

Bachelor-Arbeit

# Beschreibung von Ladungsträgerstreuprozessen durch Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Halbleiter-Nanostrukturen

im Studiengang Physik  
des Fachbereiches 1 - Physik, Elektro- und Informationstechnik  
Sommersemester 2010

Alexander Kies

**Erster Gutachter:** Prof. Dr. Frank Jahnke

**Zweiter Gutachter:** Prof. Dr. Peter H. Richter

---

# Vorwort

An dieser Stelle möchte ich den folgenden Personen danken, ohne die das Zustandekommen der vorliegenden Bachelorarbeit nicht möglich gewesen wäre:

Christopher Gies für das Korrekturlesen, das stets offene Ohr und die zahlreichen Hilfestellungen im Umgang mit Matlab und dem Setzen der Arbeit. Außerdem für Diskussionen zur und Erläuterungen der Physik.

Matthias Florian für seine Hilfe bei mathematischen, physikalischen und Computer-Problemen und motivierende und hilfreiche Beiträge.

Paul Gartner für Tipps, Erläuterungen, Rechnungen und seine ausgezeichnete Vorlesung zur Quantenoptik.

Kolja Schuh für Rechnungen und Tipps sowie seine Expertise zum Thema.

Frank Jahnke für die Möglichkeit, diese Arbeit in der Arbeitsgruppe Halbleiterphysik anzufertigen, für die ausgesprochen lehr- und hilfreichen Gespräche, die Motivation, die Korrekturvorschläge und die Begutachtung dieser Arbeit.

Peter Richter für seine Tätigkeit als Zweitgutachter und seine motivierenden Vorlesungen zur theoretischen Mechanik, die mich erstmals mit der theoretischen Physik in Verbindung gebracht haben.

Bruno Schyska, Malte Rösner, David von Kiedrowski und Malte Schüler für 3 Jahre im Bachelorstudium, die viel schneller als von allen erwartet verstrichen sind.

# Kurz-Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird die Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Leitungsband von Galliumarsenid (GaAs) analytisch und numerisch untersucht. Die Fröhlich-Kopplung longitudinal-optischer Phononen an Elektronen wird zu diesem Zweck sowohl für den Fall eines dreidimensionalen Volumenmaterials als auch eines Quantenfilms betrachtet. Auf die Herleitung der Bewegungsgleichungen der elektronischen Zustände und generelle Betrachtungen folgen numerische Berechnungen der Relaxationsdynamiken. Außerdem wird die Kopplung akustischer Phononen über das Deformationspotenzial an Elektronen auf analoge Weise diskutiert.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Zweite Quantisierung	3
2.2	Phononen	5
2.3	Elektronen im Festkörper	7
2.4	Effektive-Masse-Näherung	9
2.5	Die Boltzmann-Gleichung	11
2.6	Quantenfilme	15
3	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	18
3.1	Grundlagen	18
3.1.1	Markov-Approximation	20
3.1.2	Zustandsdichte	21
3.2	Optische Phononen	23
3.3	Akustische Phononen	26
3.4	Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Quantenfilm	28
4	Numerische Resultate	29
4.1	Wechselwirkung mit optischen Phononen	29
4.1.1	Relaxation im GaAs-Volumenmaterial	29
4.1.2	Analytisch lösbare Näherung der zeitlichen Entwicklung	32
4.1.3	Relaxation im GaAs-Quantenfilm	34
4.2	Vergleich der Relaxation im Volumenmaterial und dem Quantenfilm	34
4.2.1	Effektive Temperatur	34
4.2.2	Analytische Lösung der genäherten Relaxation	37
4.3	Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen	42
4.3.1	Relaxation des Systems unter Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen	43
4.3.2	Effektive Temperatur	45
5	Zusammenfassung und Ausblick	47
A	Kapitel im Anhang	49
A.1	Parameter	49
A.2	Die Boltzmannsche Eta-Funktion	49

---

A.3	Exzitonische Einheiten . . . . .	50
A.4	Matrizelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung . . . . .	51
A.5	Numerik . . . . .	53
A.6	Ergänzungen zur Mathematik . . . . .	54
A.6.1	Koeffizienten der analytischen Lösung . . . . .	54
A.6.2	Hauptwert eines Integrals . . . . .	55
Literaturverzeichnis		56

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Rastertunnelmikroskopaufnahme der GaAs-Oberfläche. . . . .	2
2.1	Dispersion der Phononen in GaAs. . . . .	6
2.2	Bandstruktur von Galliumarsenid. . . . .	9
2.3	Schematischer Verlauf des Einschlusspotenzials für einen GaAs/AlGaAs-Quantenfilm. . . . .	17
4.1	Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung unter Berücksichtigung der Fröhlich-Kopplung im GaAs-Volumenmaterial. . . . .	30
4.2	Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung unter Berücksichtigung der Fröhlich-Kopplung im GaAs-Volumenmaterial. . . . .	31
4.3	Vergleich der genäherten und der analytischen Lösung für die zeitliche Entwicklung der Besetzung des Anfangszustandes. . . . .	33
4.4	Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung unter Berücksichtigung der Fröhlich-Kopplung im GaAs-Quantenfilm. . . . .	35
4.5	Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung unter Berücksichtigung der Fröhlich-Kopplung im GaAs-Quantenfilm. . . . .	36
4.6	Vergleich der Wechselwirkungsstärken im Volumenmaterial und dem Quantenfilm. . . . .	37
4.7	Zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur und des chemischen Potentials im GaAs-Volumenmaterial unter Wechselwirkung mit optischen Phononen. . . . .	38
4.8	Die zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur im Volumenmaterial und dem Quantenfilm in halblogarithmischer Auftragung für eine Anfangsverteilung um $k^2 a_0^2 = 25$ . . . . .	39
4.9	Vergleich der genäherten analytischen Lösung mit der vollständigen numerisch bestimmten Lösung für die zeitliche Entwicklung der Besetzung des untersten energetischen Zustandes einer Streuprozesskette. . . . .	42
4.10	Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen im Volumenmaterial. . . . .	43
4.11	Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen im Volumenmaterial. . . . .	44
4.12	Anfangs- und Endverteilung der Streuung an optischen und akustischen Phononen. . . . .	45

---

4.13 Halblogarithmische Auftragung der zeitlichen Entwicklung der effektiven Temperatur des Systems für ein 3D-Volumenmaterial unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen. . . . .	46
--	----

# 1 Einleitung

Elektronen und Phononen wechselwirken auf vielfältige Art und Weise miteinander. Mit diesen Wechselwirkungen stehen diverse in Festkörpern stattfindende Phänomene wie Wärmeleitfähigkeit, elektrische Leitfähigkeit, die konventionelle Supraleitung und möglicherweise die Hochtemperatur-Supraleitung im Zusammenhang. LO-Phononen wechselwirken mit Elektronen über die polare Kopplung, akustische Phononen hauptsächlich über das Deformationspotenzial (Siehe Kap. 3).

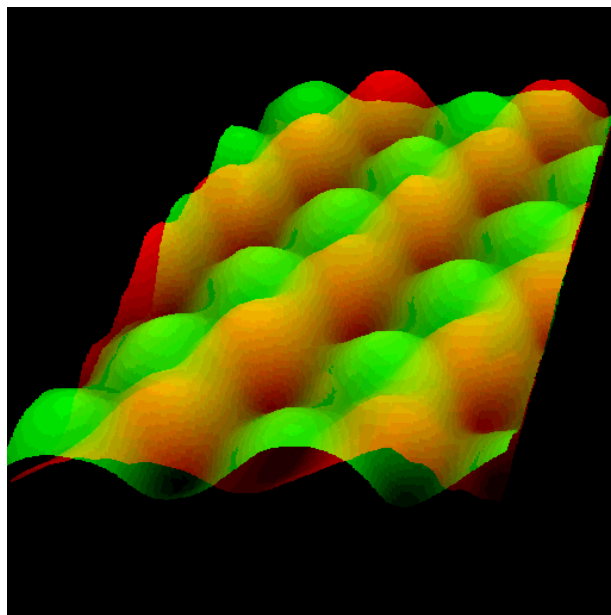
Halbleiter wie Galliumarsenid sind Festkörper, die sich durch eine geringe Energiedifferenz zwischen Valenz- und Leitungsband auszeichnen. Bei Temperaturen nahe des absoluten Nullpunktes ist das Valenzband voll und das Leitungsband unbesetzt. In diesem Zustand ist keine elektrische Leitung möglich. Elektronen können jedoch durch Wärmeschwingungen oder optische Anregung vom Valenz- in das Leitungsband angeregt werden und dort die elektrische Leitung ermöglichen. Die intrinsische Leitfähigkeit von Halbleitern ist daher stark temperaturabhängig. Galliumarsenid als Halbleitermaterial findet beispielsweise bei der Herstellung von integrierten Schaltkreisen, LEDs, Laserdioden und Photovoltaikzellen Anwendung.

Die Arbeit ist in fünf Kapitel gegliedert. Im zweiten Kapitel sollen zunächst die Konzepte, die Grundlage dieser Arbeit sind und das Verständnis erst ermöglichen, dargestellt werden. Im dritten Kapitel wird die Streuung der Elektronen an optischen und akustischen Phononen als maßgebliches Instrument der Relaxation von Elektronen in Halbleiterbauelementen eingeführt. Es werden die an der Wechselwirkung beteiligten Matrixelemente bestimmt und damit die Voraussetzungen für die numerische Behandlung der dynamischen Entwicklung des Systems geschaffen.

Im vierten Kapitel werden die Ergebnisse der numerischen Simulationen dargestellt und analysiert. Untersucht wird dabei die Relaxation einer vorgegebenen Nichtgleichgewichtsverteilung in Richtung des thermodynamischen Gleichgewichtes. Numerisch simuliert wurde die Relaxation in eine GaAs-Volumenmaterialien sowie einem GaAs-Quantenfilm unter Berücksichtigung der polaren Kopplung und der Deformationspotenzial-Wechselwirkung. Untersucht und verglichen wurden des Weiteren die unterschiedlichen Zeitskalen der Streuprozesse in den gegebenen 3D- und 2D-Strukturen.

Im letzten Kapitel befindet sich eine Zusammenfassung der erlangten Resultate sowie ein Ausblick auf eine mögliche Erweiterung dieser Arbeit. Im Anhang finden sich Hinweise zur Numerik, die verwendeten Parameter und Konstanten sowie weiterführende Hinweise und Herleitungen der zugrundeliegenden Physik.





**Abb. 1.1:** Rastertunnelmikroskopaufnahme der GaAs-Oberfläche. Gallium-Atome sind rot, Arsen-Atome grün dargestellt [21].

## 2 Grundlagen

Im Folgenden sollen kurz die in dieser Arbeit verwendeten Konzepte und Methoden dargestellt werden. Eine vertieften Einführung kann hier naturgemäß nicht gegeben werden. Daher erfolgt nur ein Abriss der wichtigsten theoretischen Grundlagen und Überlegungen, auf denen die weiteren Kapitel aufbauen.

### 2.1 Zweite Quantisierung

Die zweite Quantisierung ist ein in der Quantenmechanik häufig verwendeter Formalismus, der zu einer sehr effizienten Beschreibung von Vielteilchenproblemen führt. Charakteristisch hierfür ist die Einführung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die das unkomplizierte Aufstellen von symmetrischen bzw. antisymmetrischen Gesamtwellenfunktionen aus Einteilchenwellenfunktionen ermöglichen.

Die Theorie ist dann von der konkreten Teilchenzahl unabhängig. Wechselwirkungsprozesse werden durch Erzeugung und Vernichtung von Teilchen in bestimmten Zuständen ausgedrückt. Die Gesamtzahl der Teilchen bleibt dabei erhalten. In einem Festkörper trifft man auf sehr große Zahlen an Atomen, Elektronen, Phononen, etc., sodass eine Vielteilchenbeschreibung essenziell ist. Fermionen genügen dem Pauliprinzip, welches besagt, dass sich keine zwei Fermionen im selben Zustand befinden dürfen. Dies folgt aus der Forderung, dass die Gesamtwellenfunktion eines fermionischen N-Teilchensystems total antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung zweier Teilchen sein muss:

$$|\Psi\rangle = -P |\Psi\rangle.$$

Dabei ist P der Permutationsoperator, der die Vertauschung zweier Teilchen beschreibt. Für Bosonen gilt, dass die Gesamtwellenfunktion total symmetrisch bezüglich der Vertauschung sein muss.

Die angesprochenen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind wie folgt definiert: Der Erzeugungsoperator erhöht die Zahl der Teilchen in einem bestimmten Zustand um eines, während der Vernichtungsoperator sie um eines reduziert. Die Wirkung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist:

$$a_k^+ |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_{k+1}\rangle, \quad (2.1)$$

$$a_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_{k-1}\rangle. \quad (2.2)$$

Die Vertauschungsrelationen dieser Operatoren sind

$$[a_{k1}^+, a_{k2}^+]_{\pm} = 0, \quad (2.3)$$

$$[a_{k1}, a_{k2}]_{\pm} = 0. \quad (2.4)$$

Bosonische Erzeugungsoperatoren kommutieren, fermionische antikommutieren.

Die für Fermionen gültige Antivertauschungsrelation liefert das Pauliprinzip:

$$a_k^+ a_k^+ + a_k^+ a_k^+ = (a_k^+)^2 = 0 \quad (2.5)$$

beziehungsweise

$$a_k a_k + a_k a_k = (a_k)^2 = 0, \quad (2.6)$$

es können also keine zwei Fermionen im selben Zustand erzeugt oder vernichtet werden.

Die Vertauschungsrelation zwischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist durch

$$[a_{\alpha}, a_{\beta}^+]_{\pm} = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.7)$$

gegeben.

Vielteilchenzustände  $|n_1, n_2, \dots\rangle$  werden durch mehrfache Anwendung der Erzeugungsoperatoren der verschiedenen Zustände auf den Vakuumzustand konstruiert:

$$|\Psi\rangle = \prod_k (a_k^+)^{n_k} |0\rangle. \quad (2.8)$$

Der Besetzungszahloperator hat als Eigenwert die Besetzung eines bestimmten Zustandes und ist definiert als

$$n_{\alpha r} = a_{\alpha r}^+ a_{\alpha r}. \quad (2.9)$$

Der Teilchenzahloperator  $N$  hat dieselbe Eigenbasis wie der Besetzungszahloperator und ist definiert als

$$N = \sum_r n_{\alpha r}. \quad (2.10)$$

Er beschreibt somit die Gesamtzahl der Teilchen.

## 2.2 Phononen

Die Bewegung von Atomkernen in einem Festkörper bestimmt Eigenschaften wie Wärmeleitfähigkeit, spezifische Wärme, Schallleitfähigkeit, etc. Näherungsweise kann man davon ausgehen, dass die Gitterpunkte im Festkörper für kleine Auslenkungen durch lineare rücktreibende Kräfte verbunden sind. Ein System aus  $n$  gekoppelten harmonischen Oszillatoren hat, quantenmechanisch betrachtet, im Gegensatz zum klassischen Grenzfall, der beliebige Energien aus dem gesamten Spektrum erlaubt, ausschließlich diskrete Energieeigenwerte. Die Energiequanten dieser Schwingungen werden Phononen genannt.

Um die Dispersionsrelation der Phononen für den Fall einer zweiatomigen Basis herzuleiten, bedient man sich eines einfachen, eindimensionalen Modells: Man betrachtet eine Kette aus zwei verschiedenen alternierenden Atomen  $A$  und  $B$  mit den Massen  $m_a$  und  $m_b$ . Diese Atome können dann longitudinal und transversal schwingen und sind über eine Federkonstante  $C$  immer an den jeweils nächsten Nachbarn gekoppelt. Anharmonische Anteile sowie die Kopplung an die Atome, die nicht direkte Nachbarn sind, sollen an dieser Stelle vernachlässigt werden. Dann erhält man als Bewegungsgleichungen der Atome

$$\begin{aligned} m_a \frac{d^2 x_n^a}{dt^2} &= C(x_{n-1}^b + x_{n+1}^b - 2x_n^a), \\ m_b \frac{d^2 x_{n+1}^b}{dt^2} &= C(x_{n+2}^a + x_n^a - 2x_{n+1}^b). \end{aligned}$$

Der obere Index der Auslenkung  $x_u^o$  kennzeichnet die Art des Atoms und der untere seine Ruheposition im Gitter. Die Lösung dieses Gleichungssystems sind ebene Wellen der Form

$$\begin{aligned} x_n^a &= E_a e^{i(nqd - \omega t)}, \\ x_{n+1}^b &= E_b e^{i((n+1)qd - \omega t)}. \end{aligned}$$

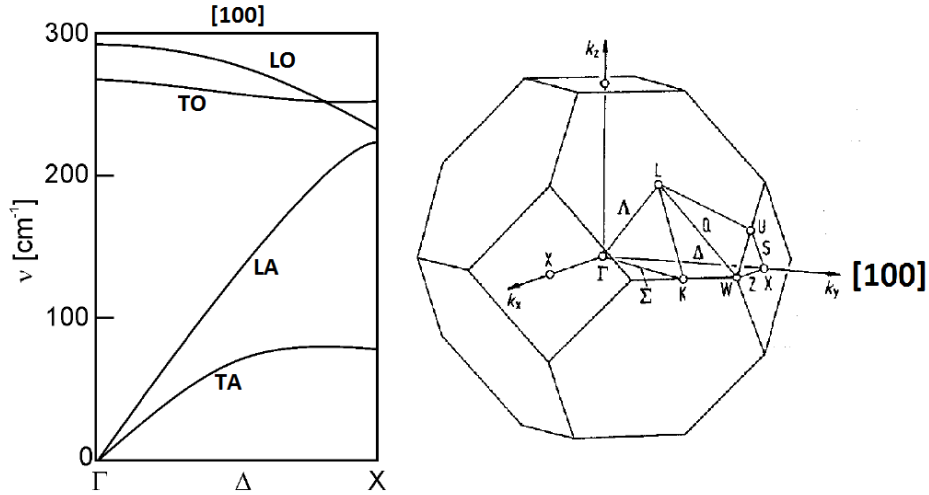
Nach dem Einsetzen in die Bewegungsgleichungen entsteht das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} m_a \omega^2 E_a &= C [2E_a - E_b e^{-iqd} - E_b e^{iqd}], \\ m_b \omega^2 E_b &= C [2E_b - E_a e^{-iqd} - E_a e^{iqd}], \end{aligned} \quad (2.11)$$

welches nur, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet, nicht-triviale Lösungen hat. Aus dieser Bedingung folgt die Dispersion der Phononen:

$$\omega_{1,2}^2(q) = C \frac{m_a + m_b}{m_a m_b} \pm \frac{C}{m_a m_b} \sqrt{m_a^2 + m_b^2 + 2m_a m_b \cos(2qd)}. \quad (2.12)$$

Dabei ist  $\omega_1$  mit dem positiven zweiten Summanden die Dispersion optischer Phononen, was sich durch Vergleich der Auslenkungen beider Atome verifizieren lässt und  $\omega_2$  die Dispersion der akustischen Phononen. Der Unterschied zwischen der Dispersion von TO-



**Abb. 2.1:** Dispersion der Phononen in GaAs entlang einer ausgezeichneten Symmetrieachse des reziproken Gitters und die zu GaAs gehörende Wigner-Seitz-Zelle [19, 20].

(transversal optischen) und LO-Phononen (longitudinal optischen) resultiert aus dem ionischen Anteil der Bindung.

Das aus Gleichung (2.11) ermittelte Amplitudenverhältnis ist durch

$$\frac{E_A}{E_B} = -\frac{2C \cos(qd)}{m_a \omega_{\pm}^2 - 2C}$$

gegeben. Für große Wellenlängen  $\lambda$  wird daraus

$$\begin{aligned} \frac{E_A}{E_B^+} &= -\frac{m_b}{m_a}, \\ \frac{E_A}{E_B^-} &= 1. \end{aligned}$$

Außerdem ist die Dispersion periodisch, daher genügt eine Beschränkung auf die 1. Brillouinzone (im Folgenden BZ abgekürzt) zur Beschreibung vollkommen.

