



Universität Bremen



Institut für Theoretische Physik

# Polaronen in Halbleiter-Quantenpunkten

## Diplomarbeit

von

Kolja Schuh

2. 9. 2008

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Beschreibung von Halbleiter-Quantenpunkten</b>	<b>5</b>
2.1	Aufbau und Eigenschaften . . . . .	5
2.2	Hamilton-Operator . . . . .	8
2.3	Zwei-Band-System . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Vielteilchensysteme im Nicht-Gleichgewicht</b>	<b>15</b>
3.1	Allgemeine quantenstatistische Beschreibung . . . . .	15
3.2	Green's Funktionen auf der Keldysh-Zeitkontur . . . . .	17
3.3	Keldysh-Dynamik . . . . .	19
3.4	Auswertung der Keldysh-Dynamik . . . . .	23
3.5	Polaronische Selbstenergie . . . . .	27
<b>4</b>	<b>Spektrale Eigenschaften von Polaronen</b>	<b>29</b>
4.1	Spektralfunktion . . . . .	29
4.2	Quantenkinetische Beschreibung . . . . .	31
4.3	Retardierte Green's Funktion . . . . .	32
4.4	Polaronen in Quantenfilmen . . . . .	37
4.5	Polaronen in Quantenpunkten . . . . .	40
<b>5</b>	<b>Ladungsträgerkinetik</b>	<b>45</b>
5.1	Quantenkinetische Beschreibung . . . . .	45
5.2	Optische Anregung . . . . .	48
5.3	Relaxation . . . . .	52
<b>6</b>	<b>Rabi-Oszillationen unter dem Einfluss der Elektron-Phonon-Streuung</b>	<b>57</b>
6.1	Rabi-Oszillationen . . . . .	57
6.2	Berücksichtigung der Elektron-Phonon-Streuung . . . . .	59
6.3	Nummerische Ergebnisse . . . . .	60
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>65</b>
<b>A</b>	<b>Matrixelemente</b>	<b>67</b>
A.1	Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung . . . . .	67
A.2	Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung . . . . .	68
A.3	Zustände . . . . .	70
A.4	Überlapp-Integrale . . . . .	73
A.5	Nummerisch berechnete Matrixelemente . . . . .	76

<b>B</b>	<b>Faktorisierung der Elektron-Phonon-Streuung</b>	<b>77</b>
<b>C</b>	<b>Nummerik und Parameter</b>	<b>80</b>
C.1	Elektron-Loch-Bild . . . . .	80
C.2	Exzitonische Einheiten . . . . .	80
C.3	Nummerische Methoden . . . . .	81
C.4	Verwendete Parameter und Konstanten . . . . .	81
<b>D</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>82</b>

# 1 Einleitung

Aufgrund ihres hohen Anwendungspotentials sind optoelektronische Bauelemente auf Basis von Halbleiternanostrukturen in der Forschung aktuell von großem Interesse. Zu diesen Bauelementen gehören Laser-Dioden, lichtemittierende Dioden (LED) und Photo-Detektoren, die in vielen Alltagsgeräten, die z.B. zur optischen Datenspeicherung oder als Beleuchtung dienen, angewendet werden.

Ein wesentlicher Punkt für die Effizienz dieser Bauelemente ist die Verfügbarkeit von Ladungsträgern in benötigten Zuständen für z.B. Laser-Übergänge. Um die Zustandsdichte zu erhöhen, können Quantenpunkte verwendet werden, die aufgrund ihres Ladungsträgereinschlusses in alle drei Raumrichtungen ein diskretes Energiespektrum aufweisen und daher auch als "künstliche Atome" bezeichnet werden. Ein weiterer Vorteil von Quantenpunkten ist, dass das Energiespektrum und damit die optischen Eigenschaften über die Geometrie manipuliert werden kann. So lassen sich aus diesen maßgeschneiderte Laser realisieren.

Die Ladungsträger werden durch elektrische Spannung oder optische Pulse in hoch-energetischen Zuständen erzeugt. Daher ist die Effizienz der Streuprozesse von großem Interesse. Bei niedrigen Ladungsträgerdichten finden diese hauptsächlich durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung statt, wohingegen andere Prozesse, wie die Coulomb-Streuung, schwach sind.

In dieser Arbeit wird eine quantenkinetische Beschreibung der Elektron-Phonon-Streuung in Quantenpunkt-Strukturen präsentiert. Dazu wird zunächst eine Modellierung von Halbleiter-Quantenpunkten aus InGaAs vorgestellt, wobei insbesondere der Hamilton-Operator betrachtet wird. Danach wird auf die Beschreibung dieses Vielteilchensystems im Nicht-Gleichgewicht durch Green's Funktionen eingegangen und ein fundamentales Gleichungssystem aufgestellt, dessen numerische Auswertung mehrere Näherungen erfordert.

Begonnen wird mit der Auswertung der spektralen Eigenschaften. Dazu wird das Quasiteilchen Polaron eingeführt, das eine gekoppelte Anregung aus Ladungsträger und Phononen darstellt. Mit dessen Hilfe lassen sich die Spektralfunktionen interpretieren. Bei der Kinetik des Systems werden zunächst Relaxationsprozesse nach einer optischen Anregung untersucht. In diesem Zusammenhang wird auf die Energieerhaltung bei Streuprozessen in einem wechselwirkenden System eingegangen. Daneben ist die Wirkung der Elektron-Phonon-Streuung auf Rabi-Oszillationen, insbesondere beim optischen Schalten, von Interesse.

## 2 Theoretische Beschreibung von Halbleiter-Quantenpunkten

Halbleiter-Strukturen stellen Vielteilchen-Systeme dar, bei denen aufgrund der Anzahl der wechselwirkenden Teilchen ( $10^{23}$ ) eine direkte Lösung der Schrödingergleichung praktisch nicht durchführbar ist. Eine vereinfachende Beschreibung ist die zweite Quantisierung, bei der lediglich Besetzungen von Zuständen und nicht einzelne Teilchen betrachtet werden. Dadurch verzichtet man auf Informationen über die Eigenschaften einzelner ununterscheidbarer Teilchen, hat aber weiterhin die Informationen über die Eigenschaften des Systems.

