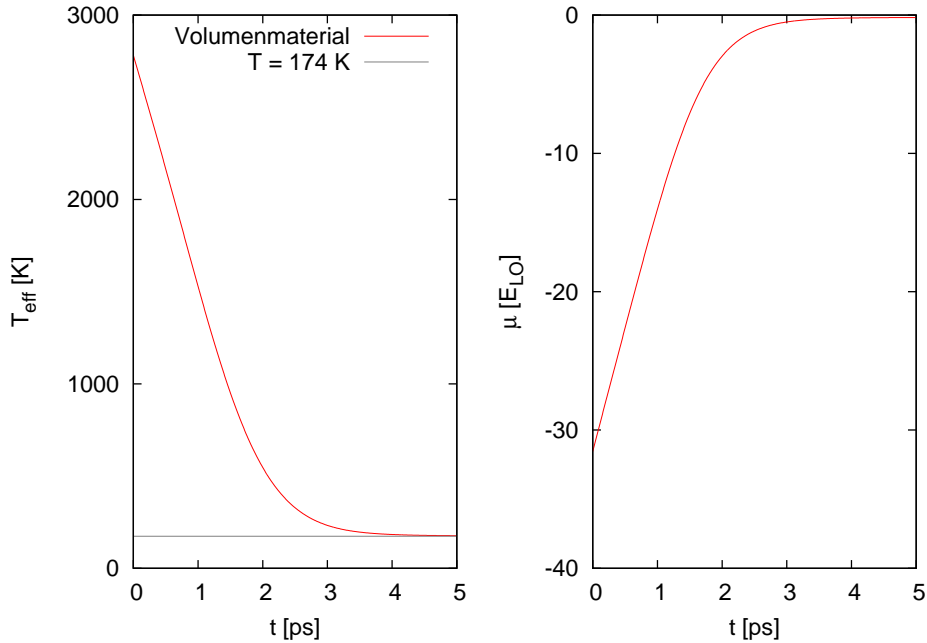


Abbildung 4.2: Zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur T_{eff} und des chemischen Potentials μ des GaAs-Volumensystemes unter Wechselwirkung mit optischen Phononen bei einer gaussförmigen Anfangsverteilung um $10E_{LO}$ der Halbwertsbreite 9meV. Die effektive Temperatur fällt zunächst linear ab, um nach etwa 1.5ps zu einem näherungsweise exponentiellen Abklingen überzugehen. Die Relaxationszeit-Näherung (siehe Text) ist also nur für nicht zu große Anregungen des Systems annehmbar. Wegen der Beschränkung auf optische Phononen relaxiert das System nicht vollständig in ein thermisches Gleichgewicht, daher erreicht es nicht die Gittertemperatur von 77K, sondern verbleibt bei etwa 174K. Das chemische Potential strebt in analoger Weise von negativen Energien zu einem Wert nahe 0.

Ein einfacher Ansatz zur Beschreibung der Relaxation ist die *Relaxationszeit-Näherung*, in der man annimmt, dass die Rate der Relaxation des Systemes gegen den Gleichgewichtszustand der Größe

der Nichtgleichgewichtsbesetzung proportional ist [12]. Dies gilt dann ebenso für die Abnahme der effektiven Temperatur,

$$\frac{dT_{\text{eff}}}{dt} = -\frac{T_{\text{eff}} - T_{\text{lat}}}{\tau}, \quad (4.3)$$

und hat ein exponentielles Abklingen derselben innerhalb der charakteristischen Relaxationszeit τ zur Folge. Die Güte der Näherung soll in diesem Abschnitt für den Fall der Streuung an optischen Phononen und in Kapitel 4.2.2 unter Hinzunahme der Streuung an akustischen Phononen überprüft werden. Die zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur des Volumensystemes ist in Abb. 4.2 zu sehen.

Quantenfilm

Um das Verhalten des InGaAs-Quantenfilmsystems mit dem des GaAs-Volumensystems bei Streuung an optischen Phononen zu vergleichen, wird nun die zeitliche Entwicklung des ersteren betrachtet. Dies soll, wie in Kapitel 3.3.2 bereits erwähnt, unter Verwendung von drei verschiedenen Näherungen für die Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Quantenfilm geschehen.

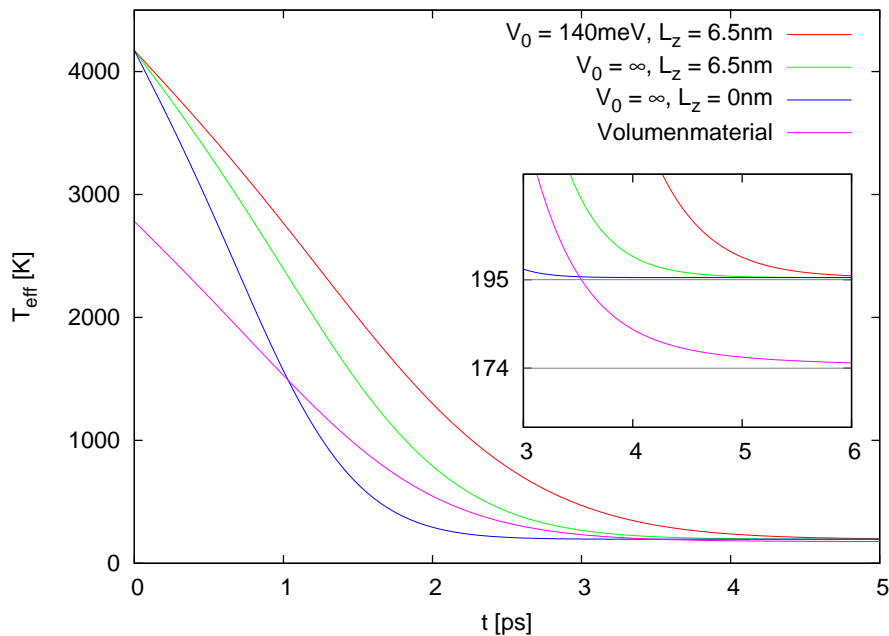


Abbildung 4.3: Zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur T_{eff} des InGaAs-Quantenfilmsystems unter Verwendung von drei verschiedenen Näherungen für die Wechselwirkungs-Matrixelemente mit optischen Phononen, Gl. (3.40) ($V_0 = \infty, L_z = 0\text{nm}$), Gl. (3.41) ($V_0 = \infty, L_z = 6.5\text{nm}$) und Gl. (3.43) ($V_0 = 140\text{meV}, L_z = 6.5\text{nm}$). Zum Vergleich ist die Entwicklung der Temperatur im Volumensystem aufgetragen. Die Anfangsverteilung ist jeweils eine Gauss-Verteilung der Halbwertsbreite 9meV um $10E_{LO}$.

In der Näherung des unendlich tiefen und schmalen Potentialtopfes ($V_0 = \infty, L_z = 0\text{nm}$) erfolgt die Relaxation am schnellsten, in der des endlichen Potentialtopfes am langsamsten. In der mittleren Näherung ist sie vergleichbar mit der des Volumensystems. Die effektive Temperatur strebt im Quantenfilm gegen einen größeren Wert als im Volumenmaterial, siehe kleines Bild.

Die Entwicklung der Verteilungsfunktion verläuft im Quantenfilm analog zum Volumenmaterial und soll daher an dieser Stelle nicht gesondert diskutiert werden, siehe dazu auch [24]. Es sei aber erwähnt, dass die Replik der Anfangsverteilung, anders als im Volumenmaterial, im Endzustand die gleiche Höhe besitzt wie die Anfangsverteilung selbst. Dies liegt begründet in der Erhaltung der Elektronendichte

(4.1) und der konstanten Zustandsdichte im Quantenfilm im Gegensatz zur wurzelförmigen Zustandsdichte im Volumenmaterial.

Zum Vergleich der Teilsysteme sowie der verschiedenen Näherungen für den Quantenfilm bietet sich die Betrachtung der zuvor eingeführten effektiven Temperatur an, da sich hierdurch geringe Unterschiede in der Relaxationszeit sichtbar machen lassen. Die entsprechenden Resultate zeigt Abb. 4.3.

Auch im Quantenfilm erfolgt der Abfall der effektiven Temperatur erst nach wenigen ps näherungsweise exponentiell, die Relaxationszeit-Näherung ist also auch in diesem Fall nur für nicht zu große Anregungen des Systems annehmbar. Zudem wird deutlich, dass für die in dieser Arbeit angenommenen Materialparameter die Streueffizienz im Quantenfilm durch seine Modellierung als unendlich tiefer und unendlich schmaler Potentialtopf stark überschätzt wird. Die Berücksichtigung der endlichen Ausdehnung des Filmes ergibt zwar eine Verbesserung, die Abweichung von der besten hier verwendeten Näherung des endlich tiefen Potentialtopfes ist jedoch deutlich.

Obgleich beide Teilsysteme bei derselben Energie angeregt werden, ist im hier betrachteten Fall die effektive Temperatur im Quantenfilm sowohl zu Beginn als auch im Gleichgewicht höher als im Volumenmaterial. Dies kann auf die größere Zustandsdichte zurückgeführt werden (siehe Kap. 2.2.1), eine höhere Elektronendichte hingegen hat vor allem Einfluss auf das chemische Potential.

4.1.2 Wechselwirkung mit akustischen Phononen

Als nächstes wird die Streuung von Elektronen ausschließlich an akustischen Phononen innerhalb der Teilsysteme untersucht.