Die Grenzwerte in der 1. BZ sind

$$\begin{aligned}\omega_1^2(q \rightarrow 0) &= 2C \frac{m_a + m_b}{m_a m_b}, \\ \omega_2^2(q \rightarrow 0) &= 0, \\ \omega_1^2\left(\frac{\pi}{a}\right) &= \frac{2C}{m_b}, \\ \omega_2^2\left(\frac{\pi}{a}\right) &= \frac{2C}{m_a}.\end{aligned}$$

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei Arten der Kopplung zwischen Phononen und Elektronen betrachtet. Elektronen koppeln an LO-Phononen über die Fröhlich-Kopplung. In Ionenkristallen wie GaAs gibt es sowohl positiv als auch negativ geladene Ionen, die im schwingenden Zustand ein Polarisationsfeld erzeugen. Dieses Polarisationsfeld erzeugt ein elektrisches Feld, das die Grundlage der Fröhlich-Kopplung darstellt. Akustische Phononen hingegen koppeln über die Deformationspotenzial-Wechselwirkung an Elektronen.

## 2.3 Elektronen im Festkörper

Zur Beschreibung von Elektronen im Festkörper dient die Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

Dabei sind  $\mathbf{k}$  die Eigenwerte des Gitterimpulses. Zunächst handelt es sich bei Elektronen im Festkörper um ein Vielteilchenproblem. Dieses wird im Rahmen der Bloch-Theorie auf ein effektives Einteilchen-Problem unter der Annahme, dass das einzelne Elektron sich in einem effektiven Potenzial  $V(\mathbf{r})$  bewegt, zurückgeführt. Dabei wird angenommen, dass  $V(\mathbf{r})$  die Periodizität des Kristallgitters besitzt:

$$\begin{aligned}V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) &= V(\mathbf{r}), \\ \mathbf{R}_n &= \sum_i n_i \mathbf{a}_i.\end{aligned} \quad (2.14)$$

$\mathbf{R}_n$  ist ein Translationsvektor und die  $\mathbf{a}_i$  sind die Basisvektoren, die die Elementarzelle des Gitters aufspannen. Ein periodisches Potenzial lässt sich in einer Fourier-Reihe entwickeln:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (2.15)$$

wobei  $\mathbf{g}$  ein reziproker Gittervektor ist. Die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$  wird dann nach ebenen Wellen entwickelt:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2.16)$$

Setzt man diese Entwicklung in die Schrödinger-Gleichung ein, folgt damit

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{g}} C_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{g}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{g})\mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.17)$$

und es ergibt sich für die Koeffizienten die Bedingung

$$\left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} = 0.$$

Gekoppelt sind folglich die Ein-Elektronen-Zustände, deren  $\mathbf{k}$  sich um Vielfache der reziproken Gittervektoren unterscheiden. Jedem Einelektronen-Problem lässt sich daher ein  $\mathbf{k}$ -Vektor aus der Elementarzelle des reziproken Gittervektors zuordnen:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} =: u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2.18)$$

Die Folgerung  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$  ist das Bloch-Theorem, die Wellenfunktionen heißen entsprechend Blochwellen. Des Weiteren folgt durch Einsetzen in die Schrödingergleichung

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}+\mathbf{g}). \quad (2.19)$$

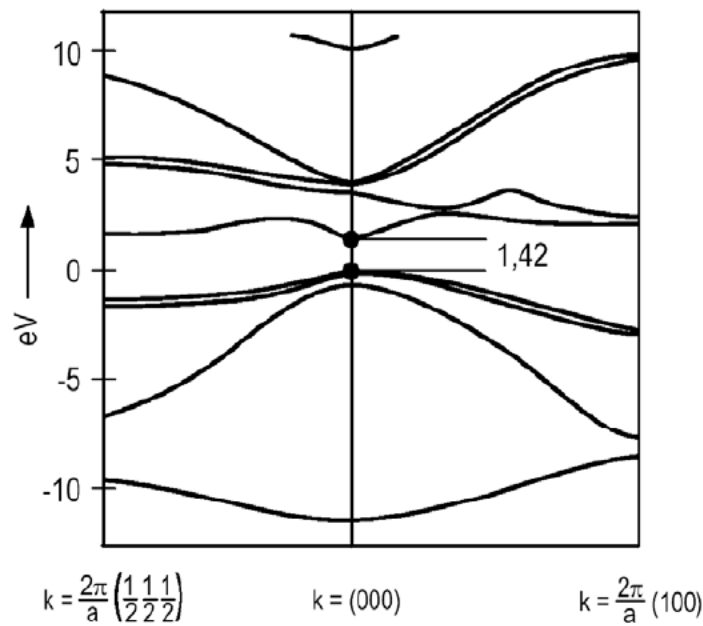
Daher genügt auch zur Beschreibung der Energien der Blick auf die erste BZ.

## 2.4 Effektive-Masse-Näherung

Die Effektive-Masse-Näherung besteht darin, die tatsächliche Dispersion in der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes durch eine parabolische Dispersion

$$E_\nu(\mathbf{k}) = E_\nu^G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\nu} \quad (2.20)$$

zu ersetzen. Dabei ist  $E_\nu^G$  der Energiewert an der Bandlücke und  $\nu$  der Bandindex. Es findet also ein Ausdruck analog zur Dispersion des freien Elektrons mit dem Unterschied, dass statt der gewöhnlichen Elektronen-Masse  $m_0$  eine effektive Masse  $m_\nu$  benutzt wird, Verwendung. Zu einer starken Vereinfachung führt diese Näherung vor allem, sofern die effektive Masse als annähernd konstant angenommen werden kann. Um die Bedingung dafür anschaulich zu begründen, folgen einige Betrachtungen. Da im Folgenden nur Ladungsträger im niedrigsten Leitungsband betrachtet werden sollen, wird der Bandindex zur Vereinfachung der Notation weggelassen und der Nullpunkt der Energieachse für  $k = 0$  gewählt.



**Abb. 2.2:** Bandstruktur für Galliumarsenid in zwei ausgewählten Richtungen im  $k$ -Raum [18].

Elektronen kann man eine Gruppengeschwindigkeit zuordnen:

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}. \quad (2.21)$$



Verrichtete Arbeit ist in der klassischen Mechanik durch

$$E = \int_S \mathbf{F} d\mathbf{r},$$

beziehungsweise in differenzieller Ausdrucksweise durch

$$dE(\mathbf{k}) = \mathbf{F} \mathbf{v} dt,$$

gegeben. Mit der Definition der Gruppengeschwindigkeit  $v$  der Elektronen folgt dann

$$\frac{dE(\mathbf{k})}{dt} = \frac{dE(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \frac{\mathbf{F}}{\hbar}. \quad (2.22)$$

Das zweite Newtonsche Axiom  $F = \frac{dm}{dt}v + \frac{dv}{dt}m$  führt für eine konstante effektive Masse zu

$$m \frac{dv(\mathbf{k})}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}. \quad (2.23)$$

Setzt man nun für die Gruppengeschwindigkeit den Ausdruck (2.21) ein, so erhält man

$$m \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}, \quad (2.24)$$

was nach Umformen der Definition der effektiven Masse entspricht:

$$\left(\frac{1}{m}\right)_i = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2}. \quad (2.25)$$

$(\frac{1}{m})_i$  ist der auf die Hauptachse  $i$  transformierte Tensor der reziproken effektiven Masse. In der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes, in der die tatsächliche Dispersion durch die parabolische Dispersion genähert werden kann, ist die effektive Masse per Definition konstant.

## 2.5 Die Boltzmann-Gleichung

Die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{k}} - (\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})) \nabla_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = \left. \frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{St} \quad (2.26)$$

ist die grundlegende Differentialgleichung der kinetischen Gastheorie mit  $n_{\mathbf{k}}(t)$  im Rahmen dieser Arbeit als der Verteilungsfunktion der Elektronen im Leitungsband.

Eine konkrete Herleitung der Boltzmann-Gleichung soll an dieser Stelle nicht erfolgen, siehe [4]. Das Verständnis der Boltzmann-Gleichung ist jedoch für die sich an dieses Kapitel anschließenden Ergebnisse von Bedeutung.

Die linke Seite der Gleichung ist das Strömungsglied und enthält die Wirkung äußerer Felder und Kräfte auf das betrachtete System. Die auf der rechten Seite der Gleichung stehende Streurrate beschreibt den Effekt von Stößen zweier Teilchen im System. Die Gleichung beschreibt also das Gleichgewicht zwischen den äußeren und den inneren wirkenden Kräften.

In einem Festkörper ändert sich die Elektronenverteilung aufgrund äußerer Felder oder eines Temperaturgradienten, bis sich ein Gleichgewicht durch die Streuung der Elektronen an Phononen eingestellt hat. Fermis goldene Regel liefert die gesuchte Veränderung der Verteilungsfunktion durch Stöße.

In der Literatur wird häufig der Stoßterm für ein Fermigas angegeben [4]. Bei den Stößen handelt es sich um Coulomb-Streuung der Ladungsträger, der Stoßterm hat die Gestalt

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{St} = & - \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}1, \mathbf{k}1'} \frac{\pi}{\hbar} |W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}1, \mathbf{k}', \mathbf{k}1'} - W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}1, \mathbf{k}1', \mathbf{k}'}|^2 \\ & \cdot \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}1, \mathbf{k}'+\mathbf{k}1'} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}1} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}1'}) \\ & \cdot [n(\mathbf{k})n(\mathbf{k}1) * (1 - n(\mathbf{k}'))(1 - n(\mathbf{k}1')) - n(\mathbf{k}')n(\mathbf{k}1')(1 - n(\mathbf{k}))(1 - n(\mathbf{k}1))]. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Das ist das Boltzmannsche Stoßintegral mit dem Matrixelement  $W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}1, \mathbf{k}', \mathbf{k}1'}$ , welches die Wechselwirkung beschreibt, wobei  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k}'$  bzw.  $\mathbf{k}1$  und  $\mathbf{k}1'$  die Zustände freier Teilchen sind, in die aus dem jeweils anderen gestreut werden kann.

Offenkundig verringert der Prozess  $\mathbf{k} + \mathbf{k}1 \rightarrow \mathbf{k}' + \mathbf{k}1'$  die Besetzung des Zustandes  $\mathbf{k}$ , während der inverse Prozess  $\mathbf{k} + \mathbf{k}1 \leftarrow \mathbf{k}' + \mathbf{k}1'$  die Besetzung erhöht. Da nur der eine  $\mathbf{k}$ -Wert vorgegeben ist, muss über alle anderen summiert werden.

Obwohl in dieser Arbeit die Elektron-Phonon-Wechselwirkung betrachtet wird, ist es an dieser Stelle instruktiv, einige Eigenschaften der Boltzmann-Gleichung anhand der Coulomb-Streuung zu diskutieren.

Erhalten sind im Zusammenhang mit jeder Wechselwirkung Impuls und Energie. Eine Auswertung der  $\delta$ -Distributionen zeigt, dass Stöße nur unter Erhaltung der Energie stattfinden können. In einem endlich großen System ist die Energie diskretisiert, da auch Impulse und

Wellenvektoren quantisiert sind:

$$\epsilon = \frac{2\pi\hbar^2}{2mL^2} \sum_i n_i^2.$$

Das bedeutet, dass es in endlich großen Systemen vorkommen kann, dass das Argument der  $\delta$ -Distribution nie 0 ist.

Der Quasiergodenhypothese zufolge kommt das System in einem endlich abgeschlossenen System jedem Punkt auf der Energieschale im Phasenraum beliebig nahe, also auch der Anfangskonstellation des Systems [22]. Allerdings wächst die Zeit, bis dieses Ereignis eintritt, mit der Größe des Systems. Daher liegt wirklich irreversibles Verhalten nur für unbegrenzt große Systeme vor.

Alle Betrachtungen im Rahmen dieser Arbeit werden im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  durchgeführt, daher sind ein kontinuierliches Energiespektrum und irreversibles Verhalten gegeben. Dass die durch die Boltzmann-Gleichung beschriebenen Stöße zu einem Gleichgewichtszustand führen, ist allerdings nicht gesagt. Um dies zu zeigen, also das Überführen des Systems durch die Boltzmann-Gleichung in ein Gleichgewicht, das bei Abwesenheit externer Felder durch das thermische Gleichgewicht gegeben ist, führt man eine beliebige Funktion  $F(\mathbf{r}, \mathbf{k}, n_{\mathbf{k}}, t)$  ein, für die gilt [4]:

$$\langle F(\mathbf{r}, t) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}, n_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}}. \quad (2.28)$$

Zusammen mit (2.27) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \langle F \rangle}{\partial t} \right|_{st} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ n_{\mathbf{k}} \frac{\partial F(\mathbf{k})}{\partial n_{\mathbf{k}}} + F(\mathbf{k}) \right] \frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1'} w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}', \mathbf{k}_1') \\ &\quad \cdot \left[ \frac{\partial(F n_{\mathbf{k}})}{\partial n_{\mathbf{k}}} + \frac{\partial(F n_{\mathbf{k}})}{\partial n_{\mathbf{k}_1}} - \frac{\partial(F n_{\mathbf{k}})}{\partial n_{\mathbf{k}'}} - \frac{\partial(F n_{\mathbf{k}})}{\partial n_{\mathbf{k}_1'}} \right] \\ &\quad \cdot (n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_1} (1 - n_{\mathbf{k}'}) (1 - n_{\mathbf{k}_1'}) - (1 - n_{\mathbf{k}}) (1 - n_{\mathbf{k}_1}) n_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}_1'}) \end{aligned}$$

mit  $w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}', \mathbf{k}_1')$  als der durch Fermis goldene Regel gegebenen Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit. Wählt man nun die ursprünglich als beliebig angenommene Funktion  $F$  durch die Bedingung

$$n_{\mathbf{k}} F = n_{\mathbf{k}} \ln(n_{\mathbf{k}}) + (1 - n_{\mathbf{k}}) \ln(1 - n_{\mathbf{k}}),$$

und summiert über  $\mathbf{k}$ , so ist der entstehende Ausdruck

$$H(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}} \ln(n_{\mathbf{k}}) + (1 - n_{\mathbf{k}}) \ln(1 - n_{\mathbf{k}})]. \quad (2.29)$$

die Eta-Funktion eines entarteten Fermi-Gases (für die Definition der Eta-Funktion und weitere Informationen, siehe A2), die über

$$s(\mathbf{r}, t) = -k_b H(\mathbf{r}, t) \quad (2.30)$$

mit der Entropiedichte verknüpft ist. Es folgt für die zeitliche Entwicklung:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial H}{\partial t} \right|_{St} &= \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_{St} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} \ln(n_{\mathbf{k}}) + (1 - n_{\mathbf{k}}) \ln(1 - n_{\mathbf{k}})) \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1'} w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}', \mathbf{k}_1') \ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_1} (1 - n_{\mathbf{k}'}) (1 - n_{\mathbf{k}_1'})}{(1 - n_{\mathbf{k}}) (1 - n_{\mathbf{k}_1}) n_{\mathbf{k}_1'} n_{\mathbf{k}'}} \right) \\ &\quad \cdot (n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_1} (1 - n_{\mathbf{k}'}) (1 - n_{\mathbf{k}_1'}) - (1 - n_{\mathbf{k}}) (1 - n_{\mathbf{k}_1}) n_{\mathbf{k}_1'} n_{\mathbf{k}'}). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Die Terme hinter dem Summenzeichen haben die Form  $\ln \left( \frac{a}{b} \right) \cdot (a - b)$ , also ist genau einer der beiden Faktoren immer kleiner null oder beide sind null. Daher nimmt die Eta-Funktion stetig ab:  $\left. \frac{\partial H}{\partial t} \right|_{St} \leq 0$ . Die Entropie nimmt daher gemäß (2.30) durch den Streuprozess zu, das System wird also in das thermodynamische Gleichgewicht überführt. Um die Dynamik der Eta-Funktion zu erhalten, multipliziert man die Boltzmann-Gleichung mit  $\frac{\partial F n_{\mathbf{k}}}{\partial n_{\mathbf{k}}}$  und summiert über  $\mathbf{k}$ .

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial(F n_{\mathbf{k}})}{\partial n_{\mathbf{k}}} \frac{\partial(n_{\mathbf{k}})}{\partial t} + \sum_{\mathbf{k}, i} \frac{\partial(F n_{\mathbf{k}})}{\partial n_{\mathbf{k}}} \frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial x_i} \cdot v_i \\ &- \sum_{\mathbf{k}, i} \frac{\partial V_i}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial k_i} (n_{\mathbf{k}} \ln(n_{\mathbf{k}}) + (1 - n_{\mathbf{k}}) \ln(1 - n_{\mathbf{k}})) = \left. \frac{\partial H}{\partial t} \right|_{St} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Der dritte Summand ist ein verschwindendes Oberflächenintegral. Das Ergebnis ist die Transportgleichung der H-Funktion. Im System gibt es 5 Erhaltungsgrößen:

$$\begin{aligned} F_1 &= \epsilon_k, \\ F_{2,3,4} &= v_{1,2,3}, \\ F_5 &= 1. \end{aligned}$$

Sobald die Gleichgewichtsverteilung erreicht wurde, müssen sich Stöße aus 2 betrachteten Zuständen ineinander kompensieren, also muss

$$(n_{\mathbf{k}}^{eq} n_{\mathbf{k}_1}^{eq} (1 - n_{\mathbf{k}'}^{eq}) (1 - n_{\mathbf{k}_1'}^{eq}) - n_{\mathbf{k}'}^{eq} n_{\mathbf{k}_1'}^{eq} (1 - n_{\mathbf{k}}^{eq}) (1 - n_{\mathbf{k}_1}^{eq})) = 0$$

für zwei beliebige Zustände gelten. Logarithmieren der Gleichung führt zu

$$\ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}}^{eq}}{1 - n_{\mathbf{k}}^{eq}} \right) + \ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}1}^{eq}}{1 - n_{\mathbf{k}1}^{eq}} \right) = \ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}'}^{eq}}{1 - n_{\mathbf{k}'}^{eq}} \right) + \ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}1'}^{eq}}{1 - n_{\mathbf{k}1'}^{eq}} \right).$$

Folglich ist auch  $\ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}}^{eq}}{1 - n_{\mathbf{k}}^{eq}} \right)$  eine Erhaltungsgröße, die als Linearkombination der fünf physikalischen Erhaltungsgrößen darstellbar sein muss:

$$\ln \left( \frac{n_{\mathbf{k}}^{eq}}{1 - n_{\mathbf{k}}^{eq}} \right) = \beta\mu + \beta\mathbf{v}\mathbf{k} - \beta\epsilon_{\mathbf{k}}.$$

Die Lösung dieser Gleichung ist die Gleichgewichtsverteilung der Fermionen

$$n_{\mathbf{k}}^{eq} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \mu)} + 1}, \quad (2.33)$$

analog lässt sich die Gleichgewichtsverteilung der Bosonen, in diesem Fall der Phononen (Die Teilchenzahl ist hierbei keine Erhaltungsgröße), herleiten:

$$g_{\mathbf{k}}^{eq} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})} - 1}. \quad (2.34)$$

Dabei ist  $\mathbf{v}$  die Driftgeschwindigkeit.

Diese Betrachtungen waren für ein Coulomb-wechselwirkendes Fermi-Gas, also ein System aus z.B. freien Elektronen, die nur über die elektromagnetische Wechselwirkung interagieren.