Im Folgenden wird ein Modell der betrachteten Halbleiter-Quantenpunkte vorgestellt. Zur Diskussion des Hamilton-Operators wird zunächst ein allgemeines System in zweiter Quantisierung betrachtet, bevor auf das hier behandelte Zwei-Band-System eingegangen wird. Letztendlich wird die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix hergeleitet, mit der sich alle Erwartungswerte von Einteilchenoperatoren bestimmen lassen.

### 2.1 Aufbau und Eigenschaften

In dieser Arbeit wird eine Halbleiterstruktur aus selbstorganisiert gewachsenen InGaAs-Quantenpunkten (QD) auf einer InGaAs-Benetzungsschicht (WL) untersucht, die von GaAs umgeben ist. Bei der Benetzungsschicht handelt es sich um eine nur wenige Atomlagen dünne Schicht, die auch als Quantenfilm bezeichnet wird. Die Quantenpunkte bestehen aus dem selben Material wie die Benetzungsschicht, weisen aber eine größere Dicke auf. Ferner werden Quantenpunkte mit einer linsenförmigen Struktur, also flache Quantenpunkte, betrachtet. Abb. (2.1) zeigt einen Querschnitt dieser Struktur.

Aufgrund der kleineren Bandlücke von InGaAs ist in dieser Struktur das Potential für Ladungsträger zur Umgebung abgesenkt, so dass sich lokalisierte Zustände bilden, die in den Quantenpunkten in allen Raumrichtungen und in der Benetzungsschicht in der Wachstumsrichtung eingeschlossen sind. Dadurch sind die im Quantenpunkt gebundenen Zustände analog zu den Zuständen eines Elektrons in einem Atom diskret. Die Zustände in der Benetzungsschicht sind dagegen wie auch in einem Volumenmaterial quasikontinuierlich, wobei sich wegen des Einschlusses und der daraus resultierenden Quantisierung in einer Raumrichtung mehrere Subbänder bilden. In Kap. A.3 wird genauer auf diese Zustände eingegangen.

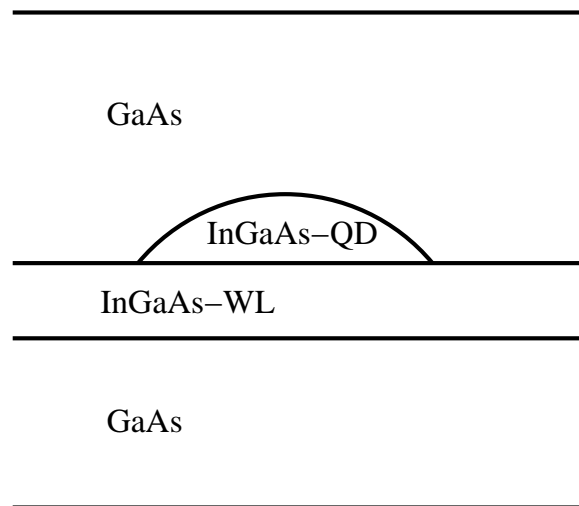


Abbildung 2.1: Aufbau der betrachteten Halbleiterstruktur.

### Wachstum

Die Herstellung erfolgt meist unter Verwendung der Molekularstrahlepitaxie (MBE), bei der die aufzubringenden Materialien auf einem Substrat aufgedampft werden. Durch eine geringen Gitterfehlانpassung zwischen Substrat und wachsendem Kristall, der die Quantenpunktstruktur bildet, kommt es zum Stranski-Krastanov-Wachstum. Bei diesem übernimmt der wachsende Kristall zunächst die Gitterabstände des Substrats. Dies führt zwar zu Spannungen, ist aber für geringe Schichtdicken energetisch günstiger, da so jedes Atom voll gebunden ist. So kommt es bei geringen Schichtdicken zu einem Schicht-für-Schicht-Wachstum, solange dieses trotz der Verspannungen energetisch günstiger ist, als zusätzliche Oberfläche aufzubauen. Diese Schichten bilden die Benetzungsschicht.

Mit zunehmender Schichtdicke nehmen die Verspannungen allerdings zu, so dass es ab einer kritischen Dicke energetisch günstiger ist, Inseln zu bilden, da diese ein verspannungsfreies Gitter ermöglichen. Dabei verteilen sich diese Inseln, die die Quantenpunkte darstellen, relativ homogen, da sich die während des Wachstums an der Oberfläche beweglichen Atome bevorzugt an schon vorhandene Inseln setzen, so dass in der Umgebung einer vorhandenen Insel weniger bewegliche Atome vorliegen und somit die Bildung einer Insel nahe einer anderen Insel unwahrscheinlich ist. Daher spricht man von einem selbstorganisierten Wachstum. Nach der Entstehung der Quantenpunkte wird der Wachstumsprozess mit dem Material des Substrats fortgesetzt. Abb. (2.2) zeigt eine Aufnahme einer derartigen Struktur mit einem Rastertunnelmikroskop (STM).

### Energetische Struktur

Für die elektronischen Eigenschaften eines Halbleiters sind nur die Zustände nahe des Fermi-niveaus interessant, da weit von diesem entfernt keinerlei Streuung

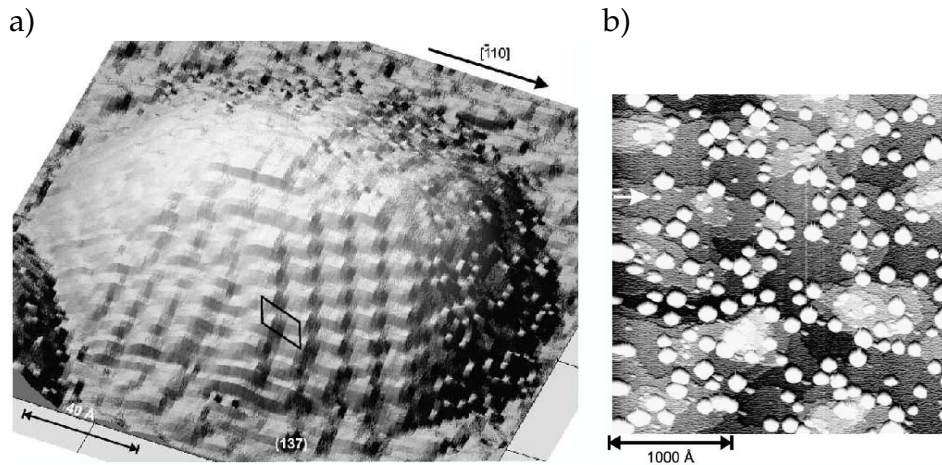


Abbildung 2.2: STM-Aufnahmen von selbstorganisiert gewachsenen InAs-Quantenpunkten auf GaAs (001) (aus [12]): (a) linsenförmiger einzelner Quantenpunkt, (b) auf der Benetzungsschicht zufällig verteilte Quantenpunkte (weiße Punkte) mit einer Dichte von  $1,9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

stattfinden kann, weil entweder alle Zustände besetzt oder unbesetzt sind. Das hier untersuchte InGaAs verfügt nahe des Fermi-niveaus über ein Valenzband und ein Leitungsband, die durch eine Bandlücke  $E_B$  getrennt sind.