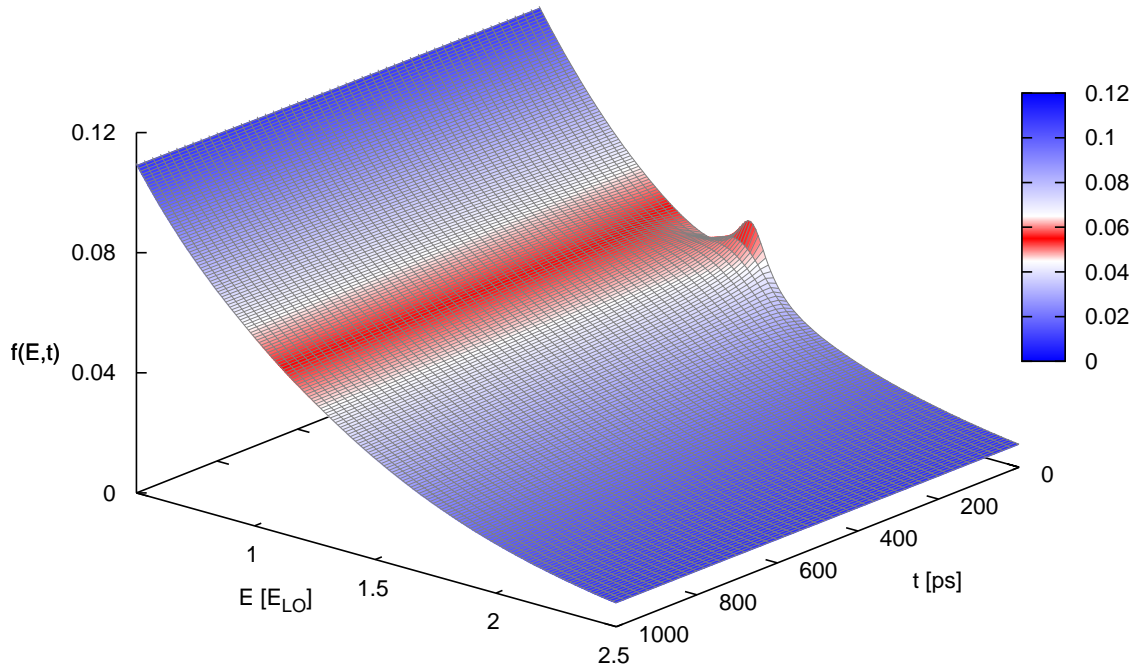


Abbildung 4.4: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im GaAs-Volumensystem bei einer Temperatur $T = 300\text{K}$ unter Streuung an akustischen Phononen. Zur Zeit $t = 0\text{ps}$ wird eine Fermi-Verteilung der Temperatur $T = 300\text{K}$ mit einem chemischen Potential $\mu = -1E_{LO}$ angenommen, die eine lorentzförmige Störung der Breite 6meV bei 50meV erhält. Die Störung wird innerhalb von einigen 100ps nahezu vollständig ausgeglichen, sodass das System in ein thermisches Gleichgewicht übergeht.

Es ist aufgrund der verschiedenartigen Phononendispersionen (siehe Kap. 3.4) und der Unterschiede in den Matrixelementen zu erwarten, dass sich das System in diesem Fall deutlich anders verhält als bei der oben betrachteten Streuung an optischen Phononen.

Des Weiteren unterscheiden sich hier die Streuterme in Volumenmaterial und Quantenfilm aufgrund der verschiedenen Dimensionen der Impulserhaltung stärker voneinander, so dass ein Vergleich beider Teilsysteme von Interesse ist. Den formalen Unterschieden entsprechend wird zur numerischen Berechnung kein energieäquidistantes Gitter verwendet, sondern ein impulsäquidistantes, welches in diesem Fall besser geeignet ist. Die Auftragung der Ergebnisse erfolgt dennoch auf einer Energieskala, was eine einfache Umrechnung mithilfe der Elektronendispersion erfordert.

Als Ausgangsverteilung wird nun jeweils eine Fermi-Verteilung der elektronischen Zustände mit einer Temperatur von 300K und einem chemischen Potential von $-1E_{LO}$ verwendet, die bei 50meV eine lorentzförmige Störung der Breite 6meV erhält. Da die Streuung an akustischen Phononen nicht nur in zwei elektronische Zustände wie an optischen Phononen, sondern in ein Kontinuum von Zuständen erfolgen kann, sollte die Störung vollständig ausgeglichen werden. Wird zudem eine Gittertemperatur von 300K vorgegeben, so sollte sich die Verteilung ansonsten kaum verändern.

Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im Volumenmaterial und im Quantenfilm zeigen Abb. 4.4 und 4.5.

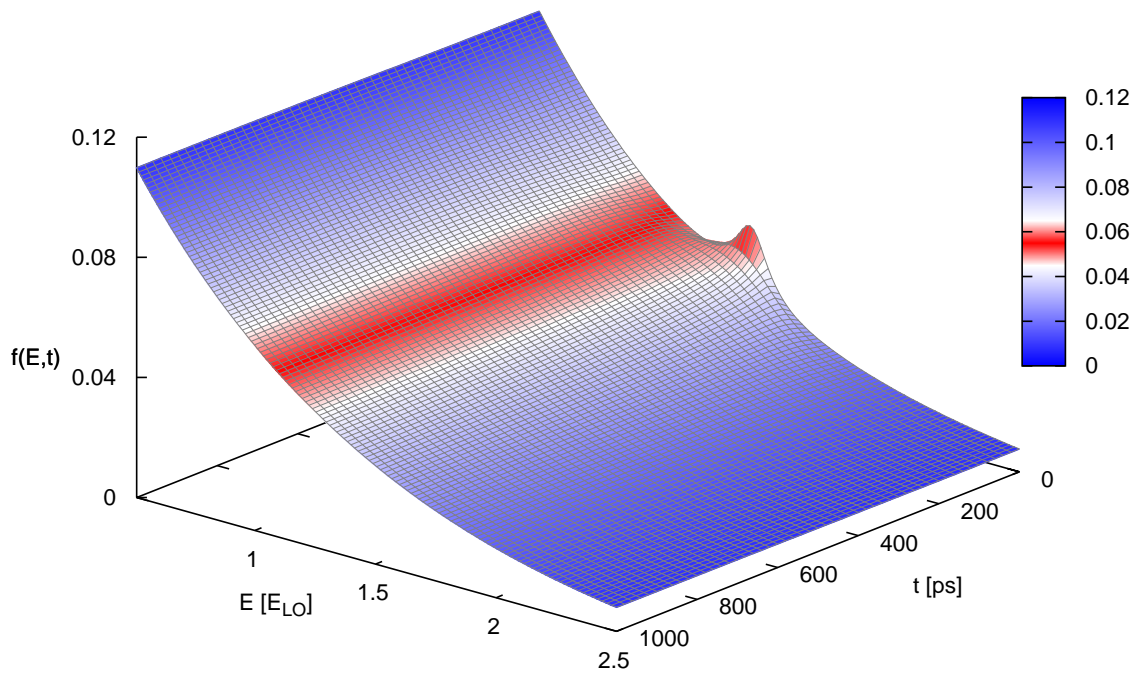


Abbildung 4.5: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im InGaAs-Quantenfilmsystem bei einer Temperatur $T = 300\text{K}$ unter Streuung an akustischen Phononen. Zur Zeit $t = 0\text{ps}$ wird eine Fermi-Verteilung der Temperatur $T = 300\text{K}$ mit einem chemischen Potential $\mu = -1E_{LO}$ angenommen, die eine lorentzförmige Störung der Breite 6meV bei 50meV erhält. Die Störung wird innerhalb von einigen 100ps nahezu vollständig ausgeglichen, sodass das System in ein thermisches Gleichgewicht übergeht.

Wie erwartet hat die Wechselwirkung mit akustischen Phononen einen deutlich anderen Effekt auf beide Teilsysteme als die Wechselwirkung mit optischen Phononen: Eine Störung wird durch Streuung von Elektronen in energetisch eng benachbarte Zustände abgebaut, ohne dass sich Replika der

Störung ausbilden. Es bleiben außerdem keine Relikte in der Verteilung bestehen, da aufgrund des zur Verfügung stehenden Kontinuums von Zuständen, in die gestreut wird, nach einer gewissen Zeit jeder Zustand mit jedem anderen Zustand wechselwirken kann. Die relativ starke energetische Eingrenzung sorgt andererseits dafür, dass die Relaxation des Systems um etwa zwei Größenordnungen langsamer erfolgt als bei Streuung an optischen Phononen: Es werden wesentlich mehr Streuprozesse benötigt, um eine Energiedifferenz von $1E_{LO}$ zu überwinden. Der Grund hierfür liegt in der relativ zur Krümmung der Elektronendispersion geringen Steigung der akustischen Phonondispersion in Zusammenhang mit der exakten Energie- und Impulserhaltung. Im Quantenfilm wird diese Tatsache zwar prinzipiell dadurch umgangen, dass die Impulserhaltung nur in zwei Dimensionen gilt, wodurch theoretisch beliebige Werte von q_z und damit beliebige Energieüberträge möglich sind. Tatsächlich wird aber die Streuung in energetisch weit entfernte Zustände durch den starken Abfall des Formfaktors $F(q_z)$ (3.42) und der phononischen Besetzungswahrscheinlichkeiten (3.71) mit wachsendem $|q_z|$ verhindert, wie bereits in Kapitel 3.4.2 angemerkt wurde.

Vergleicht man die Streuung an akustischen Phononen in beiden Teilsystemen anhand der Abb. 4.4 und 4.5 miteinander, so lässt sich kein nennenswerter Unterschied in der Streueffizienz feststellen. Um ein klareres Bild zu erhalten, werden daher in Abb. 4.6 Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion zu bestimmten Zeiten miteinander betrachtet.

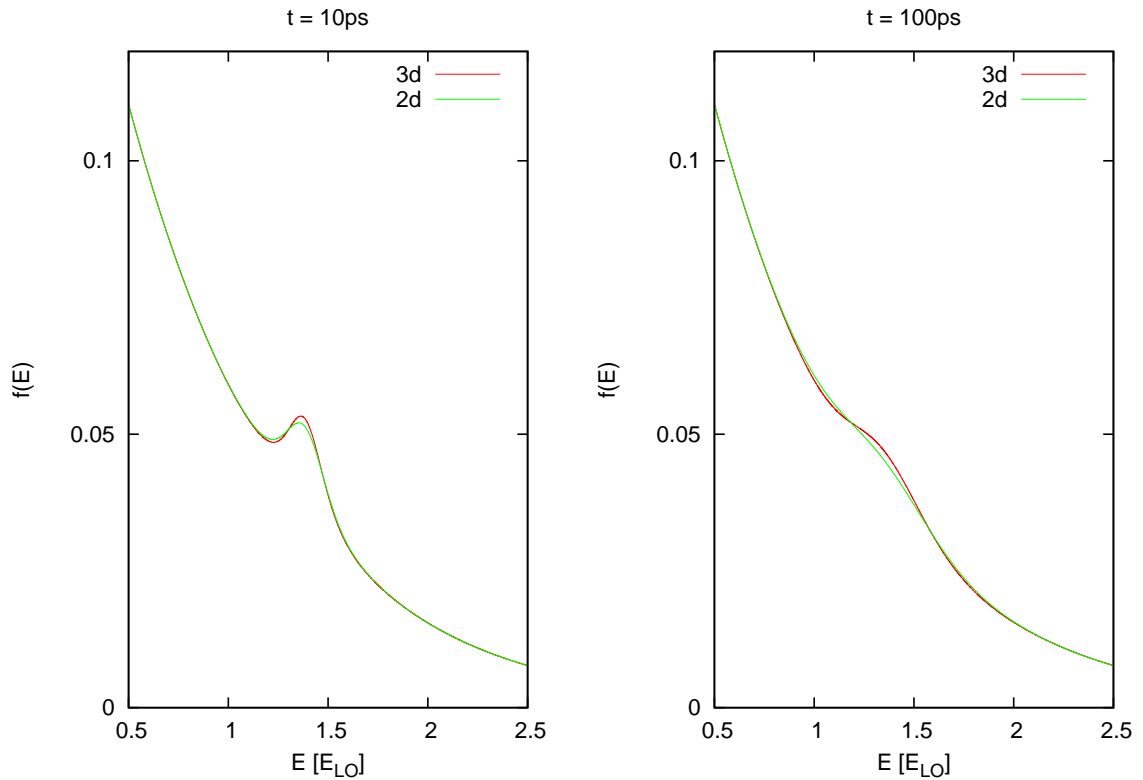


Abbildung 4.6: Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ zu zwei ausgewählten Zeitpunkten unter Streuung an akustischen Phononen im Volumenmaterial (3d) und im Quantenfilm (2d). Zur Zeit $t = 0$ ps wird eine Fermi-Verteilung der Temperatur $T = 300$ K mit einem chemischen Potential $\mu = -1E_{LO}$ angenommen, die eine lorentzförmige Störung der Breite 6 meV bei 50 meV erhält. Die Störung wird im Quantenfilm geringfügig schneller ausgeglichen als im Volumenmaterial.