Der in dieser Arbeit betrachtete Elektron-Phonon-Wechselwirkungsprozess in einem Festkörper wird durch Streuraten der Form

$$\frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} w(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \pm \mathbf{q}) \left[ n_{\mathbf{k}}(1 - n_{\mathbf{k}'})(\frac{1}{2} + g(\mathbf{q}) \pm \frac{1}{2}) - (1 - n_{\mathbf{k}})n_{\mathbf{k}'}(\frac{1}{2} + g(\mathbf{q}) \mp \frac{1}{2}) \right] \quad (2.35)$$

mit der in einem 3D-System durch

$$w(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \pm \mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |W_q|^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \pm \mathbf{q}} \delta(\Delta E) \quad (2.36)$$

gegebenen intrinsischen Streuraten pro Zeiteinheit beschrieben. Regt man die Verteilung auf beliebige physikalisch realisierbare Weise an, so relaxiert sie gegen die genannten Gleichgewichtsverteilungen. Diese Tatsache wird für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Kapitel 4 numerisch untersucht und bestätigt.

## 2.6 Quantenfilme

Quantenfilme sind durch eine Abfolge verschiedener Schichten mit unterschiedlichen Bandlücken charakterisiert (Abbildung 3.1). Physikalisch realisierbar sind solche Strukturen durch moderne Kristallwachstumsverfahren wie die Molekularstrahlepitaxie. Das Material der aufgewachsenen Quantenschicht zeichnet sich durch eine im Vergleich zum Hauptmaterial kleinere Bandlücke aus.

Die Elektronen sind in solchen Quantenschichten nur innerhalb der Ebene, die parallel zum Materialübergang liegt, frei beweglich. Orthogonal zu dieser Richtung entspricht die Situation der Elektronen der in einem endlich tiefen Quantentopf. Die Wellenfunktion wird in einer solchen Struktur als

$$\Psi(\mathbf{r}) = \xi_n(z) \frac{e^{i(k_x x + k_y y)}}{L} u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.37)$$

angesetzt. Diesen Ansatz bezeichnet man als Einhüllenden-Näherung. Für ein unendlich hohes Potenzial wären die Zustandsenergien dann proportional  $\frac{n}{L^2}$ ,  $n \in N$ . Die Energien der möglichen Zustände hängen also von der Breite des Topfes ab.

Innerhalb der Schicht ist die Bewegung der Elektronen nicht eingeschränkt, daher bilden die verschiedenen Energieniveaus Unterbänder. Das Potenzial in z-Richtung ist in einem Quantenfilm durch

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \text{falls } -L/2 < z < L/2 \\ V, & \text{falls } |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2.38)$$

gegeben. Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung lautet dann unter Berücksichtigung des Ansatzes (2.37)

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V \right) \xi(z) = E_z \xi(z). \quad (2.39)$$

Diese Gleichung hat die Eigenfunktionen

$$\xi(z) = A \sin(k_z z) + B \cos(k_z z),$$

wobei  $k_z^2 = 2m_e \frac{E_z}{\hbar^2}$  gilt.

Die Randbedingungen für ein unendlich hohes Potenzial  $V \rightarrow \infty$  sind

$$\xi\left(\frac{L}{2}\right) = \xi\left(-\frac{L}{2}\right) = 0. \quad (2.40)$$

Sowohl für die Sinus- als auch für die Cosinus-Funktion gilt  $f(a) = f(-a) = 0$  mit  $a = n\pi$ ,  $n \in N$  für die Sinus- und  $a = \frac{2n+1}{2}\pi$ ,  $n \in N$  für die Cosinus-Funktion. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die Sinus-Funktion um den Nullpunkt antisymmetrisch und die Cosinus-Funktion symmetrisch verläuft, lassen sich die Eigenzustände in gerade und

ungerade Zustände unterteilen.

$$\begin{aligned}\xi_{gerade}(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{L}(2n-1)z\right), n \in N \\ \xi_{ungerade}(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}2nz\right), n \in N.\end{aligned}$$

Daraus folgen die möglichen Energien

$$\begin{aligned}E_{z,gerade} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} (2n-1)^2, \\ E_{z,ungerade} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} (2n)^2.\end{aligned}$$

Die Energien sind also quantisiert, nicht jeder Zustand kann eingenommen werden, was zur Entstehung von Unterbändern führt. Die Grundzustandsenergie ist nichts anderes als die aus der Ort-Impuls-Unschärfe folgende Vakuumenergie. Unter Berücksichtigung der kinetischen Energie innerhalb der Ebene lässt sich die Gesamtenergie dann als

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\pi^2 n^2}{L^2} + k_{xy}^2 \right) \quad (2.41)$$

angeben. Innerhalb der Ebene ist dies im Abhängigkeit vom Unterband die bereits diskutierte Dispersionsparabel. Das Modell eines unendlich hohen Potentials ist häufig eine gute Näherung der Realität. Ersetzt man es durch ein endliches Potenzial, so muss berücksichtigt werden, dass die Wellenfunktion in der Potenzialbarriere nicht verschwindet. In der Barriere wird die Wellenfunktion in z-Richtung dann als

$$\xi = C_{\pm} e^{\pm \kappa_z z} \quad (2.42)$$

mit

$$\kappa_z^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (V - E_z)$$

angesetzt. Die Tatsache, dass die Wellenfunktion sowie ihre Ableitung an jeder Stelle stetig sein muss, führt zu einem Gleichungssystem, dessen Umformung die Lösungen

$$\xi_{gerade}(z) = \begin{cases} B \cos(k_z z), & \text{falls } -L/2 < z < L/2 \\ C e^{-\kappa_z z}, & \text{falls } z > L/2 \\ C e^{\kappa_z z}, & \text{falls } z < -L/2 \end{cases} \quad (2.43)$$

$$\xi_{ungerade}(z) = \begin{cases} A \sin(k_z z), & \text{falls } -L/2 < z < L/2 \\ C e^{-\kappa_z z}, & \text{falls } z > L/2 \\ -C e^{\kappa_z z}, & \text{falls } z < -L/2 \end{cases} \quad (2.44)$$

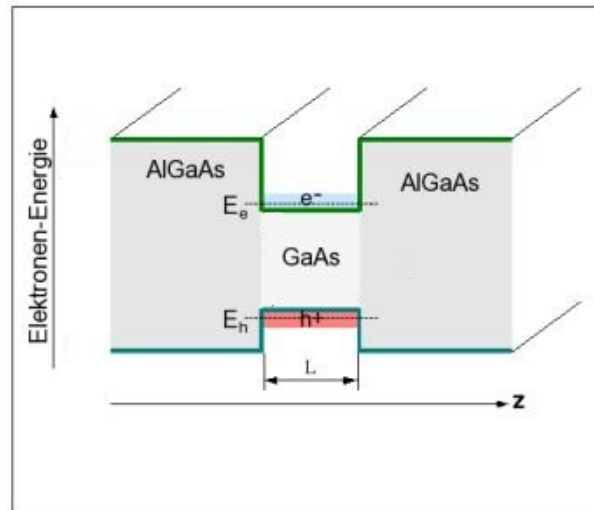
mit der Bedingung

$$\sqrt{E_z} \tan \left( \sqrt{\frac{m_e E_z}{2\hbar^2}} \right) = \sqrt{V - E_z} \quad (2.45)$$

für die geraden und

$$-\sqrt{E_z} \cot \left( \sqrt{\frac{m_e E_z L^2}{2\hbar^2}} \right) L = \sqrt{V - E_z} \quad (2.46)$$

für die ungeraden Zustände liefert. Die Zahl der Zustände im Quantentopf hängt von der Größe der Potenzialdifferenz ab.



**Abb. 2.3:** Schematischer Verlauf des Einschlusspotenzials in Wachstumsrichtung ( $z$ -Richtung) für Elektronen( $e^-$ ) und Löcher( $h^+$ ) für einen GaAs/AlGaAs-Quantenfilm der Breite  $L$  [16].



## 3 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

### 3.1 Grundlagen

Der Hamilton-Operator eines aus Elektronen und Phononen bestehenden Systems setzt sich aus den Hamilton-Operatoren der isolierten Systeme sowie dem Hamilton-Operator der Wechselwirkung zusammen:

$$H = H_e + H_{phn} + H_{int}, \quad (3.1)$$

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (3.2)$$

$$H_{phn} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} \left( b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.3)$$

Der betrachtete Hamilton-Operator der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist gegeben durch

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} W_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}} + h.k.), \quad (3.4)$$

wobei  $h.k.$  das hermitesch konjugierte des vorangehenden Termes ist. Der linke Summand beschreibt die Vernichtung eines Phonons im Zustand  $\mathbf{q}$  und eines Elektrons im Zustand  $\mathbf{k}$  sowie die Erzeugung eines Elektrons im Zustand  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ . Es wird also die elementare Wechselwirkung dargestellt durch den Übergang eines Elektrons vom Zustand  $\mathbf{k}$  in den Zustand  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  unter Absorption eines Phonons mit dem Impuls  $\mathbf{q}$ . Umgekehrt verhält es sich mit dem anderen Summanden, der den Übergang eines Elektrons aus dem Zustand  $\mathbf{k}$  in den Zustand  $\mathbf{k} - \mathbf{q}$  beschreibt.

$W_{\mathbf{q}}$  ist das Matrixelement der jeweiligen Kopplung. Im Folgenden wird die Coulomb-artige Fröhlich-Kopplung für optische Phononen und das Deformationspotenzial für akustische Phononen untersucht. Die elektronischen Besetzungen sind durch  $n_{\mathbf{k}}(t) = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle$  gegeben.

Aus der Heisenberg-Bewegungsgleichung für Operatoren folgt dann durch Einsetzen

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \langle [H_{int}(t), a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}] \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, l} W_{\mathbf{q}} \langle (a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) - a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) \\ &\quad + b_{\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) - b_{\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{k}}(t)) \rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Für die Ableitung des Erwartungswertes eines Produktes aus Operatoren gilt

$$\frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \left\langle \frac{da_{\mathbf{k}}^+}{dt} a_{\mathbf{k}} \right\rangle + \left\langle a_{\mathbf{k}}^+ \frac{da_{\mathbf{k}}}{dt} \right\rangle.$$

Die Ableitungen der einzelnen Operatoren folgen wiederum aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen mit dem Hamilton-Operator (3.1) - (3.4),

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\hbar i} \left( \epsilon_k a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right), \\ \frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}}^+ &= \frac{1}{\hbar i} \left( \epsilon_k a_{\mathbf{k}}^+ + \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \right), \\ \frac{d}{dt} b_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\hbar i} \left( \hbar \omega_{LO} b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} M_{-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \right), \\ \frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}}^+ &= \frac{1}{\hbar i} \left( \hbar \omega_{LO} b_{\mathbf{q}}^+ + \sum_{\mathbf{k}} M_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \right). \end{aligned}$$

Um die Bewegungsgleichungen der Erwartungswerte der in (3.5) aus jeweils 3 Operatoren bestehenden Produkte aufzustellen, muss auch der  $H_0$ -Anteil des Hamilton-Operators berücksichtigt werden:

$$\frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_k - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) \rangle \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}'} W_{\mathbf{q}'} \langle [a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t), b_{\mathbf{q}'}^+(t) a_{\mathbf{k}'}^+(t) a_{\mathbf{q}'+\mathbf{k}'}] \rangle \\ &\approx \frac{i}{\hbar} (\epsilon_k - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) \rangle \\ &- \frac{i}{\hbar} W_{\mathbf{q}} (n_{\mathbf{k}}(t)(1 - n_{\mathbf{k}'}(t))(1 + N_{\mathbf{q}}) - (1 - n_{\mathbf{k}}(t))n_{\mathbf{k}'}(t)N_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Im Schritt, der zu (3.7) führt, wurden die entstandenen Ausdrücke faktorisiert. Erst diese Faktorisierungsnäherung,

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}'} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{l}'} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{l}} \rangle \delta_{\mathbf{k},\mathbf{l}'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{l}} - \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{l}} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{l}'} \rangle \delta_{\mathbf{k},\mathbf{l}} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{l}'}, \quad (3.8)$$

ermöglicht es, eine geschlossene Gleichung für  $n_{\mathbf{k}}$  zu erhalten. Integration von Gleichung (3.7) liefert die formale Lösung:

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} W_{\mathbf{q}} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t')} \\ &\quad \cdot (n_{\mathbf{k}}(t')(1 - n_{\mathbf{k}'}(t'))(1 + N_{\mathbf{q}}) - (1 - n_{\mathbf{k}}(t'))n_{\mathbf{k}'}(t')N_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Analog geschieht diese Rechnung für die 3 anderen Terme ebenfalls unter Faktorisierung. Dann folgt für die Bewegungsgleichung der Besetzungen:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} &= -\frac{2}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}} \int_0^t |W_{\mathbf{q}}|^2 (\cos(\frac{1}{\hbar}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t'))) \\ &\quad \cdot (n_{\mathbf{k}}(t')(1 - n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t'))(1 + N_{\mathbf{q}}) - (1 - n_{\mathbf{k}}(t'))n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t')N_{\mathbf{q}}) \\ &\quad - (\cos(\frac{1}{\hbar}(\epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t'))) \\ &\quad \cdot (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t')(1 - n_{\mathbf{k}'}(t'))(1 + N_{\mathbf{q}}) - (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t'))n_{\mathbf{k}}(t')N_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

### 3.1.1 Markov-Approximation

Unter der Annahme, dass die Besetzungsfunktionen sich nur langsam mit der Zeit verändern, lässt sich die Verteilungsfunktion zur Zeit  $t$  aus dem Integral in (3.9) herausziehen. Das untere Limit wird zudem in der Zeit  $\rightarrow \infty$  verschoben. Das verbleibende Integral hat die Form

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}E(t-t')} = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Theta(t) e^{\frac{i}{\hbar}E(\tau)}. \quad (3.11)$$

Mit der Definition der  $\Theta$ -Funktion  $\Theta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega\tau}}{\omega - \epsilon'}$  unter Verwendung von  $\epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0$  wird aus dem Ausdruck (3.11)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Theta(t) e^{\frac{i}{\hbar}E(\tau)} = \frac{i\hbar}{E + i\epsilon}. \quad (3.12)$$

Aus Gleichung (3.9) wird damit

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) b_{\mathbf{q}}(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} W_{\mathbf{q}} \frac{i\hbar}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i\epsilon}. \quad (3.13)$$

Mit diesem Ausdruck und den entsprechenden für die anderen Erwartungswerte wird aus Gleichung (3.5) unter Verwendung der Dirac-Identität  $\frac{1}{E+i\epsilon} = P(\frac{1}{E}) - i\pi\delta(E)$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $\epsilon > 0$  ( $P()$  bezeichnet den Hauptwert des Integrals [17], siehe Anhang A6)

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = & \frac{2}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}} W_{\mathbf{q}} \left[ -n_{\mathbf{k}}(1 - n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})(1 + N_q)\delta(\epsilon_k - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \right. \\ & - n_{\mathbf{k}}(1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_q\delta(\epsilon_k - \epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \\ & + (1 - n_{\mathbf{k}})n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1 + N_q)\delta(\epsilon_k - \epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \\ & \left. + (1 - n_{\mathbf{k}})n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}N_q\delta(\epsilon_k - \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \right]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Die ersten beiden Summanden beschreiben die Ausstreuungprozesse, die die Besetzung des Zustandes  $n_{\mathbf{k}}$  reduzieren, die letzten beiden Summanden die Einstreuung, die die Besetzung des Zustandes erhöhen.

Diese semiklassische Boltzmann-Statistik kann für sehr kurze Zeitintervalle nicht gültig sein. Bei der Ableitung wurde nämlich angenommen, dass die Zeit hinreichend groß sei, damit die beteiligten Energien scharf erhalten bleiben. Berücksichtigt man die Heisenbergsche Unschärferelation  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ , so wird klar, dass die Energien in diesem Fall nur sehr ungenau bestimmt werden können. Für den Fall sehr kurzer Zeiten muss daher die quantenkinetische Gleichung, die Zeitintegrale über die Vergangenheit des Systems und keine scharfe Energieerhaltung enthält, Verwendung finden.

### 3.1.2 Zustandsdichte

Der Zustand in einem n-dimensionalen System wird durch einen n-dimensionalen Vektor beschrieben. Überführt man die Summe über diesen Wellenvektor in ein Integral, so erhält man

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^n \int d\mathbf{k}^n. \quad (3.15)$$

Eine Auswertung in Polarkoordinaten ergibt

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^n \int d\Omega_n \int_0^\infty dk k^{n-1}, \quad (3.16)$$

mit dem Raumwinkel in n Dimensionen  $\Omega_n$ .

Sofern der Integrand keine Winkelabhängigkeit besitzt, lässt sich das Integral des Raumwinkels einfach lösen und führt in 3 Dimensionen zu einem Faktor  $4\pi$  bzw. in 2 Dimensionen zu  $2\pi$ .

Das k-Integral lässt sich mit der Substitution  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leftrightarrow dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk$  in ein Energie-

Integral überführen:

$$\sum_{\mathbf{k}} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^n \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{n}{2}} \int d\Omega_n \int_0^\infty E^{\frac{n}{2}-1} dE. \quad (3.17)$$

Der Integrand ist die Zustandsdichte:

$$D(E) = \left(\frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\right)^{\frac{n}{2}} E^{\frac{n}{2}-1}. \quad (3.18)$$

## 3.2 Optische Phononen

Optische Phononen wechselwirken mit den im Festkörper befindlichen Elektronen über die Fröhlich-Kopplung. Der Hamilton-Operator dieser Wechselwirkung ist

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} W_q a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+). \quad (3.19)$$

Das Matrixelement der Wechselwirkung  $W_q$  ist hierbei durch

$$|W_q|^2 = \frac{e^2}{2V\epsilon_0} \hbar\omega_{LO} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \frac{1}{q^2}. \quad (3.20)$$

gegeben, wobei  $V$  das Volumen,  $\epsilon_0$  die Vakuum-Dielektrizitätskonstante,  $\epsilon_\infty$  die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante,  $\epsilon$  die statische Dielektrizitätskonstante und  $\omega_{LO}$  die Frequenz der optischen Phononen ist. Zusätzlich führt man die dimensionslose Polaron-Konstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left( \frac{m}{2\hbar\omega_{LO}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (3.21)$$

ein, mit der sich das Matrixelement dann als

$$|W_q|^2 = 4\pi\alpha E_b^2 \left( \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{a_0^2 q^2} \frac{a_0^3}{V}$$

schreiben lässt.  $E_b$  ist hierbei die exzitonische Grundzustandsenergie. Die Berücksichtigung der Energieerhaltung führt zu der Bedingung

$$x'_\pm = \sqrt{x^2 \pm \frac{\mu}{m} \frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{E_b}}, \quad (3.22)$$

wobei  $x$  der dimensionslose Wellenzahlvektor  $ka_0$  ist. Folglich kann aus jedem Zustand  $x$  in genau 2 andere Zustände  $x_\pm$  elastisch gestreut werden. Wie im Abschnitt 2.4 erläutert, wird die Dispersion in Effektiver-Masse-Näherung als quadratisch angenommen:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Für eine kugelsymmetrische Anfangsverteilung  $g(x')$  ergibt sich für die Gleichung (3.10) mit der Substitution  $z = \cos(\vartheta)$  in einem Volumenmaterial

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} |W_q|^2 g(k') &= \frac{V}{8\pi^3} \int_{1. \text{ Bz}} d^3\mathbf{k}' |W_q|^2 g(k') \\ &= \left( \frac{E_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\alpha}{\pi} E_b^2 \int_0^\infty dx' x'^2 g(x') \int_{-1}^1 dz \frac{1}{x^2 + x'^2 - 2xx'z} \\ &= \left( \frac{E_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\alpha}{\pi} E_b^2 \int_0^\infty dx' g(x') \frac{x'}{x} \ln \left( \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right| \right). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Für  $x = 0$  ist der Grenzwert durch

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x} \ln \left( \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right| \right) = 2 \quad (3.24)$$

gegeben. Nun lässt sich mit

$$\begin{aligned} E_b \delta(\epsilon_k - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \pm \hbar\omega_{LO}) &= \delta\left(\frac{\epsilon_k}{E_b} - \frac{\epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}}{E_b} \pm \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_b}\right) \\ &= \delta\left(\frac{m}{\mu}x^2 - \frac{m}{\mu}x'^2 \pm \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_b}\right) \\ &= \frac{1}{2\frac{m}{\mu}x'_\pm} \delta(x' - x'_\pm), \end{aligned}$$

unter Berücksichtigung der integralen Definition der  $\delta$ -Distribution  $\int_{-\infty}^\infty \delta(x-x_0)f(x)dx = f(x_0)$  die Bewegungsgleichung der Besetzungen explizit angeben:

$$\begin{aligned} \frac{dn_x}{dt} &= - \left( \frac{E_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu}{m} \frac{E_b \alpha}{\hbar} \\ &\quad \cdot \left[ [(1-n_x(t))n_{x'_+}(t)(1+N_q) - n_x(1-n_{x'_+})N_q] \frac{1}{x} \ln \left( \left| \frac{x+x'_+}{x-x'_+} \right| \right) \right. \\ &\quad \left. + [(1-n_x(t))n_{x'_-}(t)N_q - n_x(1-n_{x'_-})(1+N_q)] \right. \\ &\quad \left. \cdot \frac{1}{x} \ln \left( \left| \frac{x+x'_-}{x-x'_-} \right| \right) \Theta(x'_-) \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Der Wechselwirkungsfaktor  $\frac{1}{x} \ln \left( \left| \frac{x+x'_\pm}{x-x'_\pm} \right| \right)$  wird im weiteren Rahmen dieser Arbeit als  $W_{\pm}^{3d}(x)$  abgekürzt und im Kapitel 4 verwendet.