In der Ebene der Benetzungsschicht liegt ein periodisches Gitter vor, so dass in dieser analog zu einem dreidimensionalen Kristall Bänder mit einer am  $\Gamma$ -Punkt näherungsweise parabolischen, quasikontinuierlichen Dispersion vorliegen. Dies lässt sich im Rahmen der Effektivmassennäherung [5] beschreiben, bei der die Ladungsträger im Kristall wie freie Elektronen mit einer der Bandkrümmung entsprechenden effektiven Masse behandelt werden. Der Einschluss der Ladungsträger in Wachstumsrichtung bedingt in dieser Richtung analog zu einem Potentialtopf diskrete Zustände mit diskreten Energien, so dass sich auf alle Richtungen bezogen mehrere Subbänder bilden. Da hier eine dünne Benetzungsschicht betrachtet wird, liegen die Energieniveaus in Wachstumsrichtung allerdings bezogen auf die betrachteten Energien weit auseinander und es reicht aus, für jedes Band einzig das unterste Subband zu betrachten.

Die Quantenpunkte zeichnen sich durch einen Einschluss der Ladungsträger in allen Raumrichtungen aus, was zu diskreten Zuständen führt. Dabei gilt wie für die Benetzungsschicht aufgrund der linsenförmigen Struktur der Quantenpunkte, dass die Energieniveaus in Wachstumsrichtung so weit auseinander liegen, dass lediglich der energetisch tiefste Zustand betrachtet werden muss. In der Wachstumsebene unterliegen die Ladungsträger dagegen einem näherungsweise harmonischen Potential, das sich aus der Breite des Quantenpunktes in Wachstumsrichtung ergibt, die näherungsweise harmonisch zur Mitte des Quantenpunktes hin zunimmt. Dieses Potential bewirkt einen harmonischen Oszillator entsprechende diskrete, äquidistante Energieniveaus. Dabei werden hier nur die zwei untersten Niveaus berücksichtigt. Analog zu den Zuständen eines Atoms wird abgeleitet aus der Drehimpul-

serhaltung für eine zylindersymmetrische Struktur der Grundzustand als s-Schale ( $m = 0$ ) und die zweifach entarteten angeregten Zustände als p-Schale ( $m = \pm 1$ ) bezeichnet.

Abb. (2.3) zeigt die energetische Struktur des verwendeten Modells.

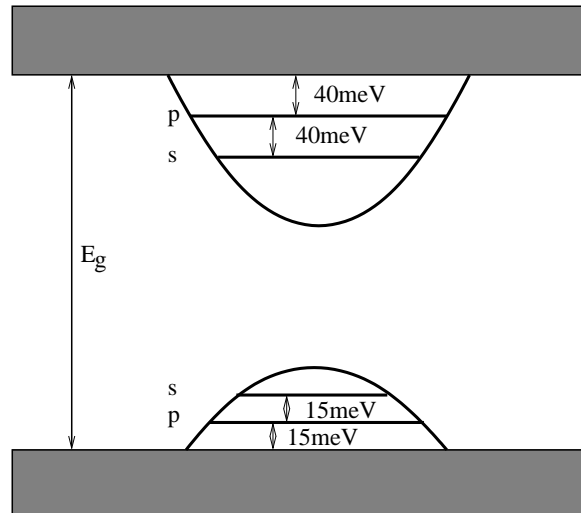


Abbildung 2.3: Energieschema des verwendeten Modells: Neben dem Valenz- und Leitungsband der Benetzungsschicht gibt es jeweils zwei Energieniveaus (s- und p-Schale) der Quantenzustände. Aufgrund der unterschiedlichen Masse der Elektronen und Löcher unterscheiden sich deren Energien sowie die Dispersion der Benetzungsschichtzustände.

## 2.2 Hamilton-Operator

Der Hamilton-Operator eines solchen Systems lässt sich in Teiloperatoren zerlegen. Dabei werden hier der Hamilton-Operator der Elektronen  $H_e$ , der Phononen  $H_{pn}$ , der Elektron-Phonon-Wechselwirkung  $H_{e-pn}$ , der Coulomb-Wechselwirkung  $H_{coul}$  und der Dipol-Wechselwirkung  $H_D$  betrachtet,

$$H = H_e + H_{pn} + H_{e-pn} + H_{coul} + H_D . \quad (2.1)$$

Die einzelnen Teiloperatoren werden im Folgenden in zweiter Quantisierung vorgestellt und erläutert. Dabei bezeichnen die Indizes 1, 2 in Verbindung mit einem Zustand  $\alpha, \beta$  das Band des jeweiligen Zustands. Dementsprechend bezeichnen  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  den bis auf das Band gleichen Zustand.



## Elektronen

Der Hamilton-Operator der Kristallelektronen ist in zweiter Quantisierung durch

$$H_e = \sum_{\alpha,1} E_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^{\dagger} a_{\alpha_1} \quad (2.2)$$

gegeben, wobei  $a_{\alpha_1}^{\dagger}$  Erzeugungs- und  $a_{\alpha_1}$  Vernichtungsoperator für ein Elektron im Zustand  $\alpha$  und Band 1 ist. Somit ist  $a_{\alpha_1}^{\dagger} a_{\alpha_1}$  der Besetzungsoperator für diesen Zustand, dessen Eigenwerte die Besetzung des Zustandes wiedergeben, so dass  $E_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^{\dagger} a_{\alpha_1}$  der Operator für die in diesem Zustand vorhandene freie Energie ist und diese über  $\alpha$  und 1 summiert die freie Gesamtenergie liefert. Dabei ist  $E_{\alpha_1}$  die wechselwirkungsfreie Energie eines Elektrons im Zustand  $\alpha_1$ . In der Effektivmassennäherung erhält man die Dispersion

$$E_{\alpha_1} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\alpha}^2}{2\mu_1} + E_1 \quad (2.3)$$

mit dem Impuls  $\hbar \mathbf{k}_{\alpha}$  der Elektronen im Zustand  $\alpha$ , dem Offset  $E_1$  und der über

$$\frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{\alpha_1}}{\partial |\mathbf{k}_{\alpha}|^2} \quad (2.4)$$

definierten effektiven Masse  $\mu_1$ .