Offenbar wird die prinzipiell unendliche energetische Reichweite der Streuung im Quantenfilm durch den Verlauf von $F(q_z)$ und n_q derart eingeschränkt, dass dort die Streuung trotz der zusätzlich höheren Zustandsdichte kaum schneller erfolgt als im Volumenmaterial. In diesem können durch akustische Phononen, wie sich durch Betrachten der Energie- und Impulserhaltung (3.64) abhängig von ϑ zeigt, von einem Zustand mit Wellenzahl k aus ausschließlich Zustände mit Wellenzahlen zwischen

$k - 2mc_{LA}/\hbar$ und $k + 2mc_{LA}/\hbar$ erreicht werden. Die Wechselwirkung mit diesen Zuständen muss entsprechend stärker sein, sodass letztendlich die Gesamtwirkung aller Streuprozesse mit jener im Quantenfilm vergleichbar ist.

Zusammenfassend ergibt die numerische Untersuchung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung innerhalb der Teilsysteme, dass fundamentale Unterschiede bei Streuung an optischen und an akustischen Phononen bestehen, die qualitativ auch aus einer analytischen Betrachtung der Streuterme gefolgert werden können. Zudem zeigt sich, dass die Streueffizienz optischer Phononen im Volumenmaterial höher ist, während die Streueffizienz akustischer Phononen im Quantenfilm geringfügig überwiegt. Im folgenden Abschnitt wird die zeitliche Entwicklung des Gesamtsystems aus Volumenmaterial und Quantenfilm zunächst unter Wechselwirkung mit optischen und später zusätzlich mit akustischen Phononen untersucht.

4.2 Einfang der Elektronen aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm

An dieser Stelle werden die zuvor getrennt betrachteten Teilsysteme aneinander gekoppelt und somit, zusätzlich zu den bisher betrachteten Prozessen, die Streuung von Elektronen zwischen den 3d-Zuständen des Volumenmaterials und den Quasi-2d-Zuständen des Quantenfilmes zugelassen. Die daraus resultierende zeitliche Dynamik des Gesamtsystems soll untersucht und die Auswirkungen der verschiedenen möglichen Streuprozesse miteinander verglichen werden.

Dazu wird in einem ersten Schritt allein die Wechselwirkung mit optischen Phononen berücksichtigt, wodurch die möglichen Streuprozesse wiederum auf einen konstanten Energieübertrag beschränkt sind. Später werden innerhalb der Teilsysteme sowie beim Einfang von Elektronen in den Quantenfilm auch Wechselwirkungen mit akustischen Phononen zugelassen. Daraus lassen sich, ausgehend von den Ergebnissen des vorigen Abschnittes, wesentliche Änderungen im Verhalten des Systems erwarten.

Als Ausgangsverteilung wird stets eine energetisch gaussförmige Besetzung der 3d-Zustände mit einer Halbwertsbreite von 9meV gewählt, welche um 2 Phononenenergien oberhalb der GaAs-Leitungsbandenergie liegt. Diese relativ geringe Anregung des Systems wird gewählt, um die Anzahl der benötigten Gitterpunkte und damit den numerischen Aufwand möglichst niedrig zu halten. Zudem ist in diesem Abschnitt vor allem die Dynamik innerhalb des Quantenfilmes sowie am Übergang zwischen den Teilsystemen von Interesse und weniger die Prozesse innerhalb des Volumenmaterials, die bereits eingehend diskutiert wurden. Der Quantenfilm wird als vollständig unbesetzt angenommen.

4.2.1 Wechselwirkung mit optischen Phononen

Zur Untersuchung der Abhängigkeit des Systems von äußeren Parametern werden im Folgenden die Ladungsträgerdichte n_{3d} im Volumenmaterial sowie die Gittertemperatur und damit die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Phononenmoden variiert. Die Ladungsträgerdichte ist nach wie vor eine Erhaltungsgröße, da das Volumenmaterial als Elektronenreservoir wirkt und durch die Einstreuung von Elektronen in den Quantenfilm nicht beeinflusst wird. Siehe dazu auch die Diskussion in Kapitel 3.3.3. Die Rechnung erfolgt wegen der Beschränkung auf optische Phononen auf einem energieäquidistanten Gitter.

Starke Anregung, niedrige Temperatur

Die Elektronendichte n_{3d} im Volumenmaterial betrage zunächst 10^{17}cm^{-3} , was einer starken Anregung entspricht, und die Gittertemperatur sei $T = 77\text{K}$. Eine solche tiefe Temperatur ließe sich etwa mit flüssigem Stickstoff realisieren. Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ der 3d- und Quasi-2d-Zustände unter diesen Bedingungen ist in Abb. 4.7 dargestellt.

Die Resultate werden verständlich, wenn man die Wechselwirkungsfaktoren der verschiedenen Streubeiträge, (3.55), (3.57) und (3.61), miteinander vergleicht. Dies geschieht in Abb. 4.8.

Die relativ schwache Wechselwirkung zwischen den Teilsystemen insbesondere im Bereich der GaAs-Bandkante wirkt wie ein Flaschenhals für das System. Elektronen, die in den Quantenfilm eingestreut werden, relaxieren praktisch sofort in die energetisch günstigsten freien Quasi-2d-Zustände. Es findet zwar ebenso Streuung aus dem Quantenfilm heraus durch Absorption von Phononen statt, diese Prozesse sind jedoch aufgrund der geringen Temperatur sehr unwahrscheinlich, wie bereits in Kapitel 4.1.1 diskutiert wurde. Aus diesem Grund kann die Besetzungswahrscheinlichkeit vieler Quasi-2d-Zustände auf 1 ansteigen und die Verteilungen der 3d- und Quasi-2d-Zustände oberhalb der GaAs-Bandkante gleichen sich nur sehr langsam an.

Für Zeiten $t \gtrsim 1\text{ps}$ stellt sich also eine Elektronenverteilung im Quantenfilm ein, die bei der aktuell vorliegenden Quantenfilm-Elektronendichte n_{2d} , welche durch die Anzahl von bis dahin eingestreuten Elektronen gegeben ist, energetisch nahezu minimal ist. Dabei wird der Quantenfilm so lange aufgefüllt, bis er keine zusätzlichen Elektronen mehr durch Übertragung einer Phononenenergie aufnehmen kann. Der Grund hierfür ist, dass das Volumenmaterial wie ein Reservoir mit zusätzlichen Ladungsträgern wirkt. Im stationären Grenzfall sind sowohl die Streuprozesse innerhalb der Teilsysteme als auch zwischen ihnen für jeden Zustand im Gleichgewicht. Man beachte, dass zwar zum Erreichen dieses endgültigen Gleichgewichtszustandes relativ viel Zeit benötigt wird, ein Großteil der Besetzung

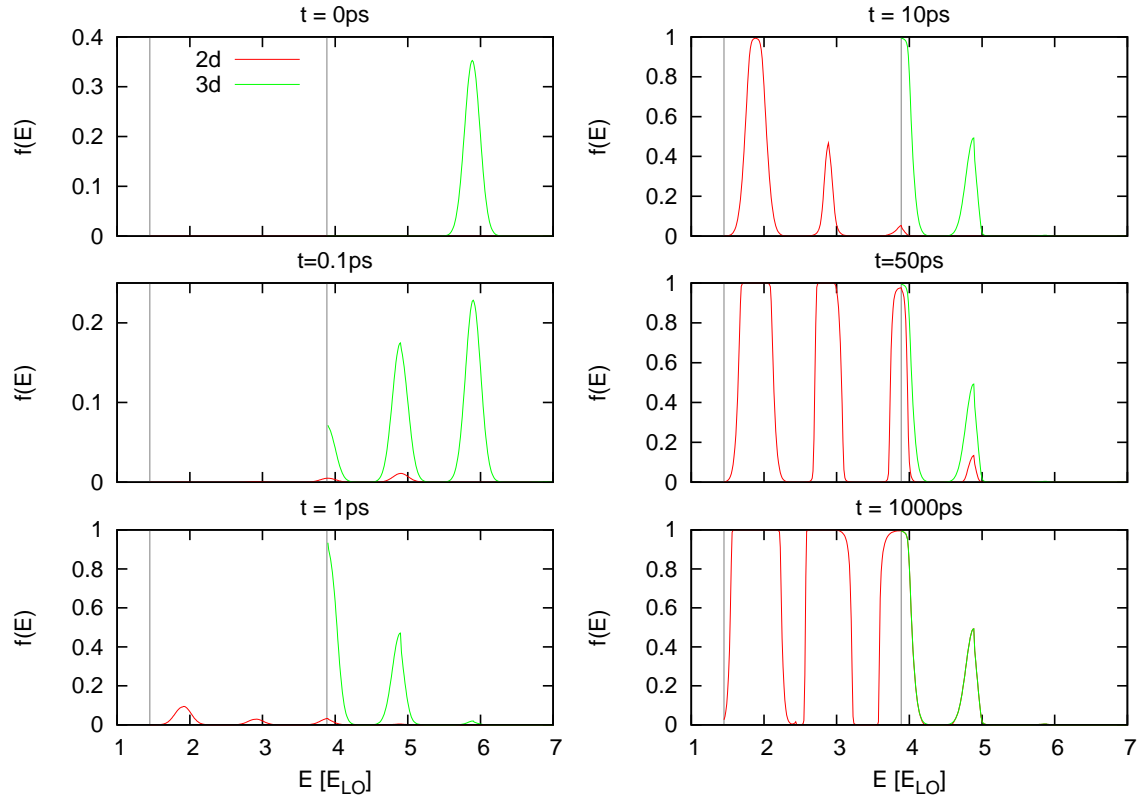


Abbildung 4.7: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im Gesamtsystem aus GaAs-Volumenmaterial (3d) und InGaAs-Quantenfilm (2d) bei einer Temperatur $T = 77\text{K}$ und einer Elektronendichte $n_{3d} = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ unter Streuung an optischen Phononen. Die GaAs-Bandkante bei etwa $3.9E_{LO}$ und die InGaAs-Subbandkante bei etwa $1.5E_{LO}$ sind durch graue Linien gekennzeichnet.