Es wechselwirken also jeweils die Besetzungen, die um eine Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  auseinanderliegen, wobei in obiger Notation  $x'_+$  eine Phononenenergie über und  $x'_-$  eine Phononen-

energie unter  $x$  liegt. Die Phononen sind durch die thermische Gleichgewichtsverteilung gegeben:

$$N_{\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{LO}} - 1}. \quad (3.26)$$

Dabei wird angenommen, dass ihre Besetzung durch die Wechselwirkung nicht verändert wird. (Reservoir-Annahme)



### 3.3 Akustische Phononen

Für die akustischen Phononen ist die Wechselwirkung durch das Deformationspotenzial gegeben:

$$H_{int} = D \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega(\mathbf{q})}} |q| a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+). \quad (3.27)$$

$D$  ist die Deformationskonstante.

Nimmt man eine lineare Dispersion der akustischen Phononen  $\omega(\mathbf{q}) \approx c_s |\mathbf{q}|$  an, wobei  $c_s$  die Schallgeschwindigkeit ist, so folgt bei einer abermals radialsymmetrisch angenommenen Anfangsverteilung  $g(k')$ :

$$\begin{aligned} \sum_{k'} |W_q|^2 g(k') &= \frac{V}{8\pi^3} \int_{1.BZ} d^3\mathbf{k}' |W_q|^2 g(k') \\ &= \frac{D^2 \hbar}{8\pi^2 \rho c_s} \frac{\mu}{a_0^4 m E_b} \int_0^\infty dx' g(x') x'^2 \int_{-1}^1 dz \sqrt{x^2 + x'^2 - 2xx'z} \\ &= \frac{D^2 \hbar}{8\pi^2 \rho c_s} \frac{\mu}{a_0^4 m E_b} \int_0^\infty dx' g(x') x'^2 \left[ -\frac{(-2xx'z + x^2 + x'^2)^{\frac{3}{2}}}{3xx'} \right]_{-1}^1 \\ &= \frac{D^2 \hbar}{8\pi^2 \rho c_s} \frac{\mu}{a_0^4 m E_b} \int_0^\infty dx' g(x') \frac{x'}{3x} [(x+x')^3 - |x-x'|^3]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Wie für die Streuung mit optischen Phononen müssen die Energieerhaltung

$$|x'_\pm| = \sqrt{x^2 \pm \frac{\mu}{m} \frac{\hbar \omega(\mathbf{q})}{E_b}}$$

und die Impulserhaltung

$$|x'_\pm| = a_0 |k \pm q| = \sqrt{x^2 + a_0^2 q^2 \pm 2a_0 |x||q| \cos \vartheta}$$

gewährleistet sein. Daraus folgt

$$\pm \frac{\mu}{m} \frac{\hbar}{E_b} c_s q = a_0^2 q^2 \pm 2a_0 |x||q| \cos \vartheta$$

mit der nichttrivialen Lösung

$$q = \pm \left( \frac{1}{a_0^2} \frac{\mu}{m} \frac{\hbar}{E_b} c_s - \frac{2}{a_0} |x| \cos \vartheta \right).$$

Die Bedingung für die möglichen  $q$ -Werte ist daher

$$\frac{1}{a_0^2} \frac{\mu}{m} \frac{\hbar}{E_b} c_s - \frac{2}{a_0} |x| \leq |q| \leq \frac{1}{a_0^2} \frac{\mu}{m} \frac{\hbar}{E_b} c_s + \frac{2}{a_0} |x|. \quad (3.29)$$

Diese Bedingungen gibt vor, in welche Zustände über akustische Phononen unter Einhaltung der Energie- und Impulserhaltung elastisch gestreut werden kann.

Hier zeigt sich der große Unterschied zur Streuung mit optischen Phononen: Aufgrund der Tatsache, dass es Dispersion gibt, ergeben sich mehr als 2 mögliche Lösungen der Streuung aus jedem Zustand hinaus, d.h. die Besetzung jedes einzelnen Zustandes ist an die Besetzung aller Zustände innerhalb eines eindeutigen  $k$ -Intervalls gekoppelt.

Mit diesen gefundenen Nullstellen lassen sich die Integrale mit den  $\delta$ -Distributionen lösen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_x(t) &= \frac{D^2 \mu}{4\pi \rho c_s a_0^4 m E_b} \sum_{x'} x', \text{ wobei } |x - x'| \text{ Bedingung (3.29) genügt.} \\ &[(1 - n_x) n_{x'_+} (1 + N_q) - n_x (1 - n_{x'_+}) N_q] \left[ \frac{1}{x} [(x + x'_+)^3 - (x - x'_+)^3] \right] \\ &+ [(1 - n_x) n_{x'_-} N_q - n_x (1 - n_{x'_-}) (1 + N_q)] \left[ \frac{1}{x} [(x + x'_-)^3 - (x - x'_-)^3] \Theta(x'_-) \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Die Besetzung der Phononenmoden hängt nun im Gegensatz zu den LO-Phononen von  $q$  ab und ist durch

$$N_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar c_s q} - 1} \quad (3.31)$$

gegeben. Auch hier gilt wiederum die Reservoir-Annahme.

### 3.4 Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Quantenfilm

Im Quantenfilm, der in dieser Arbeit betrachtet wird, soll der Elektronentransfer zwischen den verschiedenen Schichten nicht stattfinden. Es liegt eine 2D-Schicht vor, innerhalb der sich die Elektronen frei bewegen können, während sie in der dritten Raumrichtung ortsgebunden sind. In diesem Fall ergibt sich für die Summe über einen 2-dimensionalen in der Ebene liegenden Vektor  $k$

$$\begin{aligned}\sum_k &= \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk^2 \\ &= \frac{L^2}{2\pi} \int_0^\infty k dk.\end{aligned}$$

Der dreidimensionale Impulsvektor der Phononen kann in einen Anteil parallel und einen Anteil orthogonal zur Ebene separiert werden:  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_{xy}, \mathbf{q}_z)$ . Das zweidimensionale Coulomb-Potenzial ist gegeben durch

$$V_q = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_0 L^2} \frac{1}{q}. \quad (3.32)$$

Im Gegensatz zur reziproken quadratischen Abhängigkeit von  $\mathbf{q}$  des dreidimensionalen Falls ist die Abhängigkeit im 2D-Fall einfach reziprok. Für die Bewegungsgleichungen folgt damit nach Auswertung der Delta-Distributionen (analog zur Herleitung der Bewegungsgleichung für das Volumenmaterial)

$$\begin{aligned}\frac{dn_x}{dt} &= - \left( \frac{E_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu}{m} \frac{E_b \alpha}{\hbar} \\ &\cdot \left[ [(1 - n_x(t))n_{x'_+}(t)(1 + N_q) - n_x(1 - n_{x'_+})N_q] \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sqrt{(x^2 + x'^2_+ - 2xx'_+ \cos(\phi))}} \right. \\ &+ [(1 - n_x(t))n_{x'_-}(t)N_q - n_x(1 - n_{x'_-})(1 + N_q)] \\ &\cdot \left. \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sqrt{(x^2 + x'^2_- - 2xx'_- \cos(\phi))}} \Theta(x'_-) \right].\end{aligned} \quad (3.33)$$

Dieses Integral entspricht den elliptischen Integralen erster Art der Form  $\int \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2(\phi)}}$ , wobei das Moduluskriterium  $0 < k < 1$  nicht erfüllt ist [17], und wurde im Folgenden numerisch gelöst. Auch dieser Wechselwirkungsfaktor wird im Weiteren verwendet und soll daher als  $\int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sqrt{(x^2 + x'^2_- - 2xx'_- \cos(\phi))}} = \text{Wf}_\pm^{2d}(x)$  abgekürzt werden. Die Phononen sind auch im 2D-Fall durch die thermische Gleichgewichtsverteilung (3.26) gegeben.

## 4 Numerische Resultate

Im Folgenden soll die numerisch bestimmte zeitliche Entwicklung der Besetzungen für verschiedene Fälle dargestellt werden. Zu Beginn wurde eine normalverteilte Anfangsbesetzung um  $a_0 k = 10$  mit einer Halbwertsbreite von  $0,2/a_0$  angenommen. Nichtgleichgewichtsverteilungen ähnlicher Form werden bei einer optischen Anregung des Systems mit einem optischen Puls erzeugt. Die Elektronendichten  $n_{3D} = 10^{17}/\text{cm}^3$  und  $n_{2D} = 5,95 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$  sind konstant und durch

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

mit der in (3.17) definierten Zustandsdichte  $D(E)$  und der zu bestimmenden Verteilung  $n(E,t)$  gegeben. Sofern nichts anderes angegeben ist, ist dies in allen nachfolgenden Fällen die angeregte Anfangsverteilung. Sämtliche sonstige verwendete Parameter finden sich im Anhang A1.

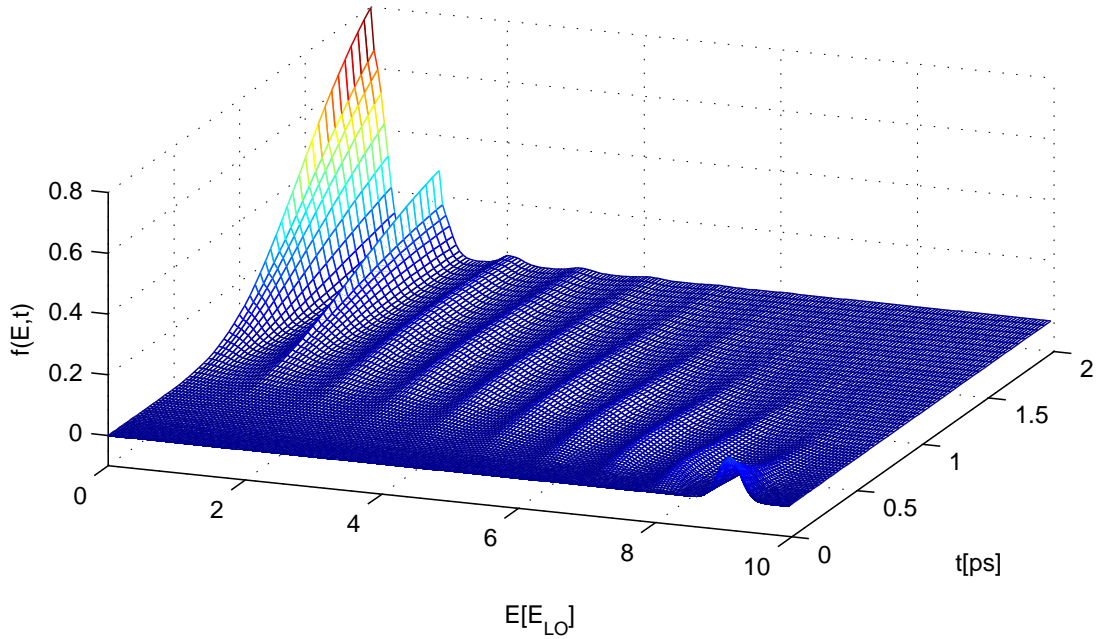
Die betrachteten Fälle beinhalten reine Streuung durch optische Phononen in einem GaAs-Volumenmaterial und einem GaAs-Quantenfilm und die kombinierte Streuung mit optischen und akustischen Phononen im GaAs-Volumenmaterial jeweils in Markov-Approximation. Die Temperatur des Gitters wird als 77 Kelvin angenommen, was für optische Phononen ( $\hbar\omega_{LO} = 36 \text{ MeV}$ ) zu einer Besetzung  $N_q = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{LO}} - 1} = 0,0044$  führt.

### 4.1 Wechselwirkung mit optischen Phononen

Sofern man ausschließlich die Wechselwirkung optischer Phononen berücksichtigt, bietet sich die Wahl eines Gitters äquidistanter Energien an, da die Energie optischer Phononen konstant ist und Besetzungen somit immer um einen konstanten Wert auf der Energieskala verschoben werden. Gedächtnis-Effekte werden in der Markov-Approximation nicht berücksichtigt.

#### 4.1.1 Relaxation im GaAs-Volumenmaterial

Elektronen eines bestimmten Zustandes können durch Absorption oder Emission eines optischen Phonons in genau zwei andere Zustände, die sich jeweils eine Phononenenergie vom Ursprungszustand unterscheiden, übergehen (Siehe Kapitel 3.1). Dadurch entstehen die in

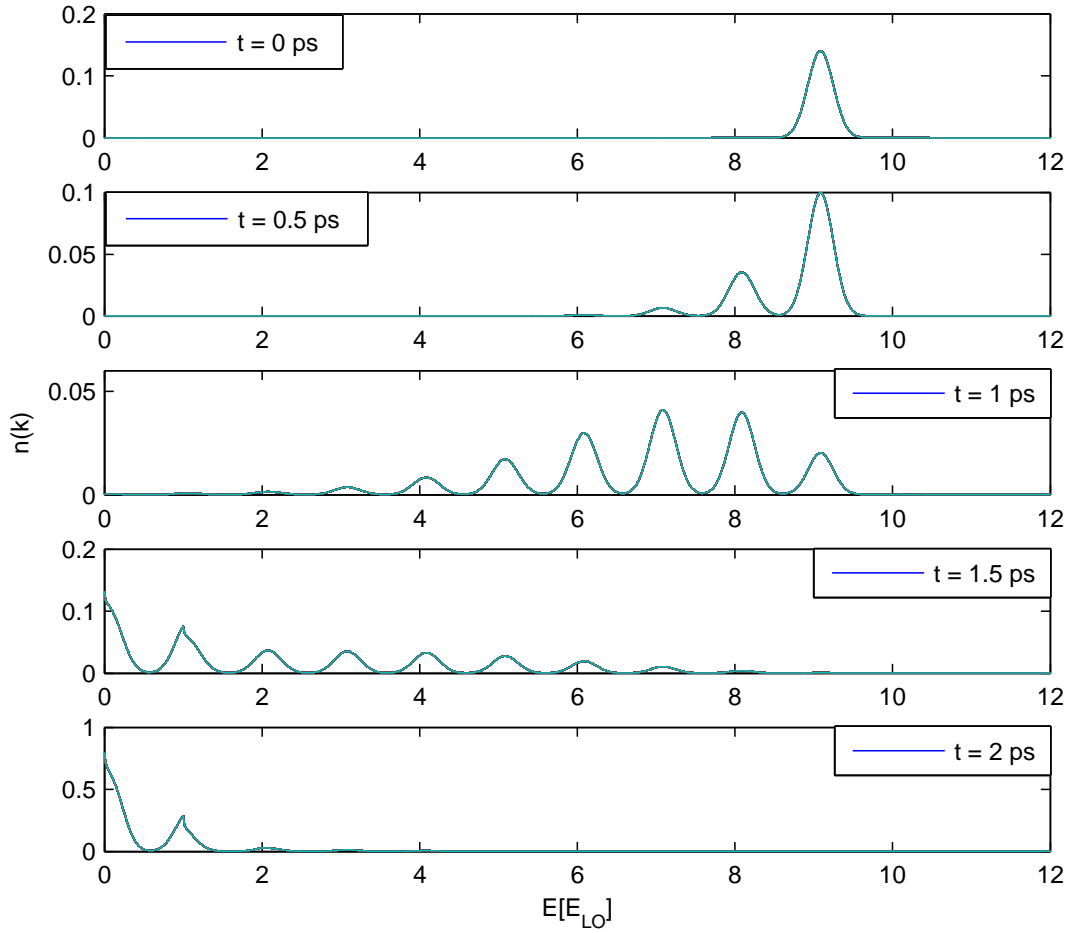


**Abb. 4.1:** Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Besetzung  $n(E, t)$  unter Berücksichtigung der Fröhlich-Kopplung im GaAs-Volumenmaterial. Die Energie ist in Einheiten der LO-Phononenenergie angegeben. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  wurde eine gaussförmige Verteilung um  $ka_0 = 10$  mit einer Halbwertsbreite von  $0.2/a_0$  bei einer Elektronendichte von  $10^{17}/\text{cm}^3$  angenommen.

den Abbildungen 4.1 und 4.2 dargestellten Replika der Ursprungsverteilung, die jeweils um eine Phononenenergie verschoben sind. Die Streuung um einen von der konstanten LO-Phononenenergie abweichenden Betrag ist in Markov-Approximation nicht möglich. Die Elektronen werden durch die Wechselwirkung mit Phononen in beide Richtungen auf der Energieskala gestreut, d.h. durch Absorption eines Phonons um eine Phononenenergie nach oben bzw. durch Emission eines Phonons um eine Phononenenergie nach unten. Die Häufigkeit dieser Prozesse hängt von der Phononenbesetzung und somit der Gittertemperatur ab. Dass die Streuung gegen die energetisch günstigste Verteilung relaxiert, also mehr Phononen emittiert als absorbiert werden, ist Folge der spontanen Emission, die im Wechselwirkungsfaktor  $1 + N_q$  dem ersten Term entspricht. Für die angenommene Gittertemperatur ist die Phononenbesetzung 0,0044, also ein Vielfaches kleiner als 1. Die stimulierte Emission bzw. Absorption eines Phonons findet also bei diesen niedrigen Temperaturen sehr viel seltener als die spontane Emission statt.

Aus dem Anfangszustand wird so lange hauptsächlich durch spontane Emission in energetisch niedrigere Zustände gestreut, bis ein Gleichgewichtszustand des gesamten Systems, in dem für jeden Zustand Ein- und Ausstreuraten gleich sind, erreicht wird. Diesen Systemzustand nennt man detailliertes Gleichgewicht.

Sofern man nur die Wechselwirkung mit optischen Phononen betrachtet, entspricht diese Gleichgewichtsverteilung im Allgemeinen nicht der Fermiverteilung. Die Relikte, die in



**Abb. 4.2:** Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Besetzungsfunktion  $n(E,t)$  (Vergleiche Abbildung 4.1.) im Galliumarsenid-Volumenmaterial zu fünf verschiedenen Zeitpunkten bei einer gaussförmigen Startverteilung um  $ka_0 = 10$  mit einer Halbwertsbreite von  $0.2/a_0$  und einer Ladungsträgerdichte von  $10^{17}/\text{cm}^3$ . Die Energie ist in Vielfachen der LO-Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  angegeben.