Für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gelten die Anti-Vertauschungsrelationen für Fermionen

$$[a_{\alpha_1}, a_{\beta_2}^{\dagger}]_{+} = \delta_{\alpha,\beta} \delta_{1,2}, \quad [a_{\alpha_1}, a_{\beta_2}]_{+} = [a_{\alpha_1}^{\dagger}, a_{\beta_2}^{\dagger}]_{+} = 0. \quad (2.5)$$

## Phononen

Da die transversalen Phononen nicht mit den Ladungsträgern wechselwirken (s. Kap. A.2) und akustische Phononen aufgrund ihrer geringen Energie bei kleinen Impulsen  $\hbar \mathbf{q}$  nur kleine Beiträge für Streuprozesse liefern, werden nur die longitudinal optischen Phononen (LO-Phononen) berücksichtigt.

Der Hamilton-Operator der LO-Phononen ist

$$H_{pn} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} \left( b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.6)$$

wobei  $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$  Erzeugungs- und  $b_{\mathbf{q}}$  Vernichtungsoperator für ein Phonon in der Mode  $\mathbf{q}$  ist. Der Summand  $1/2\hbar\omega_{LO}$  ist die Grundzustandsenergie für jede Mode  $\mathbf{q}$ ; der andere Term ist wie bei den Elektronen als Besetzungsoperator zu interpretieren. Es gelten die Vertauschungsrelationen für Bosonen

$$[b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \quad [b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}] = [b_{\mathbf{q}}^{\dagger}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = 0. \quad (2.7)$$

Die Energie eines Phonons ist  $\hbar\omega_{LO}$ , die für alle Moden gleich ist, da für die LO-Phononen eine konstante Dispersion angenommen wird (s. Kap. A.2). Analog zu den Elektronen ist  $b_q^\dagger b_q$  Besetzungsoperator für die Phononenmoden  $q$ .

Die Phononen sollen hier in Form eines Bades vorliegen, das sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, so dass deren Besetzungswahrscheinlichkeit

$$N_{LO} = \langle b_q^\dagger b_q \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_b T}} - 1} \quad (2.8)$$

konstant ist. Dabei ist diese wegen der konstanten Energie der Phononen im thermodynamischen Gleichgewicht nicht von der Mode, sondern lediglich von der Temperatur  $T$  abhängig und folgt der Bose-Einstein-Statistik, wobei  $k_b$  die Boltzmannkonstante ist.

### Fröhlich-Kopplung

Der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator der Fröhlich-Kopplung, welche die Wechselwirkung von Elektronen mit LO-Phononen beschreibt, ist

$$H_{e-ph} = \sum_{\alpha, \beta, 1, q} M_{\alpha_1, \beta_1}(q) a_{\beta_1}^\dagger a_{\alpha_1} (b_q + b_{-q}^\dagger) . \quad (2.9)$$

Jeder der beiden Summanden unter der Summe beschreibt eine elementare Wechselwirkung. So setzt sich  $a_{\beta_1}^\dagger a_{\alpha_1} b_q$  aus der Vernichtung eines Elektrons im Zustand  $\alpha_1$  und eines Phonons in der Mode  $q$  sowie der Erzeugung eines Elektrons im Zustand  $\beta_1$  zusammen. Der Term beschreibt also die Streuung eines Elektrons vom Zustand  $\alpha_1$  in den Zustand  $\beta_1$  durch Absorption eines Phonons aus der Mode  $q$ . Dagegen liefert  $a_{\beta_1}^\dagger a_{\alpha_1} b_{-q}^\dagger$  die Streuung eines Elektrons vom Zustand  $\alpha_1$  in den Zustand  $\beta_1$  durch Emission eines Phonons in die Mode  $-q$ . Durch das Summieren über alle Ausgangs- und Endzustände der Elektronen  $\alpha_1, \beta_1$  und alle Phononenmoden  $q$  sind alle möglichen elementaren Wechselwirkungen dieser Art im Wechselwirkungs-Hamilton-Operator berücksichtigt. Dabei werden nur Übergänge im gleichen Band 1 betrachtet, da die Phononenenergie deutlich kleiner als die Bandlücke ist.

Das Matrixelement der Wechselwirkung  $M_{\alpha_1, \beta_1}(q)$  gibt die Stärke der Kopplung von Elektronen mit LO-Phononen an. Dieses wird in Kap. A.2 hergeleitet.

### Coulomb-Wechselwirkung

Der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator der Coulomb-Wechselwirkung lautet in zweiter Quantisierung

$$H_{coul} = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\beta, \beta'} \sum_{1, 2} \sum_q v_{\alpha_1 \beta_2 \beta'_2 \alpha'_1}(q) a_{\alpha_1}^\dagger a_{\beta_2}^\dagger a_{\beta'_2} a_{\alpha'_1} . \quad (2.10)$$

Analog zum Hamilton-Operator der Fröhlich-Kopplung werden hier die elementaren Prozesse der Coulomb-Wechselwirkung beschrieben, bei der zwei Elektronen aus den Zuständen  $\alpha'$  und  $\beta'$  in die Zustände  $\alpha$  und  $\beta$  gestreut werden. Durch das Summieren über alle Ausgangs- und Endzustände der Elektronen  $\alpha, \alpha', \beta, \beta'$  sind alle möglichen elementaren Wechselwirkungen dieser Art im Hamilton-Operator zweifach enthalten, was durch den Vorfaktor von  $1/2$  ausgeglichen wird. Das Matrixelement

$$v_{\alpha_1\beta_2\beta'_2\alpha'_1}(\mathbf{q}) = v_{\mathbf{q}} \langle \alpha_1 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \alpha'_1 \rangle \langle \beta_2 | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \beta'_2 \rangle \quad (2.11)$$

mit dem Coulomb-Potential

$$v_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{\epsilon q^2} \quad (2.12)$$

gibt die Stärke der Wechselwirkung an. Dieses wird in Kap. A.1 hergeleitet.