Sobald die ersten Quasi-2d-Zustände oberhalb der GaAs-Bandkante durch Einstreuung aus dem Volumenmaterial besetzt werden ($t = 0.1\text{ps}$), sorgt die starke Wechselwirkung innerhalb des Quantenfilmes für die rasche Besetzung von Zuständen aller möglicher Energien ($t = 1\text{ps}$). Daraufhin wird der Quantenfilm stetig mit Elektronen aufgefüllt, was jedoch auf einer viel längeren Zeitskala stattfindet; Erst nach etwa 1ns stellt sich ein Gleichgewichtszustand ein, in dem sich die Verteilungen oberhalb der GaAs-Bandkante exakt angeglichen haben. Siehe dazu auch die Erläuterungen im Text und in Abb. 4.8.

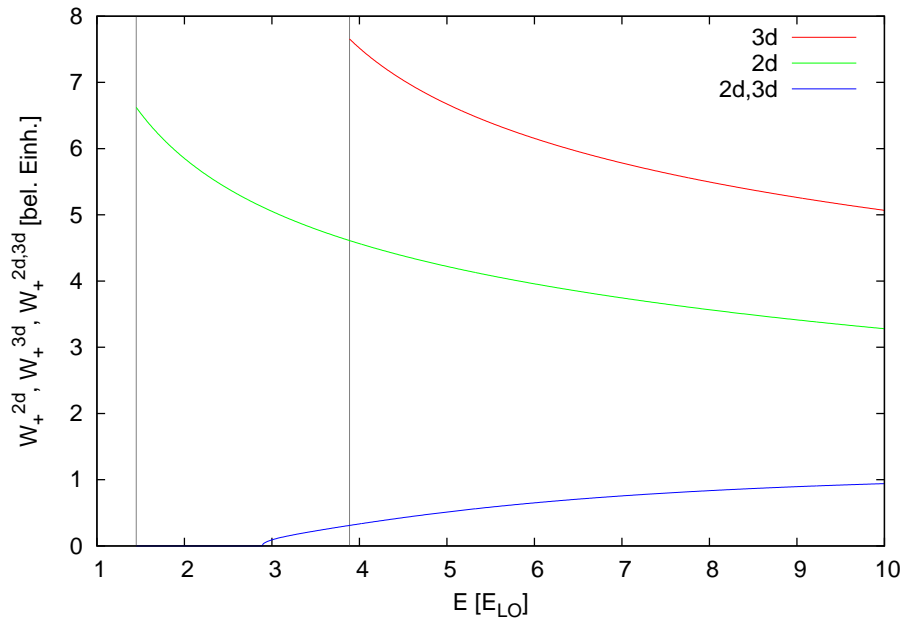


Abbildung 4.8: Wechselwirkungsfaktoren W_+ der Einstreuung von Elektronen in Zustände der Energie E durch Emission von optischen Phononen im Volumenmaterial (3d), im Quantenfilm (2d) und aus dem Volumenmaterial in den Quantenfilm (2d,3d) (siehe Kap. 3.4). Sie sind aufgetragen auf einer absoluten Energieskala des Gesamtsystems, auf der die InGaAs-Subbandkante bei $1.45E_{LO}$ und die GaAs-Bandkante bei $3.89E_{LO}$ liegen (graue Linien).

Die Einstreuung in den Quantenfilm aus dem Volumenmaterial ist wesentlich schwächer als die Relaxation innerhalb der Teilsysteme, weshalb sich beide Prozesse auf verschiedenen Zeitskalen abspielen, siehe auch die Diskussion in Kap. 3.3.3. Zudem kann die Einstreuung wegen der Energieerhaltung nur in solche Quasi-2d-Zustände erfolgen, die um weniger als $1E_{LO}$ unterhalb der GaAs-Bandkante liegen. Darunter finden alle Prozesse aufgrund von Streuung zwischen Quasi-2d-Zuständen statt.

jedoch schon nach einem Bruchteil dieser Zeit vorhanden ist. Wie in der Relaxationszeit-Näherung angenommen, strebt das System umso langsamer seinem Gleichgewichtszustand entgegen, je kleiner die verbleibende Abweichung ist.

Schwache Anregung, niedrige Temperatur

Als nächstes wird ein System mit geringerer Anregung und niedriger Temperatur betrachtet, die Elektronendichte betrage $n_{3d} = 10^{15} \text{cm}^{-3}$. Die zeitliche Entwicklung zeigt Abb. 4.9.

Das Resultat lässt darauf schließen, dass bei derart niedrigen Temperaturen, in denen die Streuung in energetisch höher liegende Zustände relativ selten ist, der Quantenfilm unabhängig von der Elektronendichte nahezu komplett aufgefüllt wird. Ein solches Verhalten passt zum Bild des Volumensystems als Reservoir, das auch bei beliebig kleinen Volumendichten n_{3d} aus Sicht des niederdimensionalen Quantenfilmes eine große Anzahl an Ladungsträgern zur Verfügung stellt. Man muss aber beachten, dass auf Zeitskalen von 1ns und mehr weitere Effekte, wie etwa Rekombination von Elektronen und Löchern, eine Rolle spielen, die die Elektronenverteilung in beiden Teilsystemen stark verändern können.

Schwache Anregung, hohe Temperatur

In einem weiteren Schritt wird nun die Temperatur des Systems bei gleichbleibender geringer Anregung auf $T = 300\text{K}$ erhöht, was in etwa Zimmertemperatur entspricht. Die resultierende zeitliche

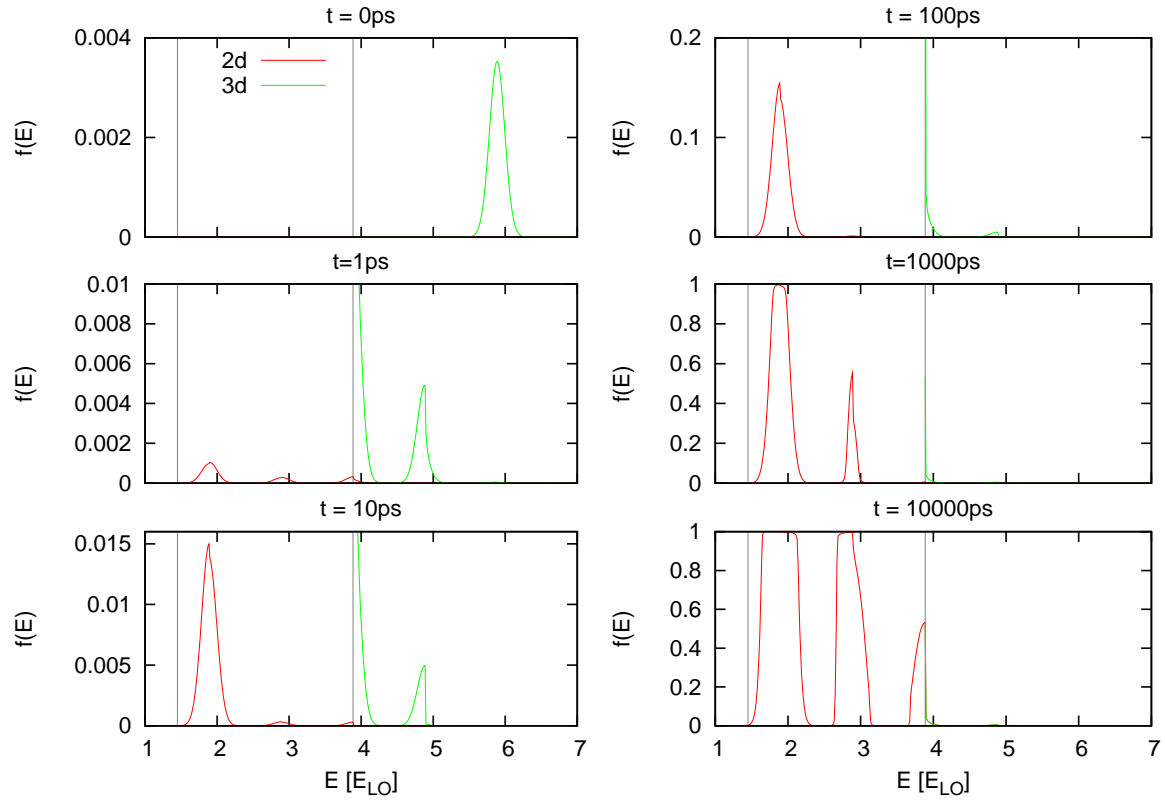


Abbildung 4.9: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im Gesamtsystem aus GaAs-Volumenmaterial (3d) und InGaAs-Quantenfilm (2d) bei einer Temperatur $T = 77\text{K}$ und einer Elektronendichte $n_{3d} = 10^{15}\text{cm}^{-3}$ unter Streuung an optischen Phononen. Die GaAs-Bandkante bei etwa $3.9E_{LO}$ und die InGaAs-Subbandkante bei etwa $1.5E_{LO}$ sind durch graue Linien gekennzeichnet.

Die Verteilungsfunktionen entwickeln sich qualitativ ähnlich wie im Falle starker Anregung (siehe Abb. 4.7), wobei die Besetzungswahrscheinlichkeiten der 3d-Zustände hier entsprechend der kleineren Elektronendichte um einen Faktor 100 geringer sind. Die Einstreuung in den Quantenfilm erfolgt daher noch langsamer, nach 1ns ist bei weitem keine vollständige Besetzung erreicht. Das detaillierte Gleichgewicht ergibt sich nach etwa 10ns.

Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten ist in Abb. 4.10 zu sehen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Größe der Besetzungswahrscheinlichkeiten der Quasi-2d-Zustände im Wesentlichen von der Temperatur des Systems abhängt, während die Zeit, in der das System seinen Gleichgewichtszustand erreicht, durch die Elektronendichte im Volumenmaterial bestimmt wird. In jedem Fall aber findet die Einstreuung in den Quantenfilm auf einer wesentlich längeren Zeitskala statt als die Relaxation innerhalb der Teilsysteme.

Im nächsten Abschnitt werden zusätzlich akustische Phononen bei der Streuung innerhalb der Teilsysteme sowie bei der Einstreuung vom Volumenmaterial in den Quantenfilm berücksichtigt. Dadurch sollte vor allem das Problem der konstanten Phononenenergien und der daraus resultierenden Relikte in den Elektronenverteilungen beseitigt werden.