Abbildung 4.2 beispielsweise zum Zeitpunkt  $t = 2\text{ps}$  unterhalb einer LO-Phonon-Energie zu sehen sind, bleiben unabhängig vom betrachteten Zeitraum aufgrund der konstanten LO-Phononen-Energie erhalten.

### 4.1.2 Analytisch lösbare Näherung der zeitlichen Entwicklung

Die zeitliche Entwicklung des Maximums der Anfangsbesetzung lässt sich genähert analytisch lösen. Nimmt man an, dass die spontane Emission der Phononen der dominierende Prozess der Besetzungsänderung im System ist, so lassen sich die Streuprozesse 4.4b - 4.4d vernachlässigen und für die gegebene Startverteilung lässt sich genähert annehmen, dass  $n_{x'_-} \approx n_{x'_+} \approx 0$ , also die Besetzungen der Zustände, mit denen der Anfangszustand wechselwirkt, sehr viel kleiner als 1 sind. Damit folgt für die zeitliche Entwicklung

$$\frac{d}{dt}n_x = - \left( \frac{E_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu}{m} \frac{E_b \alpha}{\hbar} \frac{1}{x} \ln \left( \left| \frac{x + x'_+}{x - x'_+} \right| \right) (1 + N_q) n_x. \quad (4.2)$$

Diese Differenzialgleichung hat die Lösung

$$n_x(t) = n_x(0) \exp \left( - \left( \left( \frac{E_{LO}}{E_b} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu}{m} \frac{E_b \alpha}{\hbar} \frac{1}{x} \ln \left( \left| \frac{x + x'_+}{x - x'_+} \right| \right) (1 + N_q) \right) t \right) \quad (4.3)$$

mit dem Vorfaktor im Exponenten als der Reziproken einer Relaxationszeit. Dass die gemachten Näherungen sinnvoll sind, soll argumentativ gezeigt werden.

Grundsätzlich spielen 4 Streuprozesse für die Besetzungsänderung  $n_x(k, t)$  des Zustandes  $x$  eine Rolle:

$$x \rightarrow x'_-, \quad (4.4a)$$

$$x \rightarrow x'_+, \quad (4.4b)$$

$$x \leftarrow x'_-, \quad (4.4c)$$

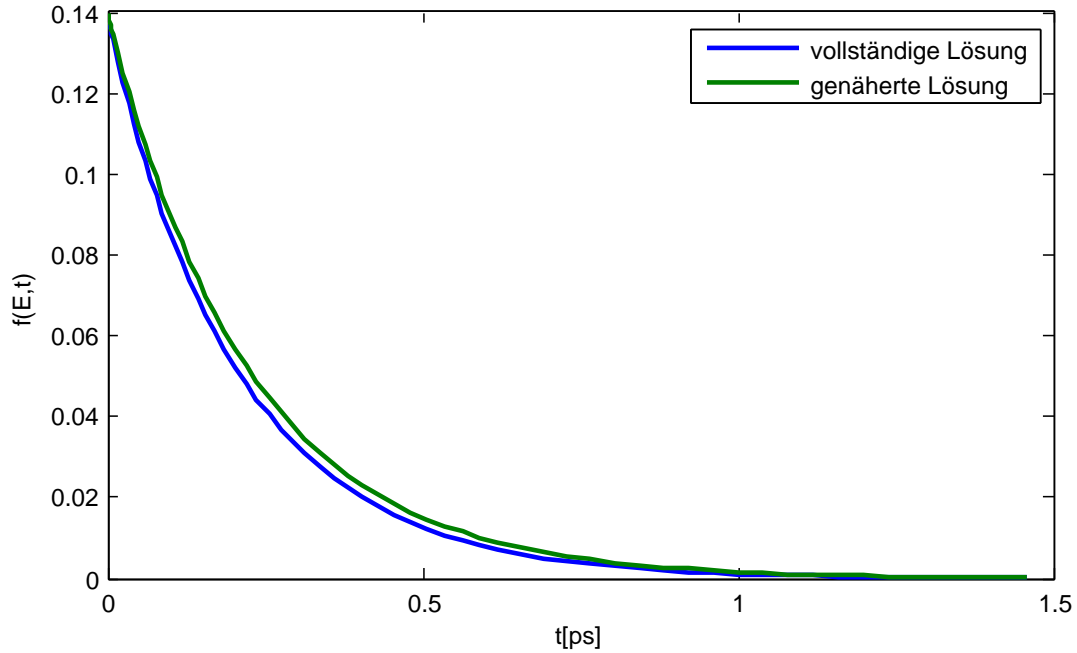
$$x \leftarrow x'_+. \quad (4.4d)$$

Der Vorfaktor der jeweiligen Wechselwirkung sei  $V$  und  $x_0$  der dimensionslose Wellenzahlvektor des Zustandes mit maximaler Anfangsbesetzung.

Die Streuung (4.4a)  $x \rightarrow x'_-$  ist die einzige, im Folgenden Hauptstreuung genannte, in der analytischen Lösung berücksichtigt.

Die Streuung (4.4b)  $x \rightarrow x'_+$ , die die Besetzung des Zustandes  $x$  verringert, indem LO-Phononen von Elektronen absorbiert werden und somit die Elektronenenergie um  $\hbar\omega_{LO}$  erhöht wird, hängt ebenso wie die Hauptstreuung linear von der Besetzung des Zustandes  $x$  ab, allerdings ist der Faktor der Wechselwirkung bei einer Gittertemperatur von 77 Kelvin um ein Vielfaches, konkret  $\frac{Nq+1}{Nq} \approx 228$  kleiner als jener der Hauptstreuung.

Die Streuung (4.4c)  $x'_- \rightarrow x$  ist die Rückstreuung aus dem Zustand  $x'_-$  und erhöht den Zustand  $x$ . Zu Beginn ist der Zustand nicht besetzt, daher findet diese Streuung nicht statt. Die Rückstreuung findet auch mit dem Faktor  $\frac{Nq+1}{Nq} \approx 228$  der  $x$ - im Vergleich zur  $x'_+$ -Besetzung statt, also sehr viel schwächer als in die andere Richtung. Daher lässt sich auch diese Streuung vernachlässigen.



**Abb. 4.3:** Vergleich der vollständigen, unter Berücksichtigung aller Streuprozesse ermittelten und der gemäß 4.2 genäherten Lösung der zeitlichen Entwicklung der Besetzung des Zustandes, für dessen dimensionslose Wellenzahl  $a_0 k = 10$  gilt, für ein GaAs-Volumenmaterial.

Die Streuung (4.4d)  $x'_+ \rightarrow x$  hängt von der Besetzung des Zustandes  $x'_+$  ab. Die Besetzung dieses Zustandes erfolgt durch die ohnehin aufgrund ihrer geringen Auswirkungen nicht berücksichtigte Streuung (4.4b), daher ist die Annahme plausibel, dass die Besetzung sehr gering bleibt und es somit kaum Rückstreuung gibt. Sofern alle Zustände  $x \geq x_0 + \hbar\omega_{LO}$  zu Beginn der Dynamik unbesetzt sind, gilt dann für jede Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned} \int_0^t V(x_0 \rightarrow x'_+) n_{x_0}(t) D(x) dt' &= \int_0^t V(x'_+ \rightarrow x_0) n_{x'_+}(t') D(x'_+) dt' \\ &+ \sum_{m=1} n_{(x_0+m\hbar\omega_{LO})}(t) D(x_0+m\hbar\omega_{LO}) \end{aligned}$$

Daher lässt sich, sofern Streuung (4.4b) vernachlässigt wird, in jedem Fall auch diese Streuung vernachlässigen und die Annahmen, die bei der Näherung (4.2) gemacht wurden, sind angemessen. Erwartungsgemäß sollte der Abfall der Besetzung zu Beginn schneller als in der Näherung vonstatten gehen, da auch Phononen absorbiert werden können, was vernachlässigt wird. Zu einem späteren Zeitpunkt, wenn die Besetzung des Zustandes  $x'_+$  signifikant zugenommen hat, wird die Rückstreuung aus diesem Zustand überwiegen und zur langsameren Abnahme als in der gemachten Näherung führen. Abbildung 4.3 zeigt die Richtigkeit der Behauptungen und die Gültigkeit der gemachten Approximation, die im folgenden Kapitel zum Vergleich der Relaxationszeiten von 2D- und 3D-Einstreuung



genutzt wird.

### 4.1.3 Relaxation im GaAs-Quantenfilm

Abbildung 4.4 zeigt die Relaxationsdynamik in einem Quantenfilm. Auch hier sind die Replika zu sehen, auffällig ist des Weiteren der durch die konstante Zustandsdichte verursachte Unterschied im Vergleich zum Volumenmaterial: Da die Zustandsdichte konstant ist, nimmt die Besetzung der Zustände für  $k \rightarrow 0$  schwächer zu. Dies entspricht der aus der erhaltenen Teilchendichte (4.1) folgenden Erwartung. Zudem findet die Relaxation im Quantenfilm schneller statt, wie der Vergleich der Abbildungen und 4.2 und 4.5 zeigt. Diese Tatsache wird im folgenden Kapitel untersucht.

## 4.2 Vergleich der Relaxation im Volumenmaterial und dem Quantenfilm

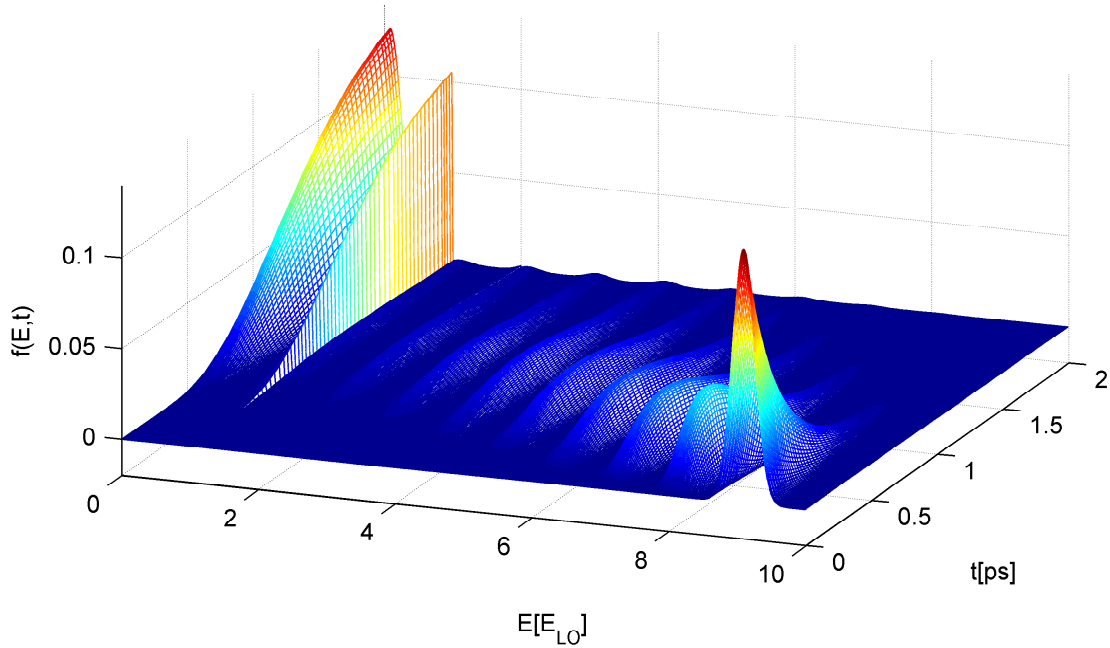
In diesem Kapitel wird die Effizienz der Streuprozesse im Volumenmaterial mit der Effizienz in einem Quantenfilm verglichen. Entscheidend für die Effizienz sind die Faktoren der Wechselwirkungen  $\frac{1}{x} \ln \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right|$  aus (3.23) für das 3D- und  $\int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{\sqrt{x^2+x'^2-2xx'\cos(\phi)}}$  aus (3.33) für das 2D-Material sowie die Zustandsdichte in den Materialien, da die Elektronendichte (4.1) eine Erhaltungsgröße darstellt. In dem Quantenfilm ist die Zustandsdichte konstant, während sie im 3D-Fall eine  $\sqrt{E}$ -Abhängigkeit besitzt.

Abbildung 4.6 zeigt die Stärke der Wechselwirkung der Streuung aus dem Zustand  $x$  in den Zustand  $x'$  – im Volumenmaterial bzw. dem Quantenfilm. Die Wechselwirkung der Phononen mit den Elektronen ist im Quantenfilm in jedem Fall stärker, und zwar für jedes Zustandspaar  $x$  und  $x'$ . Der relative Unterschied der Wechselwirkungsstärken ist umso größer, je kleiner  $k$  ist, es ist also zu erwarten, dass der relative zeitliche Unterschied der Relaxation umso größer ist, umso schwächer das System zu Beginn der Dynamik angeregt wird.

### 4.2.1 Effektive Temperatur

An dieser Stelle soll eine effektive Temperatur eingeführt werden. Sie dient als Maß für die mittlere kinetische Energie des betrachteten Systems und zur Verifizierung der Tatsache, dass das System gegen das thermodynamische Gleichgewicht bei der vorgegebenen Gittertemperatur strebt. Zu jedem Zeitpunkt  $t$  sei die effektive Temperatur durch die Temperatur einer Fermiverteilung mit derselben kinetischen Energie und Teilchendichte wie die tatsächliche Verteilungsfunktion  $n(E, t)$  gegeben.

An dieser Stelle ist zu betonen, dass die Temperatur statistisch nur für eine Gleichgewichtsverteilung definiert ist. Einer Nichtgleichgewichtsverteilung kann man keine physikalische



**Abb. 4.4:** Die Besetzungsdynamik unter Berücksichtigung der Fröhlich-Kopplung im GaAs-Quantenfilm, ausgehend von einer gaussförmigen Startverteilung um  $ka_0 = 10$  mit einer Halbwertsbreite von  $0.2/a_0$  bei einer Ladungsträgerdichte von  $5.95 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ . Die Energie ist in Einheiten der LO-Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  angegeben.

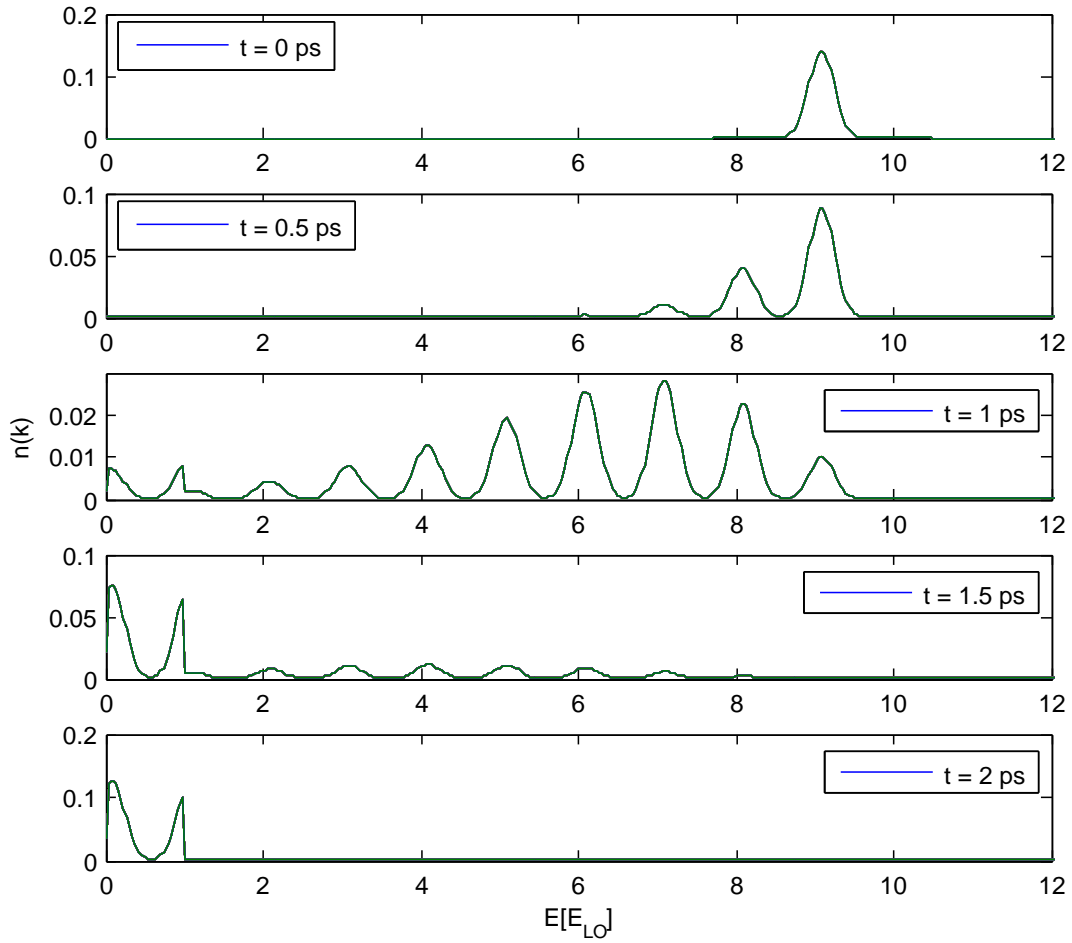
Temperatur zuordnen. Die hier verwendete effektive Temperatur wird als Hilfsgröße zur Systembeschreibung genutzt.

Geht man von einem genähert exponentiellen Abfall der effektiven Temperatur des nicht im thermodynamischen Gleichgewicht befindlichen Elektronensystems durch Streuung mit Phononen aus, so kann man eine Relaxationszeit einführen. Dann lässt sich die Differentialgleichung der Systemtemperatur als

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{T - T_{lat}}{\tau} \quad (4.5)$$

mit der Gittertemperatur  $T_{lat}$ , die in die Besetzung der Phononenmoden eingeht, angeben. Die Abbildungen 4.7 - 4.8, die die zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur zeigen, bestätigen die Annahme, dass der Abfall der effektiven Temperatur genähert exponentiell verläuft.

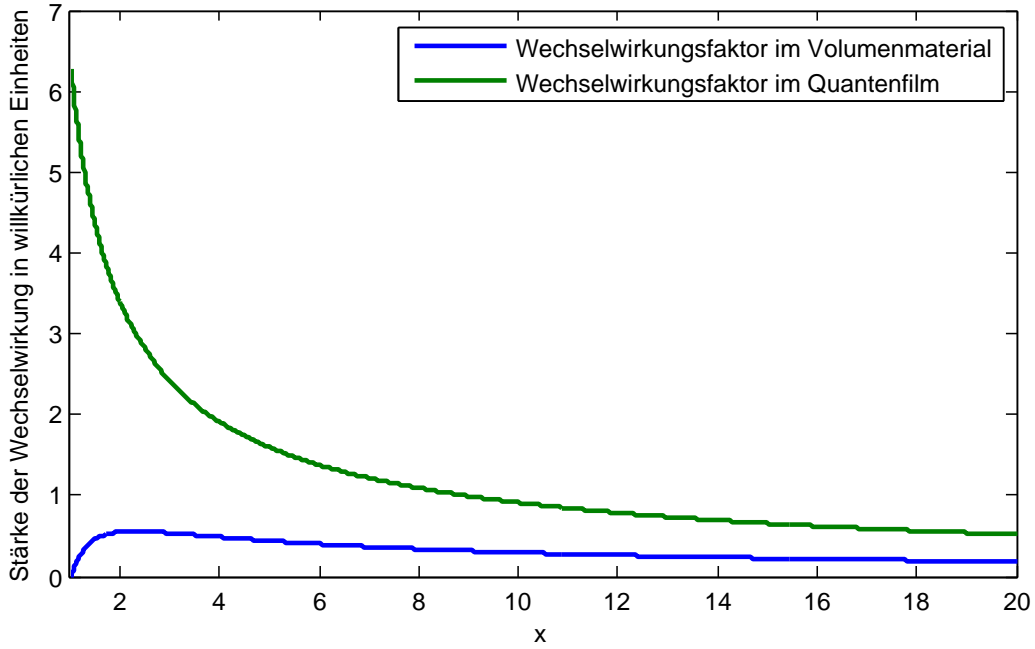
Für den Fall der Streuung optischer Phononen wird die Temperatur allerdings nicht komplett gegen die Gittertemperatur relaxieren, denn es kann aufgrund der näherungsweise konstanten LO-Phononen-Energie nicht in jeden beliebigen Zustand gestreut werden. Daher bleiben Zustände besetzt, obgleich energetisch günstigere Zustände, die nicht durch LO-Phonon-Streuung erreicht werden können, noch frei wären. Es ist daher zu erwarten, dass der Grenzwert der effektive Temperatur oberhalb der Gittertemperatur liegt.