## Dipolübergänge

Die Wechselwirkung der Elektronen mit einem externen elektromagnetischen Feld  $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}$  wird über

$$H_D = \sum_{\alpha,\beta,\mathbf{q}} \sum_{1,2} -d_{\alpha_1,\beta_2}(\mathbf{q}) \mathbf{E}_{\mathbf{q}} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\beta_2} \quad (2.13)$$

beschrieben, wobei  $d_{\alpha_1,\beta_2}(\mathbf{q})$  das Matrixelement der Dipol-Wechselwirkung ist. Die elementare Wechselwirkung besteht dabei im Übergang eines Elektrons vom Zustand  $\beta_2$  in den Zustand  $\alpha_1$  durch Einwirkung von  $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}$ . Dabei wird das externe elektromagnetische Feld als klassische Größe behandelt.

Da der Impulsübertrag bei einer optischen Wechselwirkung klein ist, kann man näherungsweise davon ausgehen, dass nur direkte Übergänge vorliegen, bei denen sich zwar das Band, aber nicht der Impuls des Elektrons ändert. Dementsprechend werden keine Intrabandübergänge betrachtet, so dass

$$H_D = \sum_{\alpha,\mathbf{q}} \sum_{1 \neq 2} -d_{\alpha_1,\alpha_2}(\mathbf{q}) \mathbf{E}_{\mathbf{q}} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2} \quad (2.14)$$

gilt.

Zusammenfassend erhält man

$$H_e = \sum_{\alpha,1} E_{\alpha 1} a_{\alpha 1}^{\dagger} a_{\alpha 1} , \quad (2.15)$$

$$H_{pn} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} \left( b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) , \quad (2.16)$$

$$H_{e-pn} = \sum_{\alpha, \beta, 1, \mathbf{q}} M_{\alpha 1, \beta 1}(\mathbf{q}) a_{\beta 1}^{\dagger} a_{\alpha 1} \left( b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) , \quad (2.17)$$

$$H_{coul} = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\beta, \beta'} \sum_{1,2} \sum_{\mathbf{q}} v_{\alpha 1 \beta 2 \beta' 2 \alpha' 1}(\mathbf{q}) a_{\alpha 1}^{\dagger} a_{\beta 2}^{\dagger} a_{\beta' 2} a_{\alpha' 1} , \quad (2.18)$$

$$H_D = \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \sum_{1 \neq 2} -d_{\alpha 1, \alpha 2}(\mathbf{q}) \mathbf{E}_{\mathbf{q}} a_{\alpha 1}^{\dagger} a_{\alpha 2} . \quad (2.19)$$

### 2.3 Zwei-Band-System

Zur Beschreibung resonanter optischer Anregungen reicht es, lediglich das Valenzband (v) und das Leitungsband (c), also das im Grundzustand letzte besetzte und erste unbesetzte Band, zu betrachten. Für ein solches Zwei-Band-System vereinfachen sich die Hamilton-Operatoren (2.15)-(2.19) zu

$$H_e = \sum_{\alpha} E_{\alpha}^c c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + E_{\alpha}^v v_{\alpha}^{\dagger} v_{\alpha} , \quad (2.20)$$

$$H_{pn} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} \left( b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) , \quad (2.21)$$

$$H_{e-pn} = \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q}) \left( c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} + v_{\beta}^{\dagger} v_{\alpha} \right) \left( b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) , \quad (2.22)$$

$$H_{coul} = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\beta, \beta'} \sum_{\mathbf{q}} v_{\alpha \alpha' \beta \beta'}(\mathbf{q}) \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\beta'} c_{\alpha'} + v_{\alpha}^{\dagger} v_{\beta}^{\dagger} v_{\beta'} v_{\alpha'} + 2 c_{\alpha}^{\dagger} v_{\beta}^{\dagger} v_{\beta'} c_{\alpha'} \right] , \quad (2.23)$$

$$H_D = - \sum_{\alpha} \mathbf{d} \mathbf{E} c_{\alpha}^{\dagger} v_{\alpha} + \mathbf{d} \mathbf{E} v_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} , \quad (2.24)$$

wobei  $c^{(\dagger)}$  der Vernichter (Erzeuger) der Elektronen des Leitungsbandes und  $v^{(\dagger)}$  der des Valenzbandes ist.

Mit diesen Hamilton-Operatoren soll im Folgenden die Kinetik des Systems bestimmt werden. Dazu werden in einem ersten Schritt die Bewegungsgleichungen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aufgestellt und die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix, aus der sich alle Einteilchen-Größen des Systems gewinnen lassen, vorgestellt.

## Bewegungsgleichungen

Aus den Hamilton-Operatoren lassen sich nun die Bewegungsgleichungen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gewinnen. So ergibt sich im Heisenberg-Bild gemäß der Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$-i\hbar \frac{d}{dt} a(t) = [H, a(t)] , \quad (2.25)$$

für die Vernichtungsoperatoren des Leitungsbandes

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_\alpha |_e = -E_\alpha^c c_\alpha , \quad (2.26)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_\alpha |_{coul} = -\frac{1}{V} \sum_{\alpha' \beta \beta' \mathbf{q}} v_{\alpha \alpha' \beta \beta'}(\mathbf{q}) \left[ c_\beta^\dagger c_{\beta'} c_{\alpha'} + v_\beta^\dagger v_{\beta'} c_{\alpha'} \right] , \quad (2.27)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_\alpha |_D = \mathbf{d} \mathbf{E} v_\alpha , \quad (2.28)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_\alpha |_{e-pn} = - \sum_{\beta, \mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q}) \left( b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger \right) c_\beta , \quad (2.29)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} b_{\mathbf{q}} = -\hbar \omega_{LO} b_{\mathbf{q}} - \sum_{\alpha, \beta} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) a_\beta^\dagger a_\alpha . \quad (2.30)$$

Die Bewegungsgleichungen für die Erzeugungsoperatoren erhält man durch Adjungieren, wobei  $M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) = M_{\beta, \alpha}(\mathbf{q})^*$  gilt. Die Bewegungsgleichungen für die Valenzbandoperatoren sind analog aufgebaut und ergeben sich durch wechselseitiges Ersetzen von  $c$  und  $v$ .