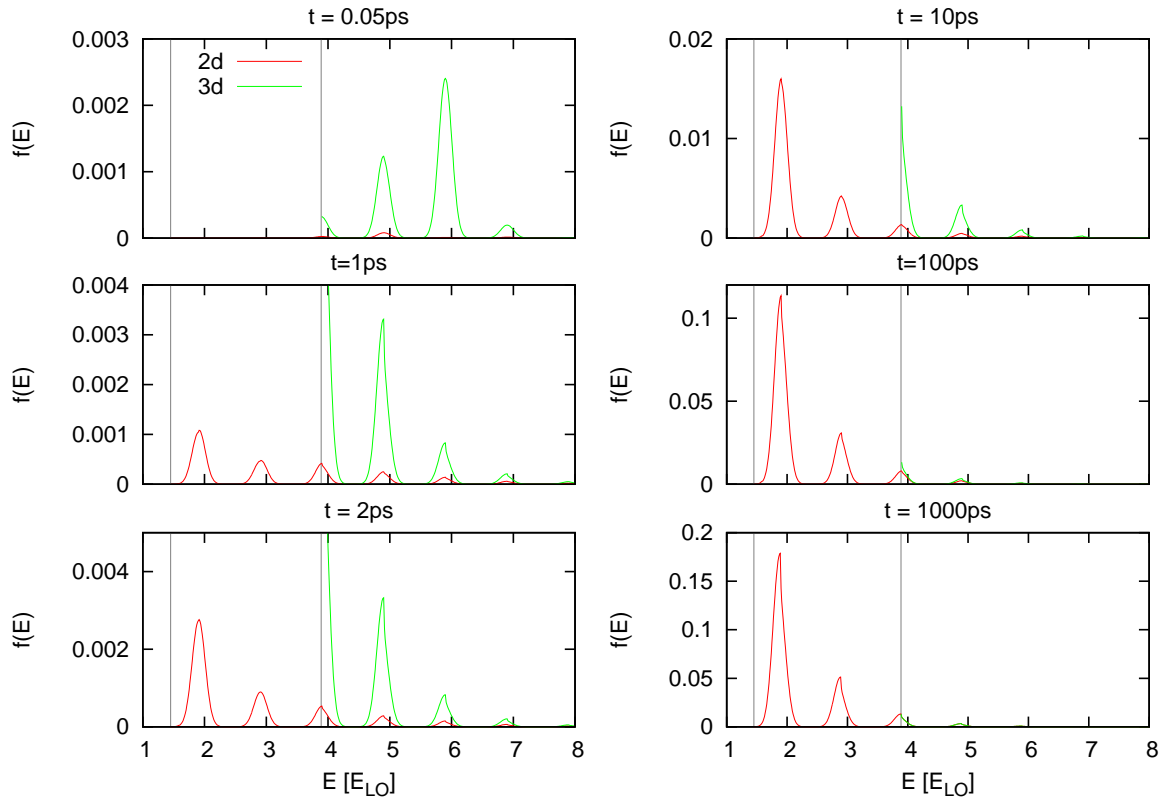


Abbildung 4.10: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im Gesamtsystem aus GaAs-Volumenmaterial (3d) und InGaAs-Quantenfilm (2d) bei einer Temperatur $T = 300\text{K}$ und einer Elektronendichte $n_{3d} = 10^{15}\text{cm}^{-3}$ unter Streuung an optischen Phononen. Die GaAs-Bandkante bei etwa $3.9E_{LO}$ und die InGaAs-Subbandkante bei etwa $1.5E_{LO}$ sind durch graue Linien gekennzeichnet.

Bei dieser relativ hohen Gittertemperatur hat die Absorption von Phononen einen deutlich bemerkbaren Einfluss auf die Dynamik, es ist $n_q/(1 + n_q) \approx 0.25$. Der Vergleich mit dem vorigen Fall (Abb. 4.9) zeigt, dass 3d- und Quasi-2d-Zustände mit höheren Energien jederzeit stärker besetzt sind. Außerdem sorgt die Streuung von Elektronen aus Quasi-2d-Zuständen unterhalb der GaAs-Bandkante in höhergelegene 3d-Zustände dafür, dass die Besetzungswahrscheinlichkeit im Quantenfilm sich bei etwa 0.2 einpendelt und nicht auf 1 anwächst. Dementsprechend erreicht das System sein detailliertes Gleichgewicht wesentlich schneller als im Fall niedriger Temperaturen.

4.2.2 Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen

Schließlich soll noch das Verhalten des Gesamtsystems bei Berücksichtigung der Streuung an akustischen Phononen untersucht werden. Von Interesse sind hierbei insbesondere die unterschiedlichen Streueffizienzen beider Arten von Phononen bei der Einstreuung vom Volumenmaterial in den Quantenfilm. Um eine gute Vergleichbarkeit mit der Rechnung ohne akustische Phononen zu erreichen, werden wiederum eine Elektronendichte $n_{3d} = 10^{15} \text{cm}^{-3}$ und eine Temperatur $T = 300 \text{K}$ angenommen.

Die Rechnung erfolgt in diesem Fall wieder auf einem impulsäquidistanten Gitter, wobei die Streuung an optischen Phononen eine Interpolation zwischen den Gitterpunkten erforderlich macht. Die zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten ist in Abb. 4.11 dargestellt.

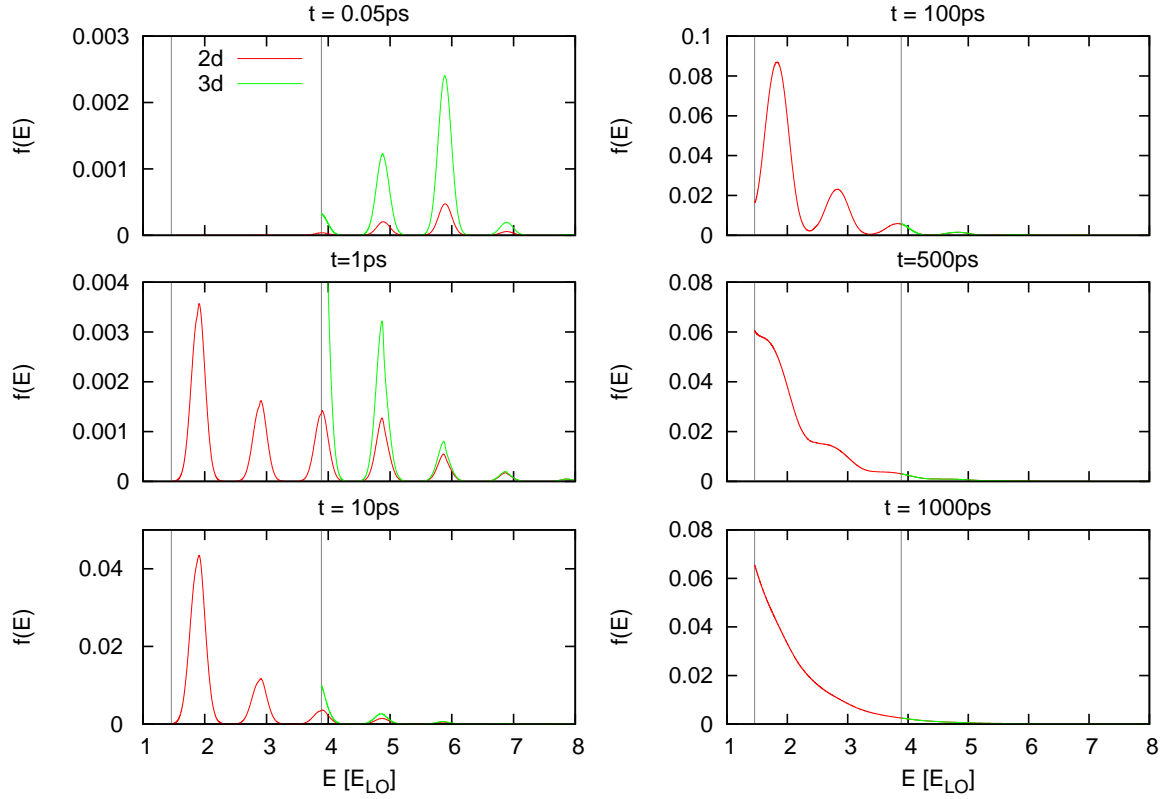


Abbildung 4.11: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(E, t)$ im Gesamtsystem aus GaAs-Volumenmaterial (3d) und InGaAs-Quantenfilm (2d) bei einer Temperatur $T = 300 \text{K}$ und einer Elektronendichte $n_{3d} = 10^{15} \text{cm}^{-3}$ unter Streuung an optischen und akustischen Phononen. Die GaAs-Bandkante bei etwa $3.9E_{LO}$ und die InGaAs-Subbandkante bei etwa $1.5E_{LO}$ sind durch graue Linien gekennzeichnet.

Bereits nach 0.05ps haben sich deutlich sichtbare Replika in der Verteilung der Quasi-2d-Zustände durch Einstreuung aus dem Volumenmaterial gebildet. Sie entstehen überwiegend durch Streuung an akustischen Phononen, vgl. Abb. 4.10. Dementsprechend werden die Quasi-2d-Zustände schneller aufgefüllt als bei Streuung ausschließlich an optischen Phononen ($t = 1 \text{ps}$, $t = 10 \text{ps}$). Nach 100ps ist der Einfluss der akustischen Phononen auch bei Streuung innerhalb des Quantenfilmes sichtbar, nach 1ns hat sich nahezu eine thermische Verteilung in beiden Teilsystemen eingestellt. Siehe dazu auch Abb. 4.12.

Die hohe Streueffizienz der akustischen Phononen bei der Einstreuung von Elektronen in den Quantenfilm im Vergleich zur Streuung innerhalb der Teilsysteme konnte schon in Kapitel 3.3.3 anhand analytischer Betrachtungen angedeutet werden. Man beachte, dass die Höhe der zu Beginn entstehenden Replika in der Verteilung der Quasi-2d-Zustände in etwa proportional ist zu der Höhe der

direkt darüber liegenden Replika in der Verteilung der 3d-Zustände. Dies zeigt erneut, dass bei der Streuung an akustischen Phononen nur sehr geringe Energieüberträge stattfinden, im Gegensatz zu den Überträgen der optischen Phononen. Für die Einstreuung in den Quantenfilm sind diese geringen Energien unproblematisch, für die Relaxation innerhalb des Quantenfilmes bedeuten sie allerdings eine starke Einschränkung. So zeigt die Betrachtung des Gesamtsystems wie schon die vorangegangene Betrachtung der isolierten Teilsysteme, dass die Relaxation durch akustische Phononen um zwei bis drei Größenordnungen langsamer abläuft als durch optische Phononen. Damit findet sie auf einer ähnlichen Zeitskala statt wie das Auffüllen des Quantenfilmes durch Streuung aus 3d-Zuständen an optischen Phononen.