**Abb. 4.5:** Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der Besetzungsfunktion  $n(E,t)$  (Vergleiche Abbildung 4.4.) im Galliumarsenid-Quantenfilm zu fünf verschiedenen Zeitpunkten bei einer gaussförmigen Startverteilung um  $ka_0 = 10$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und mit einer Ladungsträgerdichte von  $5.95 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ . Die Energie ist in Vielfachen der LO-Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  angegeben.

Da die Zustandsdichte in einem Volumenmaterial für  $k \rightarrow 0$  gegen 0 konvergiert, während die Zustandsdichte im Quantenfilm konstant ist, sollte der Temperaturüberschuss im 2D-Fall größer ausfallen. Die Numerik bestätigt diese Überlegung. Für das 3D-Volumenmaterial konvergiert die Temperatur gegen eine Temperatur von  $\approx 125$  Kelvin, wohingegen es im 2D-Quantenfilm (siehe für die Temperaturverläufe beider Materialsysteme für unterschiedliche Startverteilungen Abbildung 4.8)  $\approx 150$  Kelvin sind. Die Startverteilung ist einmal normalverteilt um  $k^2 a_0^2 = 50$  und um  $k^2 a_0^2 = 25$  mit einer Halbwertsbreite von  $0,2/a_0$  gewählt worden. Die Elektronendichten sind  $10^{17}/\text{cm}^3$  im Volumenmaterial und  $5,95 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$  im Quantenfilm.

Zudem bestätigt Abbildung (4.8) die These, dass die Effizienz der Wechselwirkungen auf-



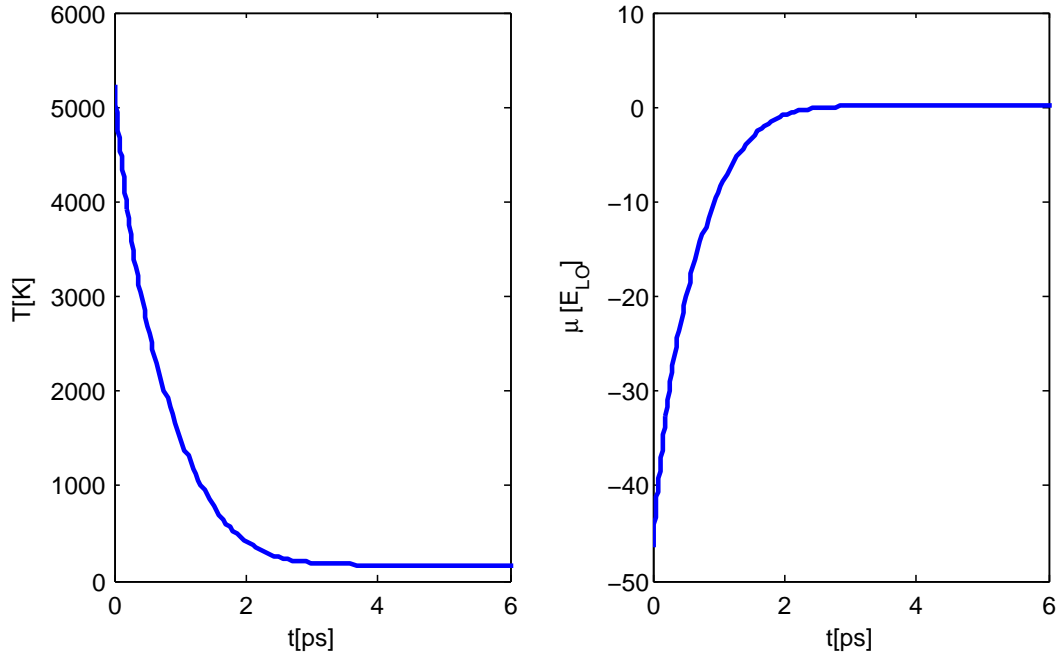
**Abb. 4.6:** Vergleich der Faktoren der Wechselwirkung  $Wf_-(x)$  in einem Quantenfilm und einem Volumenmaterial in Abhängigkeit von der dimensionslosen Wellenzahl  $a_0k = x$  bei Streuung durch Emission eines Phonons aus dem Zustand  $x$  in den Zustand  $x'$ .

grund stärkerer Wechselwirkungs faktoren (Abbildung 4.6) im Quantenfilm höher ist. Der Temperaturgrenzwert und damit der Gleichgewichtszustand wird im Quantenfilm bei identischen Startverteilungsfunktionen  $n(E,0)$  schneller erreicht. Der relative Unterschied ist wie erwartet größer, wenn die Anfangsanregung schwächer ist.

#### 4.2.2 Analytische Lösung der genäherten Relaxation

Um die Dauer der Wechselwirkung zu quantifizieren, sollen die Betrachtung aus dem vorhergehenden Unterkapitel 4.1.2 aufgegriffen werden. Alle folgenden Betrachtungen beziehen sich auf den 2D-Fall. Um den Fall eines Volumenmaterials zu erhalten, muss allerdings nur ergänzend die sich ändernde Zustandsdichte und damit die Gewichtung des blockenden Faktors  $1 - n_{x'_-}$  (siehe Gleichung (3.25)) berücksichtigt werden. Für die niedrigen Zustandsdichten im Volumenmaterial nahe des  $\Gamma$ -Punktes nimmt die Besetzung der Zustände stärker zu als im Quantenfilm, daher kann  $1 - n_{x'_-} \approx 1$  nicht länger angenommen werden.

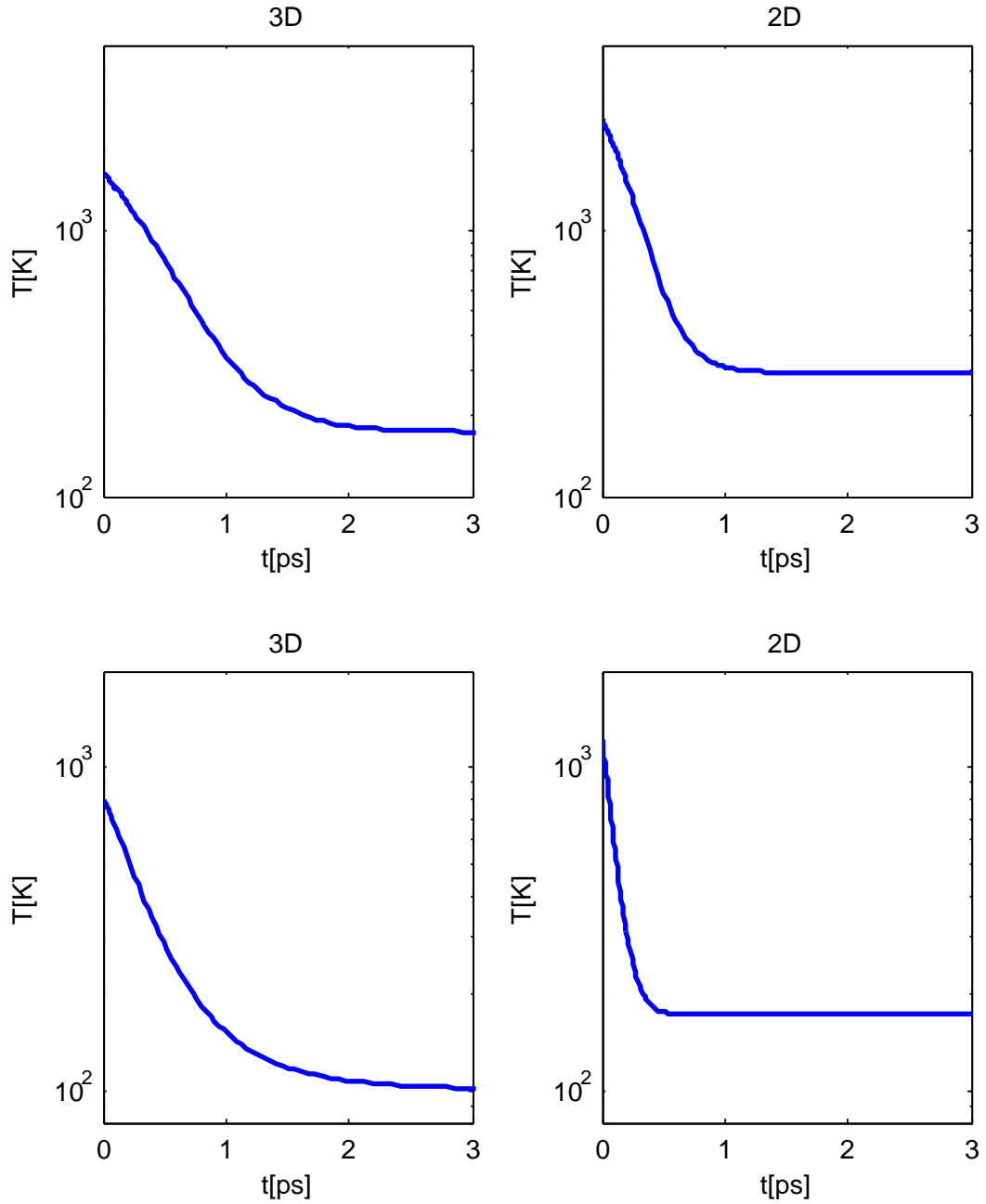
Die zeitliche Entwicklung der maximalen Anfangsbesetzung lässt sich durch einen exponentiellen Abfall nähern. Betrachtet man auch die zeitliche Entwicklung der Besetzung eines beliebigen anderen Zustandes, so fällt sofort ins Auge, dass sich für jeden Zustand



**Abb. 4.7:** Zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur und des chemischen Potentials einer Fermiverteilung mit der zu jedem Zeitpunkt selben kinetischen Energie und Teilchendichte wie die gegebene Verteilungsfunktion  $n(E,t)$  für ein GaAs-Volumenmaterial unter Wechselwirkung mit optischen Phononen, ausgehend von einer gaussförmigen Startverteilung um  $k^2 a_0^2 = 100$ .

die Streuprozesse (4.4b) und (4.4d) vernachlässigen lassen, da sie bei der gegebenen Gittertemperatur für von 77 Kelvin für jeden Zustand sehr viel langsamer als der Prozess (4.4a) ablaufen. Was aber ist mit dem Streuprozess (4.4c)? Dessen Größenordnung ist nur für den Fall, dass die Besetzung des Zustandes  $x'_-$  sehr viel größer als die Besetzung des Zustandes  $x$  ist, relevant, was prinzipiell möglich ist. Allerdings wird auch in einem solchen Fall viel stärker aus dem Zustand  $x'_-$  in den Zustand  $x'_{--}$  (der Zustand, der eine LO-Phononenenergie unter dem Zustand  $x'_-$  liegt) gestreut als in die andere Richtung, daher dürfte der Fall, dass der Streuprozess (4.4c) entsprechend groß ist, nur sehr kurze Zeitintervalle andauern.

Vernachlässigt man folglich die Streuprozesse (4.4b-4.4d) für alle Zustände, so sollte sich eine gut genäherte untere Grenze der Relaxationsdauer ergeben.



**Abb. 4.8:** Die zeitliche Entwicklung der effektiven Temperatur (Temperatur einer Fermi-Verteilung mit derselben kinetischen Energie und Teilchendichte wie die gegebene Verteilungsfunktion  $n(E)$ ) im Volumenmaterial (links) und Quantenfilm (rechts) in halblogarithmischer Auftragung, mit einer gaussförmigen Startverteilung um  $k^2 a_0^2 = 50$  (oben) bzw.  $k^2 a_0^2 = 25$  (unten).

Das entstehende Gleichungssystem hat dann die Gestalt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}n_{x_1} &= -\lambda_1 n_{x_1} \\
\frac{d}{dt}n_{x_2} &= \lambda_1 n_{x_1} - \lambda_2 n_{x_2} \\
\frac{d}{dt}n_{x_3} &= \lambda_2 n_{x_2} - \lambda_3 n_{x_3} \\
&\vdots \\
&\vdots \\
&\vdots \\
\frac{d}{dt}n_{x_i} &= \lambda_{i-1} n_{x_{i-1}}
\end{aligned}$$

und ist analytisch geschlossen lösbar. Die Anfangsbedingungen sollen durch  $n_{x_1}(0) \ll 1$  und  $n_{x_j}(0) = 0$ ,  $j = 2, 3, \dots, i$  gegeben sein. Dann ergeben sich die Lösungen zu

$$n_{x_j}(t) = n_{x_1}(0) \cdot \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_{j-1} \left( C_1 e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t} + \dots + C_j e^{-\lambda_j t} \right) \quad (4.6)$$

mit den konstanten Koeffizienten

$$\begin{aligned}
C_1 &= \frac{1}{(\lambda_2 - \lambda_1) \cdot \dots \cdot (\lambda_j - \lambda_1)} \\
C_2 &= \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_2) \cdot \dots \cdot (\lambda_j - \lambda_2)} \\
&\vdots \\
&\vdots \\
&\vdots \\
C_j &= \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_i) \cdot \dots \cdot (\lambda_{j-1} - \lambda_j)}.
\end{aligned}$$

Für den Fall einer gaussförmigen Anfangsverteilung um  $k^2 a_0^2 = 50$  zeigt Abbildung 4.9 den Vergleich der zeitlichen Entwicklung der Endbesetzung ( $E = E_0 - 4E_{LO}$ ) in einem Quantenfilm der auf obige Weise genähert ermittelten analytischen Lösung (4.6) mit der numerisch unter Berücksichtigung aller Wechselwirkungen ermittelten Lösung.

Es bestätigt sich die Annahme, dass die Näherung eine untere Grenze der Relaxationsdauer ergeben sollte.

Die Konstanten  $C_j$  haben die Eigenschaft, dass sie für eine monotone Abbildung  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}, i \mapsto \lambda_i$  alternierende Vorzeichen besitzen. Zudem gilt<sup>1</sup>

$$\sum_j C_j = 0. \quad (4.7)$$

---

1 Der Beweis dieser Aussage findet sich im Anhang A6.

Der letzte Koeffizient ist durch

$$C_i = \frac{1}{\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_{i-1}} \quad (4.8)$$

gegeben. Einfaches Bilden der Grenzwerte

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-\lambda_j t} = 0, \lambda_j > 0$$

in (4.6) zeigt, dass die Besetzung des Endzustandes  $n_{x_i}(t)$  vollständig gegen die Anfangsbesetzung  $n_{x_1}(0)$  strebt.

Wie im Kapitel (4.1) dargestellt, ist dies einfach der Gleichgewichtszustand, in dem für jeden Zustand Ein- und Ausstreuung gleich sind und sich die Waage halten. Streuung in höhere Zustände wurde im Rahmen dieser Näherung schließlich vernachlässigt, daher entspricht dieses Ergebnis den Erwartungen.

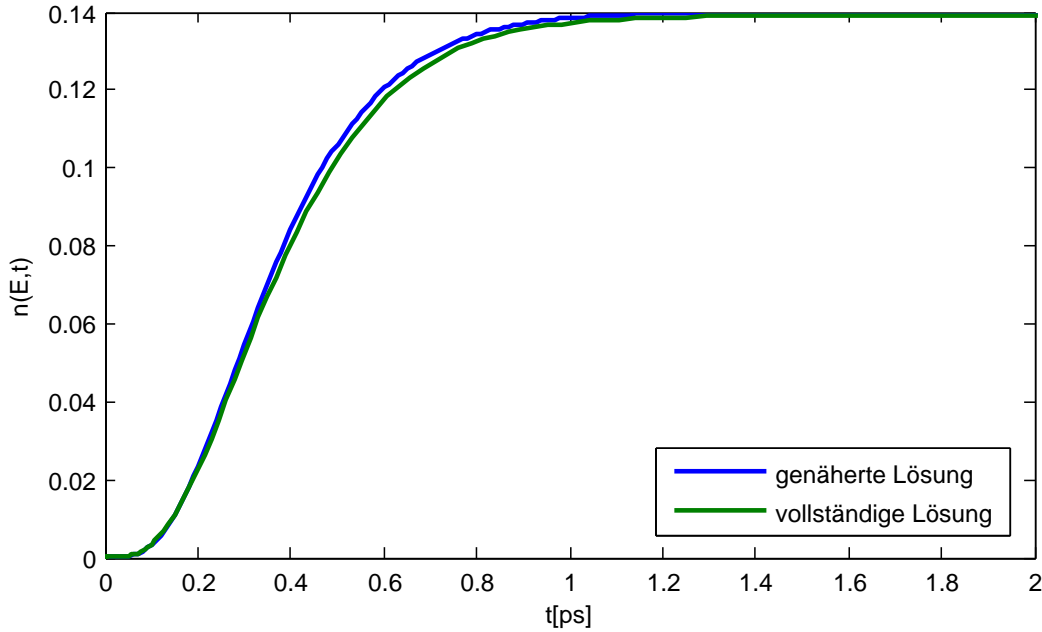
Entwickeln der Lösung (4.6) für kleine  $t$  liefert in erster Ordnung

$$n_{x_j}(t) = n_{x_1}(0) \cdot \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_{j-1} (-\lambda_1 C_1 t - \lambda_2 C_2 t - \dots - \lambda_{j-1} C_{j-1} t).$$

Für  $\lambda_i$ , die in derselben Größenordnung liegen, hängt die Entwicklung der Endbesetzung und damit die Effizienz des Streuprozesses also linear von dem Produkt aller Wechselwirkungsfaktoren  $\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_{i-1}$  ab.

Die vernachlässigten Streuprozesse haben eine (bei 77 Kelvin geringe) retardierende Wirkung, sie verzögern die Dauer der Relaxation zum thermodynamischen Gleichgewicht. Die Prozesse (4.4b) und (4.4c) beinhalten die Energieerhöhung des Elektronensystems durch Absorption eines Phonons, die die Dauer der Relaxation steigern.