## Dichteoperator

Mit Hilfe des Dichteoperators

$$\rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (2.31)$$

lassen sich beliebige Erwartungswerte

$$\langle A \rangle = Sp \{ \rho A \} \quad (2.32)$$

bestimmen, wobei  $p_{\alpha}$  die Wahrscheinlichkeit ist, das System im Zustand  $\alpha$  vorzufinden. Die Kenntnis des Dichteoperators ist also äquivalent zur Kenntnis aller Erwartungswerte des Systems.

Die hier betrachteten Größen, wie Besetzungen, lassen sich als Erwartungswert von Einteilchenoperatoren schreiben. Mit

$$|\alpha\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle \quad (2.33)$$

erhält man für den Einteilchen-Erwartungswert von  $A_1$ , der nur auf  $\alpha_1$  wirkt,

$$\begin{aligned}
 \langle A_1 \rangle &= \sum_{\alpha'_1, \alpha'_2, \dots} \langle \alpha'_1, \alpha'_2, \dots | \rho A_1 | \alpha'_1, \alpha'_2, \dots \rangle \\
 &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots} \sum_{\alpha'_1, \alpha'_2, \dots} \langle \alpha'_1, \alpha'_2, \dots | \rho | \alpha_1, \alpha_2, \dots \rangle \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots | A_1 | \alpha'_1, \alpha'_2, \dots \rangle \\
 &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots} \sum_{\alpha'_1, \alpha'_2, \dots} \langle \alpha'_1, \alpha'_2, \dots | \rho | \alpha_1, \alpha_2, \dots \rangle \langle \alpha_1 | A_1 | \alpha'_1 \rangle \langle \alpha_2, \alpha_3, \dots | \alpha'_2, \alpha'_3, \dots \rangle \\
 &= \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha'_1} \langle \alpha_1 | A_1 | \alpha'_1 \rangle \rho_{\alpha_1, \alpha'_1} .
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Für die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix  $\rho_{\alpha_1, \alpha'_1}$  erhält man über einen Vergleich mit einem in zweiter Quantisierung durch Erzeugungs- und Vernichtungs-Operator dargestellten Einteilchen-Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha' | A | \alpha \rangle \langle \Psi_{\alpha'}^\dagger \Psi_{\alpha} \rangle \tag{2.35}$$

direkt

$$\rho_{\alpha, \alpha'} = \langle \Psi_{\alpha'}^\dagger \Psi_{\alpha} \rangle . \tag{2.36}$$

So lässt sich für ein Zwei-Band-System die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix folgendermaßen in der Bloch-Darstellung schreiben:

$$\rho_{\alpha} = \begin{pmatrix} \langle c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha} \rangle & \langle v_{\alpha}^\dagger c_{\alpha} \rangle \\ \langle c_{\alpha}^\dagger v_{\alpha} \rangle & \langle v_{\alpha}^\dagger v_{\alpha} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{\alpha}^c & \Psi_{\alpha} \\ \Psi_{\alpha}^* & f_{\alpha}^v \end{pmatrix} . \tag{2.37}$$

Die Elemente der Dichtematrix entsprechen gerade den Besetzungen  $f_{\alpha}^{c,v}$  von Valenz- und Leitungsband sowie den Übergangsamplituden bzw. Polarisationen  $\Psi_{\alpha}$  zwischen diesen.

## 3 Vielteilchensysteme im Nicht-Gleichgewicht

Bei der Berechnung der zeitlichen Entwicklung von wechselwirkenden Vielteilchensystemen kommt es unweigerlich zu einem Hierarchie-Problem. Dabei koppeln die Bewegungsgleichungen von Einteilchen-Erwartungswerten an Zweiteilchen-Erwartungswerten, die wiederum an Dreiteilchen-Erwartungswerten koppeln, und so weiter. Die Methode der Green's Funktionen erlaubt es dieses Problem so umzuformulieren, dass man ein geschlossenes Gleichungssystem erhält.

Dieses Kapitel beginnt mit der Berechnung von Einteilchen-Erwartungswerten im Gleichgewicht, bevor die Methode der Green's Funktionen für Systeme im Nicht-Gleichgewicht vorgestellt wird. Dazu wird die Keldysh-Zeitkontur eingeführt. Ausgehend von der allgemeinen quantenstatistischen Beschreibung ergibt sich aus der Berechnung von beliebigen Einteilchen-Erwartungswerten die Definition der Einteilchen Green's Funktionen, deren Dynamik zu einem Hierarchie-Problem führt. Durch die Funktionalableitungstechnik gelingt es, die Zweiteilchen Green's Funktionen durch Einteilchen Green's Funktionen auszudrücken, so dass ein geschlossenes Gleichungssystem entsteht, dessen praktische Lösbarkeit durch verschiedene Näherungen erreicht wird. Letztendlich wird die polaronische Selbstenergie eingeführt, welche die Elektron-Phonon-Streuung selbstkonsistent beschreibt.

### 3.1 Allgemeine quantenstatistische Beschreibung

Der Hamiltonoperator des betrachteten Systems setzt sich aus dem wechselwirkungsfreien Anteil  $H_0$  und dem wechselwirkenden Anteil  $H_{WW}$  sowie einer explizit zeitabhängigen externen Störung  $H_{ext}$  zusammen,

$$H = H_0 + H_{WW} + H_{ext}(t) . \quad (3.1)$$

Durch einen entsprechenden Übergang ins Wechselwirkungs-Bild lässt sich die Zeitentwicklung der Zustände  $|\Phi_0\rangle$  durch  $H_{ext}(t)$  bestimmen,

$$|\Phi_0(t)\rangle = S(t, t_0) |\Phi_0(t_0)\rangle \quad \text{mit} \quad S(t, t_0) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_{ext}(t')} , \quad (3.2)$$

wobei die Zeitentwicklungsoperatoren mit

$$S(t_1, t_2) = S^{-1}(t_2, t_1) = S^\dagger(t_2, t_1) , \quad (3.3)$$

$$S(t_1, t_2) = S(t_1, t_3) S(t_3, t_2) \quad (3.4)$$

eine Gruppe bilden und  $T$  der Zeitordnungs-Operator ist. Dementsprechend wird die Zeitentwicklung der Operatoren durch  $H_0$  und  $H_{WW}$  durch

$$A_D(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0) \quad \text{mit} \quad U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0 + H_{WW})(t - t_0)} \quad (3.5)$$

bestimmt.