Zuletzt soll noch einmal die Methode der effektiven Temperatur angewendet werden, um das Streben des Systems in ein thermisches Gleichgewicht zu unterstreichen, das Ergebnis zeigt Abb. 4.12.

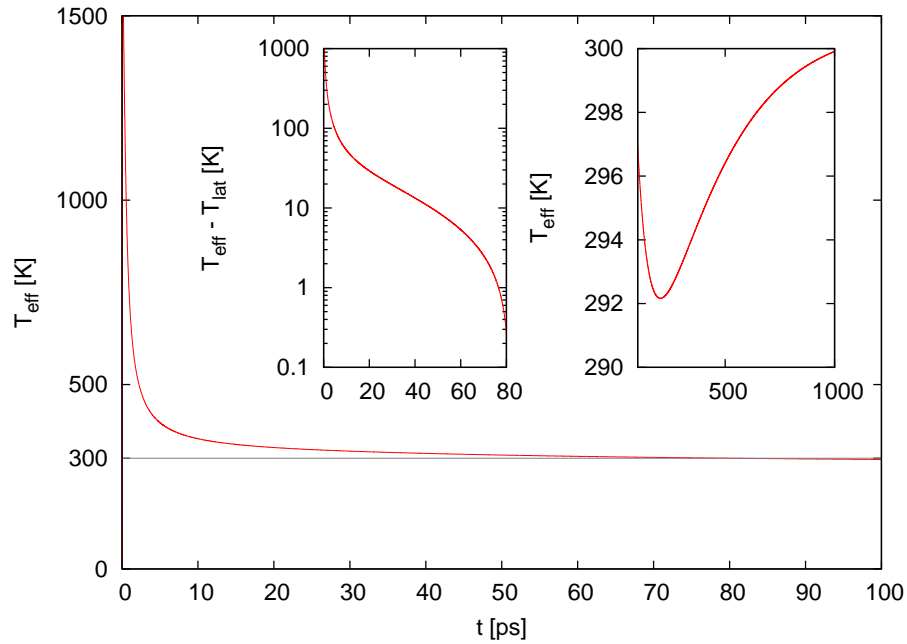


Abbildung 4.12: Zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur T_{eff} im InGaAs-Quantenfilm in Kopplung an das GaAs-Volumenmaterial unter Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen.

Die Temperaturentwicklung weist zwei Regime auf: Innerhalb weniger ps fällt die effektive Temperatur auf etwa 400K ab, während die zu Beginn in den Quantenfilm eingestreuten Elektronen durch Streuung an optischen Phononen relaxieren. Später wirkt sich die Streuung an akustischen Phononen aus und die Temperatur strebt langsam gegen die Gittertemperatur von 300K, im Gegensatz zum System ohne akustische Phononen (vgl. Abb. 4.2 und 4.3). Der Abfall verläuft nur in einem kleinen Bereich näherungsweise exponentiell, wie die halblogarithmische Auftragung der Temperaturdifferenz im kleinen Bild links zeigt. Nach etwa 80ps unterschreitet T_{eff} die Gittertemperatur und nähert sich ihr von unten an, siehe dazu das kleine Bild rechts und die Erläuterungen im Text.

Die verschiedenen Zeitskalen, auf denen optische und akustische Phononen wirken, spiegeln sich also auch in der Entwicklung der effektiven Temperatur wider. Das Absinken derselben unter die Gittertemperatur widerspricht zunächst der Erwartung, kann jedoch auf prinzipielle Unzulänglichkeiten der Methode bei zu hoch angeregten Systemen zurückgeführt werden. So zeigt ein Vergleich mit Abb. 4.11, dass die zum Zeitpunkt der Unterschreitung der Gittertemperatur vorliegende Verteilung bei weitem keine Fermi-Verteilung ist, obschon sie die gleiche Teilchendichte und innere Energie besitzt. Im Zuge der weiteren Relaxation werden Verteilungen durchlaufen, deren effektive Temperatur um wenige K unterhalb der Gittertemperatur liegt. Dieses Verhalten erscheint physikalisch sinnvoll, da letztendlich eine asymptotische Annäherung an die Gittertemperatur erfolgt.

Es sei an dieser Stelle noch einmal erwähnt, dass es sich bei der effektiven Temperatur nicht um eine Temperatur im statistischen Sinne handelt und sie daher bei derart hoch angeregten Systemen mit Vorsicht zu gebrauchen ist. Dies gilt offenbar ebenso für die Relaxationszeit-Näherung, die in allen betrachteten Fällen nur in einem jeweils relativ kleinen Bereich gerechtfertigt erscheint. Zudem ist zu beachten, dass gleichzeitig mit der Relaxation der Elektronen im Quantenfilm stetig weitere Elektronen aus dem Volumenmaterial eingestreut werden, was in unbekanntem Maße Einfluss auf die effektive Temperatur haben könnte.

In diesem Abschnitt konnten die Auswirkungen der verschiedenen Streumechanismen im Gesamtsystem deutlich gemacht werden; Durch die Streuung an optischen Phononen innerhalb der Teilsysteme überwinden Elektronen in wenigen ps große Energiedifferenzen, können allerdings nicht vollständig in ein thermisches Gleichgewicht relaxieren. Dies geschieht durch die Streuung an akustischen Phononen innerhalb der Teilsysteme auf Zeitskalen von einigen 100ps bis 1ns. Die Einstreuung von Elektronen aus dem Volumensystem in den Quantenfilm erfolgt mit akustischen Phononen wesentlich schneller als mit optischen, benötigt aber generell mehr Zeit als die Relaxation der Teilsysteme.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war zum einen die Modellierung und analytische Beschreibung der Elektronendynamik in einer typischen Halbleiter-Heterostruktur unter Einfluss der Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Zum anderen sollten die erarbeiteten Gleichungen dazu verwendet werden, die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsverteilung von Ladungsträgern in derartigen Systemen numerisch zu untersuchen.

Dazu wurden zunächst die wesentlichen Grundlagen der Beschreibung von Elektronen und Phononen in Festkörpern eingeführt und darauf aufbauend ein Modell der betrachteten Heterostruktur, bestehend aus GaAs-Volumenmaterial und InGaAs-Quantenfilm, aufgestellt. Dabei wurde konsequent von der Annahme Gebrauch gemacht, dass ausschließlich elektronische Zustände nahe des Leitungsbandminimums und dementsprechend Phononen großer Wellenlängen Einfluss auf die Dynamik haben. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung erfolgte im Falle optischer Phononen über die polare Kopplung und im Falle akustischer Phononen über die Deformationpotential-Kopplung.

Die 3d-Zustände im Volumenmaterial wurden in einfachster Näherung als ebene Wellen angesetzt und in einem aufwändigeren Ansatz auf die gebundenen Quantenfilm- (Quasi-2d-)Zustände orthogonalisiert. Es stellte sich später heraus, dass durch die Verwendung ebener Wellen nicht nur die Effizienz optischer Phononen bei der Einstreuung von Elektronen in den Quantenfilm stark überschätzt wird, sondern auch aufgrund des endlichen Überlapps der 3d- und Quasi-2d-Zustände Singularitäten in den Matrixelementen auftreten können.

Die Quasi-2d-Zustände in Einhüllenden-Näherung folgten aus der Modellierung des Quantenfilmes als unendlich tiefer und als endlich tiefer Potentialtopf. Hier zeigte sich in der numerischen Auswertung, dass ersterer Ansatz bei den gegebenen Materialparametern zu einer deutlich zu schnellen Relaxation der Elektronen im Quantenfilm führt. Sowohl die Näherung ebener Wellen als auch des unendlich tiefen Potentialtopfes sollten also trotz des geringeren Rechenaufwandes vermieden werden.

Im dritten Kapitel wurde der Elektron-Phonon-Wechselwirkungs-Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung aufgestellt und zur Herleitung kinetischer Gleichungen in Faktorisierungs- und Markov-Näherung verwendet. Die dabei auftretenden Wechselwirkungs-Matrixelemente wurden unter Verwendung der im zweiten Kapitel berechneten Zustände für die Streuung innerhalb der Teilsysteme sowie zwischen den Teilsystemen so weit wie möglich analytisch ausformuliert. Dabei zeigte sich, dass infolge der Einhüllenden-Näherung im Volumenmaterial eine dreidimensionale Impulserhaltung gilt, während im Quantenfilm sowie bei der Einstreuung in den Quantenfilm nur der Impuls in der Filmebene erhalten ist. Zudem stellte sich heraus, dass im thermodynamischen Limes die Elektronenverteilung im Volumenmaterial durch die Einstreuung nicht beeinflusst wird, da das Volumenmaterial wegen seiner zusätzlichen Dimension wie ein Ladungsträgerreservoir wirkt. Aus den Matrixelementen konnte bereits analytisch gefolgert werden, dass die Streueffizienz optischer Phononen bei der Einstreuung wesentlich geringer ausfällt als bei der Relaxation im Quantenfilm, und dass dies für akustische Phononen nicht der Fall ist.

Die Auswertung der Energieerhaltung, welche aus der Markov-Näherung resultiert, ergab, dass aus jedem Zustand durch Streuung an optischen Phononen nur zwei andere Zustände erreicht werden können. Dies folgt aus der Annahme einer konstanten Dispersion der LO-Phononen. Akustische Phononen ermöglichen aufgrund ihrer als linear angenommenen Dispersion die Streuung in ein Kontinuum von

Zuständen, übertragen jedoch vergleichsweise geringe Energiebeträge.

Im vierten Kapitel wurden anhand der numerischen Berechnung der Besetzungsdynamik nach Anregung von Nichtgleichgewichtsverteilungen die Auswirkungen der zuvor analytisch gefundenen Zusammenhänge sichtbar gemacht. So zeigte sich, dass die Beschränkung auf konstante Energieüberträge optischer Phononen zur Bildung von Replika der Anfangsverteilung führt und zudem die vollständige Relaxation in ein thermisches Gleichgewicht verhindert. Durch die Berechnung einer effektiven Temperatur als Hilfsgröße konnte gezeigt werden, dass die Relaxation innerhalb des Volumenmaterials im behandelten Fall schneller erfolgt als innerhalb des Quantenfilmes. Die Betrachtung der kompletten Heterostruktur ergab, dass wie erwartet die Einstreuung in den Quantenfilm auf einer wesentlich längeren Zeitskala stattfindet als die Relaxation innerhalb der Teilsysteme; Während letztere innerhalb von wenigen ps erfolgt, nimmt die Einstreuung einige hundert ps bis hin zu mehreren ns in Anspruch und wirkt damit wie ein Flaschenhals für das System. Die Besetzung der Quasi-2d-Zustände im detaillierten Gleichgewicht wird durch die Temperatur des Systems bestimmt: Bei $T = 77\text{K}$ erreichen viele Zustände eine Besetzungswahrscheinlichkeit nahe 1, während sie bei $T = 300\text{K}$ aufgrund der erhöhten Absorptionsrate von Phononen deutlich weniger aufgefüllt werden, das Gleichgewicht wird entsprechend schneller erreicht. Eine Reduzierung der Elektronendichte von $n_{3d} = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ auf $n_{3d} = 10^{15}\text{cm}^{-3}$ hingegen bewirkt eine Verlangsamung der Einstreuung etwa um einen Faktor 10, beeinflusst jedoch nicht die Besetzung der Zustände im Gleichgewicht.