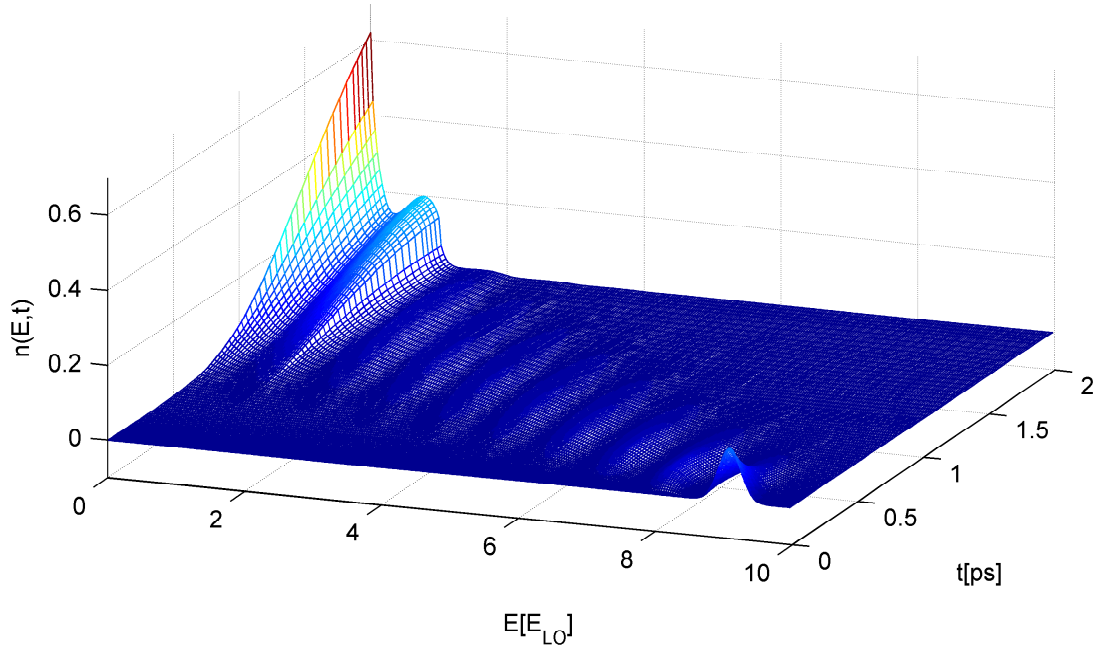


**Abb. 4.9:** Vergleich der genäherten (4.6) und der numerisch bestimmten vollständigen Lösung der zeitliche Entwicklung der maximalen elektronischen Endbesetzung (Zustand, dessen Energie unterhalb der konstanten LO-Phononenenergie liegt, aus dem daher keine weitere LO-Phononen-Emission stattfinden kann) im GaAs-Quantenfilm unter Wechselwirkung mit optischen Phononen.

### 4.3 Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen

Die Wechselwirkung mit akustischen Phononen wird in Abhängigkeit von der als linear angenommenen Dispersion durch das Deformationspotenzial bestimmt. Die Relaxation durch optische Phononen, wie sie in den vorangehenden Kapiteln diskutiert wurde, ereignet sich sehr viel schneller, konkret um einen Faktor  $\frac{|M_q^o|^2}{|M_q^a|^2} \approx \frac{10^4}{x^3}$  als die Relaxation durch die akustischen Phononen.

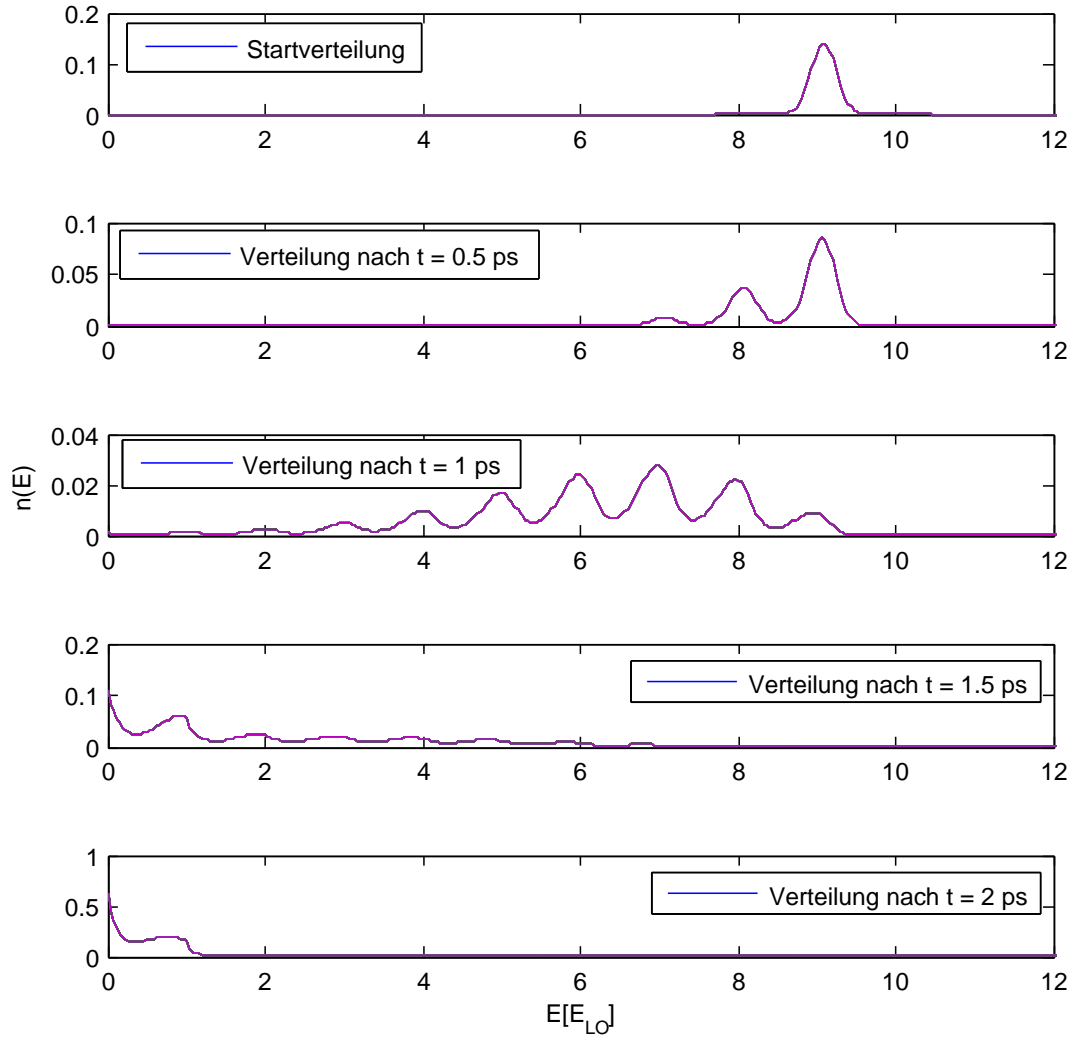
Jedoch ist die Besetzung der Phononenmoden mit geringer Energie um ein Vielfaches höher als in den Bereichen um die LO-Phononen-Energie. Die Wechselwirkungen mit niedrigerenergetischen akustischen Phononen finden also weit häufiger statt. Diese beiden Effekte kompensieren sich zum Teil gegenseitig.



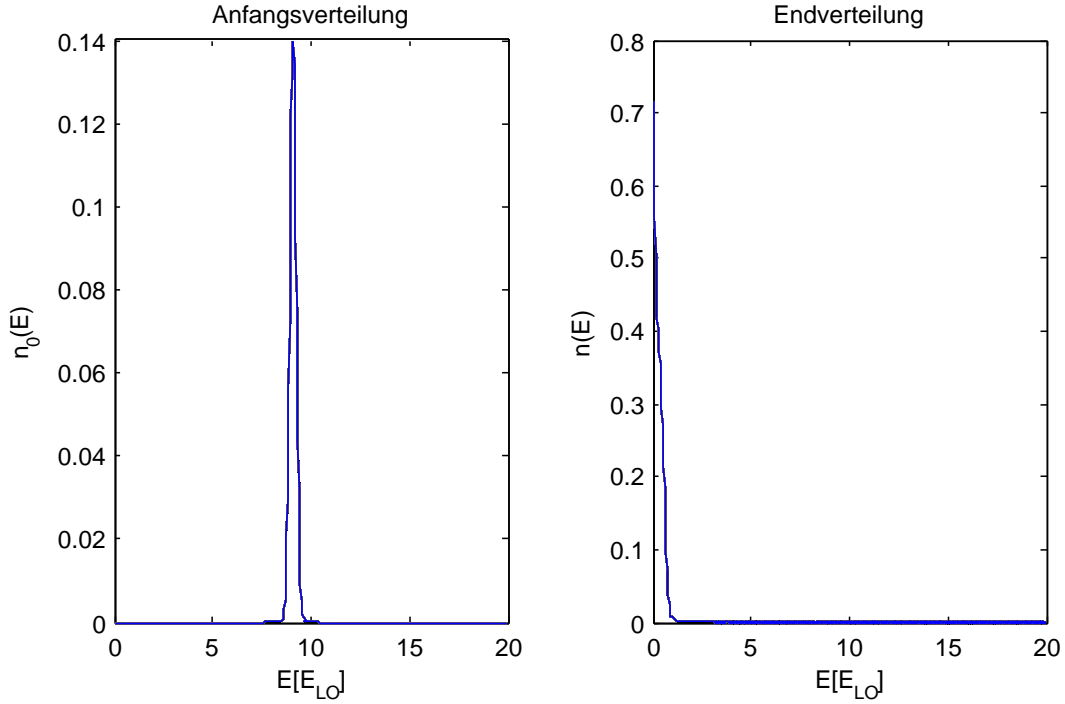
**Abb. 4.10:** Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion  $n(E)$  unter Berücksichtigung von Elektron-Phonon-Streuung an optischen und akustischen Phononen in Markov-Approximation für eine Anfangsverteilung um  $k^2 a_0^2 = 100$  mit einer Halbwertsbreite von  $0.2/a_0$  und einer Ladungsträgerdichte von  $10^{17}/\text{cm}^3$  in einem GaAs-Volumenmaterial über einen Zeitraum von 2 ps.

#### 4.3.1 Relaxation des Systems unter Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen

Abbildung 4.10 und Abbildung 4.11 als Schnitt durch die Verteilungsfunktion zu verschiedenen Zeiten zeigen die zeitliche Entwicklung der Besetzungsfunktion unter Berücksichtigung beider Wechselwirkungsprozesse. Die Replika, die sich durch die optischen Phononen herausbilden (Vergleiche Kapitel 4.1 und 4.2), sind nur leicht zerflossen, die gesamte Verteilung ist aber bereits nach rund 20 ps fast komplett zur durchs thermodynamische Gleichgewicht gegebenen Fermiverteilung relaxiert, wie Abbildung 4.12 durch den Vergleich der Anfangs- und der Endverteilung zeigt. Nach  $t = 1$  ps sind alle Zustände innerhalb eines gewissen Intervalls besetzt, die Replika der Startverteilung jedoch noch sichtbar. Nach  $t = 2$  ps sieht man, dass sich das System beginnt, der endgültigen Gleichgewichtsverteilung stärker als im Fall der ausschließlichen Betrachtung der Streuung an optischen Phononen anzunähern. Dies bestätigt auch die im nächsten Abschnitt durchgeführte Untersuchung der analog zu den vorherigen Kapiteln eingeführten effektiven Temperatur.



**Abb. 4.11:** Schnitte durch die zeitliche Entwicklung der elektronischen Besetzungsfunktion  $n(E,t)$  (Vergleiche Abbildung 4.10.) im Galliumarsenid-Volumenmaterial unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen. zu fünf verschiedenen Zeitpunkten bei einer gaussförmigen Startverteilung um  $ka_0 = 10$  mit einer Halbwertsbreite von  $0.2/a_0$  und einer Ladungsträgerdichte von  $10^{17}/\text{cm}^3$ . Die Energie ist in Vielfachen der LO-Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  angegeben.



**Abb. 4.12:** Anfangs- und Endverteilung der Elektron-Phonon-Streuung unter Berücksichtigung von optischen und akustischen Phononen bei der Anfangsverteilung um  $k^2 a_0^2$  nach 20 ps.

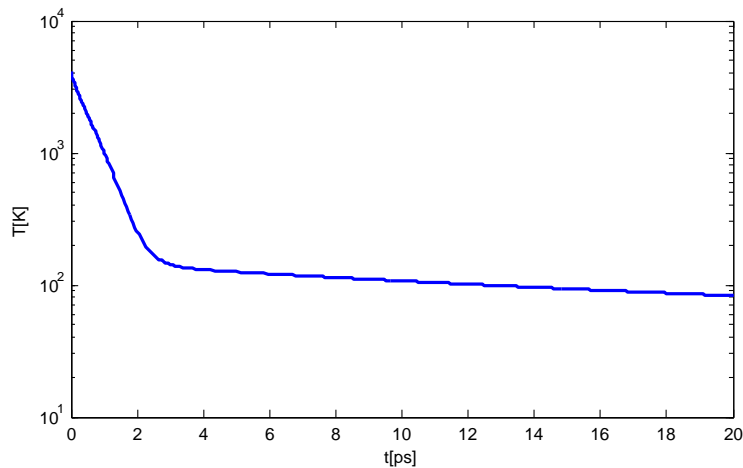
### 4.3.2 Effektive Temperatur

Analog zum vorherigen Kapitel lässt sich erneut eine effektive Temperatur der Nicht-Gleichgewichtsverteilung einführen, indem man eine Quasi-Fermiverteilung mit selber kinetischer Energie und Teilchendichte wie die tatsächliche Verteilungsfunktion bestimmt, deren Temperatur gegen die Gittertemperatur relaxieren sollte.

Vorausgesagt und festgestellt wurde (Kapitel 4.2.1) im Fall der ausschließlichen Betrachtung der Wechselwirkung durch optische Phononen, dass diese Temperatur oberhalb der Gittertemperatur verbleibt, da nur konstante Energiebeiträge durch LO-Phononen-Emission abgegeben werden konnten und sich daher auch nach Erreichen des detaillierten Gleichgewichtes energetisch unterhalb von besetzten Elektronenzuständen noch freie Zustände finden ließen. Da akustische Phononen eine Dispersion besitzen, kann für den Fall der Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen faktisch jeder Zustand besetzt werden, daher sollte sich die Energie der Gittertemperatur komplett annähern.

Das ist der Fall, wie Abbildung 4.13 bestätigt. Die optischen Phononen überführen die Temperatur in die Nähe der Gittertemperatur, die weitaus langsameren akustischen Phononen führen dann zur fast identischen Gittertemperatur, der Unterschied beträgt einige wenige Kelvin im Gegensatz zu 50-100 Kelvin im Fall optischer Phononen (Die tatsächliche Abweichung hängt von der betrachteten Ausgangssituation ab: Volumenmaterial oder Quantenfilm und die gegebene Startverteilung entscheiden hierüber).

Der Abfall der kinetischen Energie geht biexponentiell vonstatten, wie in Abbildung 4.13 gezeigt ist. Dies entspricht den Erwartungen: Sowohl die Streuung an optischen als auch die an akustischen Phononen besitzen eine charakteristische Relaxationszeit, daher zeigt sich jeweils für die Streuung durch optische Phononen und durch akustische Phononen eine charakteristische Steigung. Obwohl die Wechselwirkung der Streuung an akustischen Phononen um eine Größenordnung  $10^3$  schwächer ist als für optische Phononen, führt die sehr viel häufigere Besetzung der Phononenmoden mit kleinem  $q$  dazu, dass der Zustand des detaillierten Gleichgewichts ca. nach dem 10fachen der Zeit, die die Streuung optischer Phononen dazu benötigt, erreicht wird. Die Relaxationszeit ist also für die Deformationspotenzial-Wechselwirkung ca. 10mal so groß.



**Abb. 4.13:** Halblogarithmische Auftragung der zeitlichen Entwicklung der effektiven Temperatur des Systems für ein 3D-Volumenmaterial unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit optischen und akustischen Phononen. Dies ist die Temperatur, die eine Gleichgewichtsverteilung mit derselben kinetischen Energie und Teilchendichte wie die gegebene Verteilungsfunktion  $n(E,t)$  hat.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Wechselwirkung von Elektronen mit LO-Phononen über die polare Kopplung in einem GaAs-Volumenmaterial und einem Quantenfilm sowie optischen und akustischen Phononen in einem Volumenmaterial analytisch und numerisch untersucht. Die optischen Phononen wechselwirken über die Fröhlich-Kopplung, die akustischen Phononen über die Deformationspotenzial-Wechselwirkung mit den Elektronen. Ausgehend von einer Nichtgleichgewichtsverteilung der Ladungsträger im Leitungsband eines Halbleiters, über deren Zustandekommen qualitative Überlegungen angestellt wurden, wurde die Besetzungsdynamik, das Relaxieren gegen den Gleichgewichtszustand, untersucht.

Dabei wurde angenommen, dass die Phononenbesetzung durch Kopplung an ein Reservoir durch die Wechselwirkung mit den Elektronen nicht verändert wird, die Besetzung nach Bose-Statistik also nur von der Gittertemperatur abhängt (Reservoir-Annahme). Außerdem wurde die Energie der optischen Phononen als konstant angenommen, was eine gute Näherung darstellt.

Die Herleitung und Auswertung der Bewegungsgleichungen der Besetzungswahrscheinlichkeiten der Elektronenzustände erfolgte in Markov-Näherung. Durch die Streuung mit optischen Phononen, die nur die Verschiebung um einen konstanten Energiebetrag ermöglichen, bildeten sich die im Kapitel 4.1 dargestellten Kaskaden heraus. Hinzunahme der Wechselwirkung mit akustischen Phononen, die eine Dispersion besitzen, führte dazu, dass diese zunächst zerflossen und letzten Endes völlig verschwanden, das System erreichte die durch die Fermi-Verteilung vorgegebene Gleichgewichtsverteilung. Die Deformationspotenzial-Wechselwirkung ist allerdings ca. um den Faktor  $10^3$  schwächer als die Fröhlich-Kopplung. Ausgeglichen wurde dies zum Teil durch die größeren LA-Phononenbesetzungen für kleine  $k$ . Die Streuung an optischen Phononen wurde sowohl für die Elektronen in einem Volumenmaterial als auch in einem Quantenfilm betrachtet. Der direkte Vergleich der Relaxationsdynamiken zeigte die starke Abhängigkeit der Besetzungswahrscheinlichkeiten von der Zustandsdichte. Für das Volumenmaterial, das im Gegensatz zum Quantenfilm mit konstanter Zustandsdichte über eine beim  $\Gamma$ -Punkt gegen 0 konvergierende Zustandsdichte besitzt, nahmen die Besetzungen aufgrund der erhaltenen Teilchendichte stark zu. Aufgrund der konstanten Zustandsdichte lief der Relaxationsprozess in der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes im Quantenfilm schneller ab als im Volumenmaterial.

Um das Relaxieren auf einer zeitlichen Skala einordnen zu können, wurde eine effektive Temperatur eingeführt, die sich aus einer Fermifunktion mit derselben Energie und Teilchendichte wie die tatsächliche Besetzungsfunktion  $n(t)$  ergab. Diese effektive Temperatur fiel exponentiell ab. Ein Vergleich für verschiedene Anregungen zeigte, dass der relative zeitliche Unterschied der Dauer des Relaxationsprozesses im Volumenmaterial und dem

Quantenfilm umso größer ausfällt, umso schwächer das System angeregt wird. Dies ist die Folge der konstanten Zustandsdichte im Quantenfilm. Zusätzlich wurde die effektive Temperatur verwendet, um zu bestätigen, dass diese effektive Temperatur gegen die Gittertemperatur und somit die Verteilungsfunktion gegen die Fermiverteilung relaxiert. Da nicht jeder Zustand durch Streuung an optischen Phononen eingenommen werden konnte, verblieb die Temperatur jedoch auch nach Erreichen des detaillierten Gleichgewichtes über der Gittertemperatur. Für akustische Phononen, die das Erreichen jedes Zustandes ermöglichen, relaxierte das System hingegen komplett gegen die Gittertemperatur.

Die analytische Lösung der Besetzungsdynamik, die durch in den Abschnitten 4.1 und 4.2 gemachte Näherungen möglich wurde, wich für die gewählte Gittertemperatur von 77 Kelvin nur geringfügig von den vollständig numerisch ermittelten Lösungen ab und ermöglichte eine Erweiterung des Verständnisses des zugrundeliegenden Prozesses. So war es möglich, den Einfluss der Wechselwirkungsfaktoren auf die Gesamtdynamik zu benennen: Die Dauer der Relaxation des Systems gegen das thermische Gleichgewicht hängt in erster Ordnung linear von dem Produkt der Wechselwirkungsfaktoren der Kopplung zwischen zwei verschiedenen Zuständen  $x$  und  $x'$  ab.