Für den Erwartungswert

$$\langle A \rangle = Sp(\rho A) \quad (3.6)$$

eines Operators  $A$  erhält man im Wechselwirkungs-Bild unter Ausnutzung der Gruppeneigenschaft (3.4)

$$\langle A(t) \rangle = Sp \{ \rho_D S(-\infty, \infty) T [S(\infty, -\infty) A_D(t)] \} . \quad (3.7)$$

Dabei ist  $\rho_D$  der Dichteoperator im Wechselwirkungs-Bild. Allerdings liegt keine einheitliche Zeitordnung vor, da der linke Teil dieses Erwartungswertes antizeitgeordnet und der rechte zeitgeordnet ist, was eine Berechnung mit quantenfeldtheoretischen Methoden verhindert, die eine einheitliche Zeitordnung benötigen [18].

## Gleichgewichtsfall

Wählt man das Wechselwirkungs-Bild für ein System im Gleichgewicht bei  $T = 0K$  ohne externe Störung der Art, dass  $H_{WW}$  die Zeitentwicklung der Zustände und  $H_0$  die der Operatoren beschreibt, bewegt sich das System gemäß dem Theorem von Gell-Mann und Low [18] durch adiabatisches Ein- und Ausschalten der Wechselwirkung

$$H_{WW} \rightarrow H_{WW} e^{-\nu|t|} \quad \text{mit} \quad \nu \rightarrow +0 \quad (3.8)$$

nicht aus den Grundzustand heraus.

Im Grundzustand lässt sich die benötigte Zeitordnung einfach herstellen, da man für den Erwartungswert nur Beiträge vom Grundzustand erhält,

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Phi_0 | S(-\infty, \infty) T [S(\infty, -\infty) A_D(t)] | \Phi_0 \rangle , \quad (3.9)$$

so dass man durch Einschieben der Identität und der Gruppeneigenschaft (3.3)

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \langle \Phi_0 | S(-\infty, \infty) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T [S(\infty, -\infty) A_D(t)] | \Phi_0 \rangle \\ &= \frac{\langle \Phi_0 | T [S(\infty, -\infty) A_D(t)] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \\ &= \frac{Sp \{ \rho_D T [S(\infty, -\infty) A_D(t)] \}}{Sp \{ \rho_D S(\infty, -\infty) \}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

erhält.



## 3.2 Green's Funktionen auf der Keldysh-Zeitkontur

Für eine explizit zeitabhängige Wechselwirkung gilt obige Argumentation nicht, da sich das System nicht mehr zwingend im Gleichgewicht befindet. Um dennoch eine einheitliche Zeitordnung zu erhalten, kann man die Keldysh-Zeit  $\underline{t}$  einführen, die bezüglich einer Zeitkontur  $C$  geordnet ist. Dabei ist  $\underline{t}$  auf dem oberen Zweig  $t_+$  bezüglich der physikalischen Zeit  $t$  zeitgeordnet und auf dem unteren Zweig  $t_-$  antizeitgeordnet. Ferner sind Zeiten auf  $t_+$  kleiner als Zeiten auf  $t_-$ . Die Kontur ist in Abb. (3.1) dargestellt.

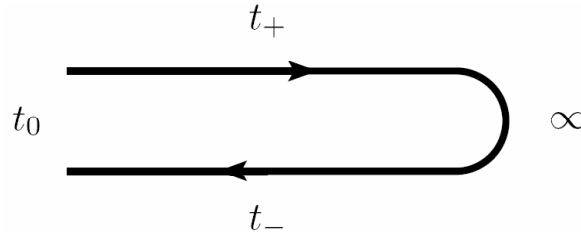


Abbildung 3.1: Keldysh-Zeitkontur  $C$

Erwartungswerte im Nichtgleichgewicht können so analog zum Gleichgewichtsfall (3.10) geschrieben werden. Entsprechend lässt sich eine Green's Funktion

$$\begin{aligned} i\hbar G(\underline{1}, \underline{2}) &= \frac{Sp \{ \rho_D T_C [S_C(\infty, -\infty) \Psi(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2})] \}}{Sp \{ \rho_D S_C(\infty, -\infty) \}} \\ &= \frac{\langle T_C [S_C(\infty, -\infty) \Psi(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2})] \rangle}{\langle S_C(\infty, -\infty) \rangle} \\ &= \langle \langle T_C [\Psi(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2})] \rangle \rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

bezüglich der Keldysh-Zeit definieren. Dabei beinhalten die Argumente  $\underline{1}, \underline{2}$  neben dem Ort, Spin und Band auch die Keldysh-Zeit  $\underline{t}$ . Der Zeitordnungs-Operator bezüglich der Keldysh-Zeit ist  $T_C$  und der Entwicklungsoperator  $S_C$ .

Bezüglich der Zweige der Keldysh-Kontur lässt sich die Green's Funktion als  $2 \times 2$ -Matrix, die sogenannte Keldysh-Matrix, schreiben

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = \begin{pmatrix} G(1_+, 2_+) & G(1_+, 2_-) \\ G(1_-, 2_+) & G(1_-, 2_-) \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

wobei sich die Diagonale aus kausaler und anti-kausaler Green's Funktion

$$G(1_+, 2_+) = -\frac{i}{\hbar} \langle \langle T [\Psi(1_+) \Psi^\dagger(2_+)] \rangle \rangle = G(1, 2), \quad (3.13)$$

$$G(1_-, 2_-) = -\frac{i}{\hbar} \langle \langle \tilde{T} [\Psi(1_-) \Psi^\dagger(2_-)] \rangle \rangle = \tilde{G}(1, 2) \quad (3.14)$$

zusammensetzt. Dabei ist  $\tilde{T}$  der Antizeitordnungs-Operator und die Argumente  $1, 2$  beinhalten Ort, Spin, Band und physikalische Zeit. Die Indizes  $+, -$  bezeichnen den

zugehörigen Zeitzweig. Die nicht-diagonalen Elemente

$$G(1_+, 2_-) = \frac{i}{\hbar} \langle \langle T [\Psi(2_-) \Psi^\dagger(1_+)] \rangle \rangle = G^<(1, 2) , \quad (3.15)$$