Die Betrachtung akustischer Phononen ergab, dass sie im vorliegenden Fall bei der Relaxation im Quantenfilm eine geringfügig höhere Streueffizienz besitzen als im Volumenmaterial, jedoch in beiden Teilsystemen um zwei bis drei Größenordnungen langsamer wirken als optische Phononen. Lediglich die Einstreuung geschieht durch akustische Phononen relativ schnell und wird im Bereich von ps sichtbar. Im Gegensatz zu optischen Phononen ermöglichen akustische Phononen eine vollständige Relaxation des Systems in ein thermisches Gleichgewicht, welches bei Raumtemperatur und einer Anregungsdichte von $n_{3d} = 10^{15}\text{cm}^{-3}$ nach etwa 1ns erreicht wird. Diese Beobachtungen decken sich mit den zuvor analytisch getroffenen Feststellungen bezüglich der linearen Dispersion und der geringen Energieüberträge der akustischen Phononen. Zudem konnte somit in den betrachteten Fällen das Streben von Elektronensystemen unter Einwirkung des Boltzmann-Stoßtermes der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in ein thermisches Gleichgewicht numerisch nachgewiesen werden.

Auf dieser Arbeit aufbauend sind diverse Erweiterungen und Verbesserungen denkbar; So wurde die Dynamik der Löcher im Valenzband nach einer optischen Anregung des Systems bei Streuung an Phononen komplett vernachlässigt. Sie könnte analog der Elektronendynamik durch entsprechende kinetische Gleichungen beschrieben werden und die Berücksichtigung der Rekombination von Ladungsträgern ermöglichen. Dies wäre allerdings auch durch die phänomenologische Einführung einer spontanen Emissionsrate in den kinetischen Gleichungen der Elektronen möglich.

Ebenso können kinetische Gleichungen für die phononischen Besetzungswahrscheinlichkeiten n_q aufgestellt werden, so dass entgegen der in dieser Arbeit verwendeten Reservoir-Annahme eine Aufheizung des Gitters stattfinden kann.

Eine weitere bedeutende Wechselwirkung, welche hier vernachlässigt wurde, ist die Coulomb-Streuung der Elektronen [25]. Sie findet auf vergleichbaren Zeitskalen statt wie die Elektron-Phonon-Wechselwirkung und führt nicht zur Dissipation von Energie aus dem Elektronensystem, sondern nur zu einer Umverteilung der Ladungsträger. So kann sie wesentlich zur Thermalisierung der Elektronen beitragen und bewirkt zugleich eine Aufheizung des Systems.

Die Anwendung von Vielteilchenmethoden, etwa Greenschen Funktionen, würde zu einer Renormierung der Elektronenenergien und zu endlichen Lebensdauern der elektronischen Zustände führen. Hieraus ließe sich eine Verbreiterung der delta-förmigen Energieerhaltung erwarten. Auch die Berücksichtigung von Gedächtniseffekten durch Verzicht auf die Markov-Näherung sollte zu einer Aufweichung der exakten Energieerhaltung führen [23]. Der Einfluss beider Effekte auf die Streuung von Elektronen in Heterostrukturen an optischen sowie an akustischen Phononen könnte untersucht werden.

Letztlich ist die Erweiterung des bisher betrachteten Systems um ein 0-dimensionales Teilsystem wünschenswert, so dass die komplette Ladungsträgerkaskade vom Volumenmaterial über den Quantenfilm in einen Quantenpunkt berechnet werden kann.

Kapitel A

Anhang

A.1 Parameter

In dieser Arbeit werden die folgenden Naturkonstanten und Materialparameter für die betrachteten GaAs- und $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ -Systeme verwendet, die aus [17] und [24] entnommen wurden. Sofern nicht anders angegeben, werden die Materialparameter für beide Materialien als gleich angenommen. Die Werte gelten für eine Temperatur von 300K, eventuelle Temperaturabhängigkeiten werden vernachlässigt.

Planck'sches Wirkungsquantum	\hbar	0.6852	meV · ps
Boltzmann-Konstante	k_B	0.08617	meV · K ⁻¹
Elementarladung	e	$1.602 \cdot 10^5$	pA · ps
Vakuum-Dielektrizitätskonstante	ε_0	$1.418 \cdot 10^6$	pA ² · ps ² · meV ⁻¹ · nm ⁻¹
Freie Elektronenmasse	m_e	$5.686 \cdot 10^{-3}$	meV · ps ² · nm ⁻²
Elektronenmasse in GaAs	m_e^{3d}	$0.064 \cdot m_e$	
Elektronenmasse in $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$	m_e^{2d}	$0.057 \cdot m_e$	
LO-Phononen-Frequenz	ω_{LO}	54.71	ps ⁻¹
Deformationspotential	D	$6.8 \cdot 10^3$	meV
Massendichte	ρ	$3.35 \cdot 10^4$	meV · ps ² · nm ⁻⁵
Schallgeschwindigkeit	c_{LA}	0.515	nm · ps ⁻¹
Statische Dielektrizitätskonstante	ε	12.9	
Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante	ε_∞	10.9	
Breite des Quantenfilmes	L_z	6.5	nm

A.2 Numerik

In diesem Kapitel sollen die für die vorliegende Arbeit verwendeten numerischen Methoden erläutert werden, insbesondere im Hinblick auf die Behandlung der Streuung an akustischen Phononen. Die Programmierung erfolgte vollständig in FORTRAN 77 und FORTRAN 95.

Solver

Zur Lösung des Systems gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen erster Ordnung (3.25) wurde ein Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung mit fester Schrittweite verwendet. Ein Großteil der anfallenden Integrationen erfolgte numerisch nach der Simpsonregel, in wenigen Fällen wurde stattdessen eine Riemann-Integration durchgeführt. Um einen Hinweis auf die numerische Stabilität zu erhalten, wurde, soweit möglich, die Erhaltung der Elektronendichte (4.1) geprüft.

Gitter

Die elektronischen Zustände $|k\rangle$ bilden im thermodynamischen Limes ein Kontinuum im rezipro-

ken Raum, entsprechend ist ihre Verteilungsfunktion f_k eine kontinuierliche Funktion der Wellenzahl k . Es wird jedoch angenommen, dass f_k auf hinreichend kleinen Intervallen konstant ist und daher auf einem diskreten Gitter ausgewertet werden kann, wobei jedem Gitterpunkt ein Intervall entspricht.

Es bietet sich an, das Gitter entsprechend der Art der wechselwirkenden Phononen zu wählen. Da durch die Streuung von Elektronen an optischen Phononen solche Zustände gekoppelt werden, die um konstante Werte E_{LO} auf der Energieskala voneinander entfernt sind, wird ein energieäquidistantes Gitter verwendet. Es enthält alle Energiewerte, die von einer Ausgangsverteilung aus erreicht werden können. Damit dies auch für die Streuung zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm gilt, müssen deren jeweilige Bandminima, V_0 und E^{QW} , auf das Gitter gelegt werden. Für beide Teilsysteme wird dann das gleiche Gitter mit dem Grund des Potentialtopfes als Nullpunkt verwendet, wobei der Zustandsvektor sowohl die Quasi-2d- als auch die 3d-Zustände enthält.

Das Gitter muss einerseits so fein gewählt werden, dass die gaussförmige Anfangsverteilung hinreichend aufgelöst ist und sich f_k nicht zu stark zwischen zwei Gitterpunkten ändert. Andererseits müssen genügend Energiezellen mit einer Breite E_{LO} einbezogen werden, so dass zu keiner Zeit Elektronen durch Streuung in höhere Zustände das Gitter verlassen können. Dies ist gerade bei hohen Temperaturen zu beachten. Wegen des relativ geringen Rechenaufwandes bei optischen Phononen können so viele Gitterpunkte verwendet werden, dass eine weitere Erhöhung ihrer Anzahl keine sichtbare Verbesserung liefert. In dieser Arbeit wurden für die Berechnung der Streuung an ausschließlich optischen Phononen 25 Energiezellen mit jeweils 80 Gitterpunkten verwendet.

Die Berechnung der Streuung an akustischen Phononen erfordert hingegen die Verwendung eines impulsäquidistanten Gitters, da die Energieüberträge $\hbar c_{LA} q$ nicht konstant sind, sondern eine kontinuierliche Menge von Werten annehmen können. Im Falle des Volumenmaterials sind die entsprechenden Werte des positiven und negativen Impulsübertrages $|k'_\pm - k|$ auf jeweils ein Intervall beschränkt, das auf einem impulsäquidistanten Gitter für alle Gitterpunkte die gleiche Größe hat: Von einem Zustand mit Wellenzahl k aus können maximal bzw. minimal Zustände mit Wellenzahl $k'_\pm = k \pm 2mc_{LA}/\hbar$ erreicht werden. Daher wechselwirken alle Punkte eines solchen Gitters (abgesehen von jenen am Rand) mit der gleichen Anzahl anderer Gitterpunkte. Auf einem energieäquidistanten Gitter hingegen nimmt die Anzahl der wechselwirkenden Gitterpunkte wegen der quadratischen Elektronendispersion zu großen Energien hin ab, so dass dort keine Wechselwirkung berechnet werden kann.

Die Streuung im Quantenfilm sowie vom Volumenmaterial in den Quantenfilm erfolgt wegen der freien z -Komponente des Phononenimpulses theoretisch von jedem Gitterpunkt aus zu allen anderen Gitterpunkten. Dies wird jedoch numerisch durch die endlichen Grenzen des q_z -Integralen auf endliche Intervalle eingeschränkt. Auch hier würde ein energieäquidistantes Gitter dazu führen, dass bei großen Energien Wechselwirkungen vernachlässigt werden.