Aufbauend auf dieser Arbeit könnten weitere Fragestellungen bearbeitet werden. So wurden diverse Näherungen verwendet, alle Rechnungen wurden in Markov-Approximation durchgeführt, also unter Vernachlässigung von Gedächtniseffekten. Die Frage nach der Gültigkeit dieser Näherung ist nicht einfach zu beantworten, hier könnten weiterführende Untersuchungen der Frage nachgehen, unter welchen Bedingungen diese Näherung angemessen ist und wann sie zu signifikanten Fehlern führt (beispielsweise für sehr kurze Zeiten, vergleiche Kapitel 2.1.1).

Die Faktorisierungsnäherung (3.8), die den Abbruch der Hierarchie der Bewegungsgleichungen ermöglichte und somit zu geschlossenen Bewegungsgleichungen führte, indem die Erwartungswerte der Operatoren in ein Produkt aus makroskopischen Erwartungswerten zerlegt wurden, wurde als gegeben eingeführt und nicht weiter erläutert. Hier könnten weitergehende Betrachtungen im Rahmen dieser Arbeit die Plausibilität erhöhen.

Des Weiteren könnte man die Kopplung über akustische Phononen im Quantenfilm sowie akustische und optische Phononen in Quantendrähten und Quantenpunkten betrachten. Der Prozess der Anregung wurde im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt, für das komplette Verständnis der gesamten Kausalkette Anregung  $\rightarrow$  Abregung ist auch eine Erweiterung um diesen Themenkomplex im Rahmen der Quantenoptik von Interesse. Diese Erweiterung um eine Anregung durch z.B. einen optischen Laserpuls oder elektrische Injektion würde für diese Arbeit allerdings nur eine verwertbare Anfangsverteilung liefern, auf den Relaxationsprozess und die Bewegungsdynamiken hätte sie keine Auswirkungen.

# A Kapitel im Anhang

## A.1 Parameter

In dieser Arbeit wurden für das betrachtete Galliumarsenid-System folgende Parameter und Konstanten, entnommen aus [5] und [11], verwendet:

Dirac-Konstante	$\hbar$	0,658	$meVps$
Boltzmann-Konstante	$k_b$	0,08617	$meV/K$
Fröhlich-Kopplungskonstante	$\alpha$	0,069	
relative effektive Elektronenmasse	$\mu/m$	1,284	
LO-Phononen-Frequenz	$\omega_{LO}$	54.71	$1/ps$
Deformationspotenzial	$D$	6,8	$eV$
Schallgeschwindigkeit	$c_s$	515	$m/s$
Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante	$\epsilon_\infty$	10,9	
Vakuum-Dielektrizitätskonstante	$\epsilon$	12,9	
exzitonische Bindungsenergie	$E_b$	4,2	$meV$
exzitonischer Bohrradius	$a_0$	$1.24 \cdot 10^{-8}$	$m$
Dichte	$\rho$	5,36	$g/cm^3$
Breite des Quantenfilmes	$L_z$	1	$nm$

## A.2 Die Boltzmannsche Eta-Funktion

Hier soll knapp die Eta-Funktion eingeführt und ihre allgemeine Nützlichkeit demonstriert werden. Die Boltzmannsche Eta-Funktion ist definiert als

$$H = Tr[\rho'(\ln(\rho) - \ln(\rho'))], \quad (A.1)$$

wobei  $\rho$  der statistische Operator eines gemischten Gleichgewichtszustandes und  $\rho'$  der statistische Operator irgendeines gemischten Nichtgleichgewichtszustandes sei. Die Eta-Funktion besitzt eine obere Schranke,

$$H \leq 0. \quad (A.2)$$



Eine wertvolle Eigenschaft, wie der folgende kurze Einschub beweist. Die Entropie eines Systems ist quantenstatistisch definiert als

$$S = -k_b Tr(\rho \ln(\rho)). \quad (\text{A.3})$$

Für die Entropie eines idealen Quantengases aus Fermionen bzw. Bosonen gilt:

$$TS = -k_b T \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} \ln(n_{\mathbf{k}}) \pm (1 \mp n_{\mathbf{k}}) \ln(1 \mp n_{\mathbf{k}})), \quad (\text{A.4})$$

wobei  $n_{\mathbf{k}}$  die Verteilungsfunktion der Teilchen ist. Der Zusammenhang zwischen Eta-Funktion und Entropiedichte ist durch (2.30) gegeben. Aus der Definition der Entropie (A.3) und der Eta-Funktion (A.1) folgt

$$k_b H = S' + k_b Tr(\rho' \ln(\rho)). \quad (\text{A.5})$$

Eine Auswertung der Spur in der Eigenbasis des statistischen Operators liefert

$$k_b Tr(\rho' \ln(\rho)) = k_b \sum_n \ln(\rho_n) \langle \rho_n | \rho' | \rho_n \rangle = -k_b \ln(\Gamma) Tr(\rho'),$$

was der Entropie mit negativem Vorzeichen  $-S$  entspricht.  $\Gamma$  ist das Phasenraumvolumen. Einsetzen in die Ungleichung (A.2) führt zu

$$S' \leq S.$$

Mit Hilfe der Eta-Funktion lässt sich z.B. das Überführen eines Systems durch einen Streuprozess in den thermodynamischen Gleichgewichtszustand, der durch die größtmögliche Entropie ausgezeichnet ist, belegen. Im Kapitel 2.5 wurde dies über den Zusammenhang (2.30) zwischen Entropie und Eta-Funktion für das Boltzmannsche Stoßintegral gezeigt.

## A.3 Exzitonische Einheiten

Wellenzahlvektoren wurden in dieser Arbeit als Produkt mit dem Bohrradius  $a_0$ , also als

$$\mathbf{x} = \mathbf{k} a_0 \quad (\text{A.6})$$

angegeben, Energien als Vielfache der Grundzustandsenergie  $E_b$  des Exzitons:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{E_k}{E_b}. \quad (\text{A.7})$$

$E_b$  ist hierbei durch

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \quad (\text{A.8})$$

gegeben, des Weiteren gilt

$$a_0 E_b = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0\epsilon_\infty}{me^2}. \quad (\text{A.9})$$

Damit ist es möglich, alle Rechnungen dimensionslos durchzuführen.

## A.4 Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

In Ionenkristallen sind sowohl negativ- als auch positiv geladene Ionen vorhanden. Optische Phononen zeichnen sich dadurch aus, dass die verschiedenen Atomsorten nicht in Phase schwingen, wodurch bei unterschiedlich geladenen Ionen ein Polarisationsfeld entsteht, was wiederum zu einem elektrischen Feld, das Grundlage der hier diskutierten polaren Kopplung ist, führt. Diese Kopplung wird in dieser Arbeit bei der Wechselwirkung von longitudinal-optischen Phononen mit Elektronen betrachtet. Aber zunächst folgen einige allgemeinere Betrachtungen.

Die Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitteratomen lässt sich durch

$$H_{int} = \sum_i V(\mathbf{r}_i) = \sum_{i,j} V_{el}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$$

beschreiben, wobei sich die Ortsvektoren der Gitteratome  $\mathbf{R}_j$  aus der Gleichgewichtsposition  $\mathbf{R}_j^0$  und einer Verschiebung  $\mathbf{Q}_j$  zusammensetzen. Für kleine Auslenkungen lässt sich das Potenzial entwickeln:

$$V_{el}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0 - \mathbf{Q}_j) = V_{el}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0) - \mathbf{Q}_j \nabla V_{el}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0) + \dots,$$

die Terme zweiter und höherer Ordnung sollen vernachlässigt werden. Das Potenzial der Elektron-Atom-Wechselwirkung kann als Fouriertransformierte

$$V_{el}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} V_{el}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q})(\mathbf{r})},$$

bzw. nach Bildung des Gradienten durch

$$\nabla V_{el}(\mathbf{r}) = \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} V_{el}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q})(\mathbf{r})},$$

ausgedrückt werden. Die Auslenkung lässt sich entwickelt nach Normalmoden sowie durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperator darstellen,

$$\mathbf{Q}_j = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^+), \quad (\text{A.10})$$

mit  $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$  als dem Einheitsvektor in Richtung der Schwingung  $\mathbf{q}$ . Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen ist durch

$$H_{int} = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \tilde{V}(\mathbf{r})$$

gegeben. Fourier-Transformation dieser Gleichung liefert

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+),$$

wobei

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \quad (\text{A.11})$$

und

$$M_{\mathbf{q}} = V_{el}(\mathbf{q}) \mathbf{q} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}N}} \quad (\text{A.12})$$

gegeben sind. Das Skalarprodukt  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}}$  ist nur für longitudinale Phononen ungleich Null, daher koppeln TO-Phononen nicht über die polare Kopplung an Elektronen. Für ein System ohne freie Ladungen gilt

$$\nabla D = 0 = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} (E_{\mathbf{q}} + 4\pi P_{\mathbf{q}}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

Für LO-Phononen sind sowohl elektrisches Feld  $E_{\mathbf{q}}$  als auch Polarisation  $P_{\mathbf{q}}$  parallel zu  $\mathbf{q}$ , was zur Gleichung

$$E_{\mathbf{q}} = -4\pi P_{\mathbf{q}}$$

führt. Die makroskopische Polarisation ist des Weiteren proportional zur Auslenkung:

$$P_{\mathbf{q}} = U_e Q_{\mathbf{q}},$$

wobei  $U_e$  eine Proportionalitätskonstante ist. Mit (A.10) wird daraus

$$E_{\mathbf{q}} = -4\pi U_e \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{LO}}} i\mathbf{q} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+).$$

Das elektrische Feld lässt sich durch ein Potenzial ausdrücken,

$$E = -\nabla\Phi = -i \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{q} \Phi_{\mathbf{q}},$$

damit ergibt sich

$$\Phi = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{4\pi e U_e}{q} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{LO}}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+).$$

Die Lösungen für  $U_e$  erhält man aus dem Potenzial zweier fixierter Elektronen, siehe [6]. Sie sind durch

$$U^2 = \frac{\rho \omega_{LO}^2}{4\pi} \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

gegeben. Damit lässt sich der Hamilton-Operator dann in der Form (3.18) mit (3.19) angeben. Für die Kopplung akustischer Phononen über das Deformationspotenzial gilt  $V(\mathbf{q}) \rightarrow D$  für  $q \rightarrow 0$  mit der Deformationskonstante  $D$ , die sich experimentell bestimmen lässt. Damit ergibt sich der Hamilton-Operator der Wechselwirkung als

$$H_{ep} = D \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}}} |\mathbf{q}| \rho(\mathbf{q}) (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^+), \quad (\text{A.13})$$

was mit  $\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$  der in Kapitel 3.3 verwendete Hamilton-Operator ist.

## A.5 Numerik

In diesem Abschnitt werden einige Hinweise zur verwendeten Numerik gegeben, die unabhängig von der konkreten Umsetzung (MATLAB, Fortran, C++ etc.) sind. Die gesamte in dieser Arbeit verwendete Numerik wurde in MATLAB umgesetzt. Zur Lösung des Systems linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung wurde das in MATLAB implementierte Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung verwendet. Die Integrationen, die sich nicht analytisch durchführen ließen, wurden unter Anwendung der Simpsonregel numerisch vollzogen.

Die LO-Phononen-Energie wurde als annähernd konstant angenommen, daher werden elektronische Besetzungen durch Streuung an optischen Phononen um einen konstanten Wert auf der Energieskala verschoben. Deswegen bietet sich die Wahl eines energieäquidistanten Gitters an, das alle Energiewerte, an die gestreut werden kann, beinhaltet. Für die gewählte Zahl an Gitterpunkten gilt: Einerseits muss die einzelne Energiezelle (Ein Bereich auf der Energieskala von einer LO-Phononen-Energie), die die gaussförmige Startverteilung enthält, gut aufgelöst sein, andererseits muss der insgesamt abgedeckte Bereich auf der Energieskala sowohl die Startverteilung als auch den Nullpunkt beinhalten. Die Lösung

der entstandenen Differenzialgleichungen (Kapitel 3.2) geht in MATLAB sehr schnell vonstatten, die Rechenleistung sollte daher nicht der begrenzende Faktor der Gitterauflösung sein. Im Rahmen dieser Arbeit wurde für die Streuung an optischen Phononen ein energieäquidistantes Gitter mit 1600 Punkten (80 pro Energiezelle \* 20 LO-Phononen-Energien) gewählt. Eine weitere Verfeinerung des Gitters brachte keine sichtbare Verbesserung der Ergebnisse.

Akustische Phononen besitzen eine Dispersion, daher können die übertragenen Energiebeiträge innerhalb eines bestimmten Intervalls alle Werte annehmen. Ein energieäquidistantes Gitter würde aufgrund der quadratischen Elektronendispersion zu numerischen Fehlern führen. Daher wurde ein impulsäquidistantes Gitter gewählt. Für dieses gilt natürlich, dass nicht jeder Zustand, der durch Streuung mit optischen Phononen erreicht wird, einen Gitterpunkt darstellt. Daher muss zwischen den Gitterpunkten interpoliert werden. Ein wichtiges Kriterium für die Qualität der verwendeten Interpolationsmethode ist die Erhaltung der Teilchendichte. Außerdem muss die gewählte Auflösung der quadratischen Dispersion Rechnung tragen: In der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes im Impuls-Gitter divergiert der Abstand zweier Zustände  $x$  und  $x'$ , die über LO-Phonon-Kopplung miteinander wechselwirken. Für die Lösung der Bewegungsgleichungen wurde im Fall der Betrachtung akustischer und optischer Phononen ein Gitter mit 1000 Punkten verwendet. Um den Vergleich mit der Wechselwirkung durch ausschließlich optische Phononen zu ermöglichen, wurden die erhaltenen Ergebnisse in Energie-Abhängigkeit umgerechnet und verglichen. Die optischen Phononen wechselwirkten ausschließlich auf den betrachteten energieäquidistanten Gitterpunkten, daher erübrigte sich die Interpolation.

Um im Zusammenhang mit der effektiven Temperatur in jedem Zeitschritt die jeweilige Fermiverteilung mit derselben kinetischen Energie und Teilchendichte wie die tatsächliche Verteilungsfunktion  $n(E)$  zu finden, wurde der in MATLAB implementierte Gleichungssystem-Lösealgorithmus `fsolve` verwendet. Der Erfolg hierbei hängt sensibel von den bereitgestellten Startwerten ab. Für ungünstig gewählte Startwerte wird keine korrekte Lösung zurückgegeben. Zur Abschätzung von Startwerten in äquivalenten oder ähnlichen Problemstellungen können beispielsweise die Resultate dieser Arbeit Verwendung finden.

## A.6 Ergänzungen zur Mathematik

### A.6.1 Koeffizienten der analytischen Lösung

Die Koeffizienten der einzelnen Summanden in der Lösung (4.6) der Differentialgleichung eines Zustandes sind durch

$$C_i = \prod_{j \neq i} \frac{1}{\lambda_j - \lambda_i}, \lambda_j \neq \lambda_i,$$

gegeben. Gezeigt werden soll an dieser Stelle die Gültigkeit der Behauptung

$$\sum_{i=1}^n \left( \prod_{j \neq i} \frac{1}{\lambda_j - \lambda_i} \right) = 0, \quad (\text{A.14})$$

dass also die Summe der reellen Koeffizienten der Lösung des genäherten Systems verschwindet. Das Polynom

$$\sum_{i=1}^n \left( \prod_{j \neq i} \frac{\lambda_j - x}{\lambda_j - \lambda_i} \right)$$

ist vom Grad  $n$  und an allen Stützstellen gilt:  $\lambda_i = 1$ . Nach dem Eindeutigkeitssatz über Interpolationspolynome ist das Polynom somit gleich dem Polynom, das konstant 1 ist und damit verschwindet der Leitkoeffizient, der bis auf das Vorzeichen durch (A.11) gegeben ist, qed.

### A.6.2 Hauptwert eines Integrals

Der Hauptwert eines Integrales (3.14) ist wie folgt definiert: Sei  $\int_a^b f(x)dx$  uneigentlich für  $c \in (a,b)$ . Dann bezeichnet man den Grenzwert

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left( \int_a^{c-\epsilon} f(x)dx + \int_{c+\epsilon}^b f(x)dx \right), \quad (\text{A.15})$$

sofern er existiert, als den Hauptwert des Integrals:  $P \left( \int_a^b f(x)dx \right)$ . Dieser findet z.B. in der Dirac-Identität Verwendung.

# Literaturverzeichnis

- [1] Paul Gartner, Vorlesungsmitschrift Quantenoptik, WS 2009/2010.
- [2] Gerd Czycholl, Vorlesungsmitschrift Quantenmechanik, SS 2007.
- [3] Gerd Czycholl, Theoretische Festkörperphysik: Von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen, 2007, 3. Auflage.
- [4] Hartmut Haug, Statistische Physik: Gleichgewichtstheorie und Kinetik, 2005, 2. Auflage.
- [5] T. Inoshita and H. Sakaki, Electron relaxation in a quantum dot: Significance of multiphonon processes, Physical Review Volume 46, Number 11, 1992.
- [6] Gerald Mahan, Many Particle Physics, 1993, 2. Auflage.
- [7] Frank Jahnke, Vorlesung Theoretische Festkörperphysik, 2008/2009.
- [8] Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie, 2005, 6. Auflage.
- [9] Hartmut Haug, Stephan W. Koch, Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors, 2004, 4. Auflage.
- [10] Jürgen Gutowski, Skript zur Festkörperphysik-Vorlesung, 2009.
- [11] Kolja Schuh, Einfluss von Polaron- und Memory-Effekten auf die Elektron-Phonon-Streuung in Halbleitern, Studienarbeit, Universität Bremen, 2007.
- [12] Otfried Madelung, Introduction to solid-state theory, 1996, 3. Auflage.
- [13] Alexander Dunaevskiy, Elektron-Phonon-Wechselwirkung und der temperaturabhängige elektrische Widerstand von Kupfer, Dissertation, Ludwig Maximilians Universität München, 2002.
- [14] B.R. Nag, Physics of Quantum Well Devices, 2000.
- [15] John Sydney Blakemore, Gallium Arsenide, 1987, 2. Auflage.
- [16] Patrick Ludwig, Structure Formation in Strongly Correlated Few-Particle Systems in Traps, Dissertation, Uni Rostock, 2004, <http://voyager.physik2.uni-rostock.de/GK567/patrick/patrick.html>.
- [17] Ilja N Bronstein, Taschenbuch der Mathematik, 2000, 5. Auflage.

- [18] Uli Lemmer, Skript Festkörperelektronik, LTI, Uni Karlsruhe, [http://www.lti.uni-karlsruhe.de/rd\\_download/FE\\_Skript\\_Kapitel4\\_8.pdf](http://www.lti.uni-karlsruhe.de/rd_download/FE_Skript_Kapitel4_8.pdf).
- [19] Martin Güngerich, Elektronische Struktur und Kristallgittereigenschaften von metastabilen III-(N,V)-Halbleitersystemen, Dissertation, Uni Marburg, 2007, <http://archiv.ub.uni-marburg.de/diss/z2008/0076/pdf/dmg.pdf>.
- [20] Edwin Batke, Angewandte Halbleiterphysik, Vorlesungsskript, Uni Würzburg, WS 2008/2009, [http://www.physik.uni-wuerzburg.de/fileadmin/11010600/lectures/VorlesungBatke/Angewandte\\_Halbleiterphysik\\_4.pdf](http://www.physik.uni-wuerzburg.de/fileadmin/11010600/lectures/VorlesungBatke/Angewandte_Halbleiterphysik_4.pdf).
- [21] Randall Feenstra, Scanning Tunneling Microscopy, <http://www.andrew.cmu.edu/user/feenstra/stm/>.
- [22] Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik, 2005, 6. Auflage.