Die Anzahl der Gitterpunkte muss im Falle akustischer Phononen als Kompromiss aus Rechenaufwand und Genauigkeit gewählt werden. Der prinzipiell unendlichen Anzahl von wechselwirkenden Zuständen muss dadurch Rechnung getragen werden, dass möglichst viele Gitterpunkte durch Streuung an akustischen Phononen erreicht werden können, da ansonsten die Erhaltung der Elektronendichte stark verletzt wird. Der Rechenaufwand für akustische Phononen ist allerdings wesentlich größer als für optische Phononen, insbesondere für die Streuung zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm. Für die Rechnung mit ausschließlich akustischen Phononen wurde im Volumenmaterial ein Gitter mit 20000 Punkten und im Quantenfilm mit 10000 Punkten verwendet, jeweils bis zu einer Energie von $10E_{LO}$. Im gekoppelten System mit optischen und akustischen Phononen wurden für beide Teilsysteme Gitter mit verschiedenen Ursprüngen auf der Energieskala (bei $E = E^{QW}$ bzw. $E = V_0$, siehe Abb. 2.4) verwendet, allerdings mit der gleichen maximalen Energie von $25E_{LO}$ sowie gleichen Abständen der Gitterpunkte. Für den Quantenfilm wurden 6000 Gitterpunkte vorgegeben, das Gitter des Volumensystems erhielt eine entsprechende ähnliche Anzahl von Punkten.

Durch die Streuung an optischen Phononen werden in einem impulsäquidistanten Gitter im Allgemeinen keine Gitterpunkte erreicht, es muss zwischen den Gitterpunkten interpoliert werden. Dazu werden zu Beginn für jeden Gitterpunkt mit Wellenzahl k jeweils die Wellenzahlen jener Zustände $|k'_\pm\rangle$ berechnet, deren Energie um E_{LO} höher bzw. niedriger ist, und die Punkte des Gitters bestimmt, die von diesen Wellenzahlen den geringsten Abstand besitzen. Diese Punkte werden gespeichert und später in der Runge-Kutta-Routine aufgerufen.

Wechselwirkungsfaktoren

Bei den zentralen Bewegungsgleichungen, die mit dem Runge-Kutta-Verfahren integriert werden, handelt es sich im Prinzip um Integro-Differentialgleichungen, da jeweils auf der rechten Seite der Gleichung eines Zustandes $|k\rangle$ über die Besetzungswahrscheinlichkeiten aller anderen Zustände $|k'\rangle$ integriert werden muss. Im Falle optischer Phononen wird diese Integration in der Markov-Näherung auf eine Summe über zwei Beiträge der Zustände $|k'_+\rangle$ und $|k'_-\rangle$ reduziert, siehe etwa Gl. (3.54). Es bleiben dann die Wechselwirkungsfaktoren (3.55), (3.57) und (3.61) zu berechnen. In vielen Fällen erfordert dies eine numerische Integration in mehreren Dimensionen, weshalb die Berechnung vor der eigentlichen Zeitentwicklung stattfindet und die Faktoren gespeichert werden, um sie später im Runge-Kutta-Verfahren aufzurufen.

Dieses Verfahren wird auch für akustische Phononen angewendet, allerdings muss hier trotz der Markov-Näherung über ein Kontinuum von Zuständen $|k'_\pm\rangle$ integriert werden, siehe etwa Gl. (3.65) für das Volumenmaterial. Das Problem hat hier beispielsweise die folgende Form:

$$\frac{d}{dt}f_k \propto \int_0^\pi d\vartheta \left[h(k'_+(\vartheta), \vartheta) + j(k'_-(\vartheta), \vartheta) \right] \quad (\text{A.1})$$

Der jeweilige Wert von k'_\pm ergibt sich aus der Energie- und Impulserhaltung durch die Bestimmung einer Nullstelle abhängig von ϑ . Geht man nun von einem diskreten Gitter aus, auf dem die Verteilungsfunktionen näherungsweise konstant sind, so kann das ϑ -Integral in eine Summe von Integralen $\int_i d\vartheta$ zerlegt werden, die jeweils einem Gitterpunkt $k'_{\pm,i}$ entsprechen:

$$\frac{d}{dt}f_k \propto \left[\sum_i \int_i d\vartheta h(k'_{+,i}, \vartheta) + \sum_i \int_i d\vartheta j(k'_{-,i}, \vartheta) \right] \quad (\text{A.2})$$

Die Nullstellen k'_\pm werden hierbei mit einem Brent-Verfahren bestimmt und jeweils dem nächstgelegenen Gitterpunkt zugeordnet. Jedes Integral $\int_i d\vartheta$ führt wieder auf einen Wechselwirkungsfaktor zwischen den Gitterpunkten k und $k'_{\pm,i}$, der vorab berechnet und gespeichert werden kann. Es ist zu beachten, dass die phononischen Besetzungswahrscheinlichkeiten n_q eine q - und somit eine k'_\pm -Abhängigkeit besitzen und nicht konstant sind wie im Falle optischer Phononen. Daher muss auch über die n_q integriert werden, sodass sich für die stimulierte Emission sowie die Absorption von Phononen ($\propto n_q$) und für die spontane Emission von Phononen ($\propto 1$) jeweils eigene Faktoren ergeben. Das Vorgehen ist für die Streuung im Quantenfilm und zwischen Volumenmaterial und Quantenfilm analog.

Effektive Temperatur

Zur Bestimmung der effektiven Temperatur T_{eff} einer Elektronenverteilung $f(E, t)$ muss eine Fermi-Verteilung gefunden werden, welche die gleiche Elektronendichte (4.1) und innere Energie (4.2) besitzt wie $f(E, t)$. Dazu ist ein Gleichungssystem in den zwei Veränderlichen T_{eff} und μ numerisch zu lösen:

$$\begin{aligned} n &= \int dE D(E) \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T_{\text{eff}}} + 1} \\ U &= \int dE D(E) \frac{E}{e^{(E-\mu)/k_B T_{\text{eff}}} + 1} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Dies erfolgte mithilfe eines Brent-Verfahrens, wobei ein vorgefertigter FORTRAN 77-Quelltext verwendet wurde. Das Verfahren erforderte die Wahl geeigneter Startwerte für T_{eff} und μ , Hinweise auf entsprechende Werte konnten [24] entnommen werden.

Literaturverzeichnis

- [1] NAG, B. R.: *Physics of Quantum Well Devices*. New York, Boston, Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 2002
- [2] CAPASSO, F.: Band-Gap Engineering: From Physics and Materials to New Semiconductor Devices. In: *Science* 235 (1987), S. 172–176
- [3] MASUMOTO, Y. (Hrsg.) ; TAKAGAHARA, T. (Hrsg.): *Semiconductor Quantum Dots*. Erste Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 2002
- [4] MICHLER, P.: *Single Quantum Dots - Fundamentals, Applications and New Concepts*. Berlin : Springer-Verlag, 2003
- [5] PARK, Young M. ; PARK, Young J. ; KIM, Kwang M. ; SHIN, Jae C. ; SONG, Jin D. ; LEE, Jung I. ; YOO, Keon-Ho: Carrier dynamics in an InGaAs dots-in-a-well structure formed by atomic-layer epitaxy. In: *Phys. Rev. B* 70 (2004), S. 035322
- [6] LORKE, M.: *Optical gain and laser properties of semiconductor quantum-dot systems*, Universität Bremen, Diss., 2008
- [7] SEEBECK, J.: *Carrier-Phonon Interaction in Semiconductor Quantum Dots*, Universität Bremen, Diss., 2009
- [8] IBACH, H. ; LÜTH, H.: *Festkörperphysik*. Siebte Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2009
- [9] GÜNGERICH, M.: *Elektronische Struktur und Kristallgittereigenschaften von metastabilen III-(N,V)-Halbleitersystemen*, Universität Marburg, Diss., 2007
- [10] KITTEL, C.: *Einführung in die Festkörperphysik*. 14. Auflage. München : Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2006
- [11] MAHAN, G. D.: *Many-Particle Physics*. Dritte Auflage. New York, Boston, Dordrecht : Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000
- [12] CZYCHOLL, G.: *Theoretische Festkörperphysik*. Dritte Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2008
- [13] ASHCROFT, N. W. ; MERMIN, D. N.: *Festkörperphysik*. Dritte Auflage. München : Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2007
- [14] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*. Sechste Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2005
- [15] BASTARD, G.: *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Les Ulis Cedex : Les Éditions de Physique, 1996
- [16] BERGMANN, L. ; SCHÄFER, C. ; RAITH, W.: *Lehrbuch der Experimentalphysik Band 6: Festkörper*. de Gruyter, 1992
- [17] RÖSSLER, U. (Hrsg.): *Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds, Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter, Vol. III/41b*. Berlin : Springer-Verlag, 2002

- [18] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik - Grundlagen*. Siebte Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2009
- [19] HAUG, H.: *Statistische Physik: Gleichgewichtstheorie und Kinetik*. Zweite Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2005
- [20] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*. Fünfte Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2005
- [21] JAHNKE, F.: *Theoretische Festkörperphysik, Vorlesungsskript*. Institut für Theoretische Physik, Universität Bremen, WS 2008/2009
- [22] HAKEN, H. (Hrsg.): *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*. Zweite Auflage. Stuttgart : B.G. Teubner, 1993
- [23] SCHUH, K.: *Einfluss von Polaron- und Memory-Effekten auf die Elektron-Phonon-Streuung in Halbleitern*, Institut für Theoretische Physik, Universität Bremen, Studienarbeit, 2005
- [24] KIES, A.: *Beschreibung von Ladungsträgerstreuprozessen durch Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Halbleiter-Nanostrukturen*, Institut für Theoretische Physik, Universität Bremen, Bachelorarbeit, 2010
- [25] NIELSEN, T.R. ; GARTNER, P. ; LORKE, M. ; SEEBECK, J. ; JAHNKE, F.: Coulomb scattering in nitride based self-assembled quantum-dot systems. In: *Phys. Rev. B* 72 (2005), S. 235311

Danksagung

Zuallererst möchte ich mich bei Prof. Dr. Frank Jahnke für die Ermöglichung dieser Arbeit, die Themenstellung und die hervorragende Betreuung bedanken.

Weiterhin danke ich Prof. Dr. Gerd Czycholl für seine Tätigkeit als Zweitgutachter dieser Arbeit und seine Vorlesung zur Theoretischen Festkörperphysik, die mir einige wichtige Grundlagen der Thematik vermittelt hat.

Besonderer Dank gilt Kolja Schuh, Matthias Florian und Dr. Paul Gartner für die anregenden fachlichen Diskussionen sowie nützliche Tips und Ratschläge zu mathematischen und numerischen Problemen. Außerdem gebührt Alexander Kies Dank für die hilfreichen Vergleichsrechnungen.

Darüber hinaus danke ich der gesamten Arbeitsgruppe *Theoretische Halbleiterphysik* für das gute Arbeitsklima und die angenehmen und unterhaltsamen Momente außerhalb der Arbeitszeit.