$$G(1_-, 2_+) = -\frac{i}{\hbar} \langle \langle T [\Psi(1_-) \Psi^\dagger(2_+)] \rangle \rangle = G^>(1, 2) \quad (3.16)$$

werden als Propagatoren bezeichnet. Diese liefern die Elemente der Dichtematrix in der Eigenfunktionsbasis, die in Kap. 3.4 eingeführt wird. So entsprechen die bezüglich der Zeit  $t$  und des Zustandes  $\alpha$  diagonalen Propagatoren den Besetzung bzw. Nicht-Besetzung des jeweiligen Zustands zur betrachteten Zeit

$$i\hbar G_{\alpha,\alpha}^<(t, t) = f_\alpha(t) , \quad (3.17)$$

$$i\hbar G_{\alpha,\alpha}^>(t, t) = 1 - f_\alpha(t) . \quad (3.18)$$

Entsprechend liefern die mit Ausnahme des Bandes diagonalen Propagatoren die Polarisation

$$i\hbar G_{\alpha_v, \alpha_c}^<(t, t) = -i\hbar G_{\alpha_v, \alpha_c}^>(t, t) = \Psi_\alpha(t) . \quad (3.19)$$

Durch Linearkombination erhält man ferner die retardierte und avancierte Green's Funktion

$$G^R(1, 2) = \Theta(t_1 - t_2) [G^>(1, 2) - G^<(1, 2)] , \quad (3.20)$$

$$G^A(1, 2) = -\Theta(t_2 - t_1) [G^>(1, 2) - G^<(1, 2)] . \quad (3.21)$$

Diese erlauben direkt eine Aussage über die spektralen Eigenschaften des Systems. Für eine Gleichgewichtssituation lässt sich aus der bezüglich der Relativzeit (s. Kap. 4.2) fouriertransformierten retardierten Green's Funktion die Spektralfunktion

$$\widehat{G}_\alpha(\hbar\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im G_{\alpha,\alpha}^R(\hbar\omega) \quad (3.22)$$

ableiten, die mit der Zustandsdichte verknüpft ist. Auf deren Eigenschaften wird in Kap. 4.1 genauer eingegangen.

Dabei gelten neben Gl. (3.20) und (3.21) die Relationen

$$[G^{\leq}(1, 2)]^* = -G^{\geq}(2, 1) , \quad (3.23)$$

$$[G^R(1, 2)]^* = G^A(2, 1) . \quad (3.24)$$

Die Elemente der Keldysh-Matrix sind also nicht voneinander unabhängig, so dass es ausreicht, lediglich zwei Funktionen zu betrachten. Aufgrund der direkten Aussage über Besetzung und spektrale Eigenschaften bieten sich hierfür  $G^<$  und  $G^R$  an.

### 3.3 Keldysh-Dynamik

Um die Green's Funktion und somit die Besetzung und die spektralen Eigenschaften des Systems zu bestimmen, bietet es sich an diese Funktion über ihre Dynamik zu bestimmen.

Dazu wird eine Theta-Funktion für Keldysh-Zeiten

$$\Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \delta(n_1, -) + n_1 \delta(n_1, n_2) \Theta(t_1 - t_2) = \begin{cases} \Theta(t_1 - t_2) & n_1 = +, n_2 = + \\ 0 & n_1 = +, n_2 = - \\ 1 & n_1 = -, n_2 = + \\ 1 - \Theta(t_1 - t_2) & n_1 = -, n_2 = - \end{cases} \quad (3.25)$$

mit den Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = n_1 \delta(n_1, n_2) \delta(t_1, t_2) , \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = -n_1 \delta(n_1, n_2) \delta(t_1, t_2) \quad (3.27)$$

eingeführt, wobei  $n_1 \in \{+, -\}$  den Zeit-Zweig von  $\underline{1}$  angibt. Damit lässt sich die Green's Funktion (3.11) ohne Zeitordnungs-Operatoren schreiben,

$$i\hbar G(\underline{1}, \underline{2}) = n_2 \Theta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \langle \langle \Psi(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2}) \rangle \rangle - n_2 \Theta(\underline{t}_2, \underline{t}_1) \langle \langle \Psi^\dagger(\underline{2}) \Psi(\underline{1}) \rangle \rangle . \quad (3.28)$$

Um nun eine Bewegungsgleichung für die Green's Funktion aufzustellen, wird zunächst die Zeitentwicklung der Feldoperatoren aus der Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi^{(\dagger)}(\underline{t}) = [\Psi^{(\dagger)}(\underline{t}), H_0 + H_{WW}] \quad (3.29)$$

gebildet. Der Hamilton-Operator setzt sich dabei aus dem wechselwirkungsfreien Anteil  $H_0$  und dem wechselwirkenden Anteil  $H_{WW}$  zusammen. Für den wechselwirkungsfreien Anteil erhält man allgemein

$$H_0 = \int d\underline{x}_1 \Psi^\dagger(\underline{1}) h(\underline{1}) \Psi(\underline{1}) \quad (3.30)$$

mit

$$h(\underline{1}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 , \quad (3.31)$$

wobei  $\underline{x}_1$  Ort, Spin und Band, aber nicht die Zeit von  $\underline{1} = \{\underline{x}_1, \underline{t}\}$  bezeichnet. Der wechselwirkende Anteil sei eine Zweiteilchen-Wechselwirkung

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \int d\underline{x}_1 d\underline{x}_2 \Psi^\dagger(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2}) V(\underline{1}, \underline{2}) \Psi(\underline{2}) \Psi(\underline{1}) . \quad (3.32)$$

Für die Coulomb-Wechselwirkung erhält man das Wechselwirkungspotential

$$V(\underline{1}, \underline{2}) = \frac{e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \delta(t_1 - t_2) . \quad (3.33)$$

Daraus folgt für die Zeitentwicklung der Feldoperatoren

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \Psi(\underline{1}) = h(\underline{1}) \Psi(\underline{1}) + \int d\underline{2} V(\underline{1}, \underline{2}) \Psi^\dagger(\underline{2}) \Psi(\underline{2}) \Psi(\underline{1}) , \quad (3.34)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \Psi^\dagger(\underline{1}) = h(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{1}) + \int d\underline{2} V(\underline{1}, \underline{2}) \Psi^\dagger(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2}) \Psi(\underline{2}) \quad (3.35)$$

so dass man für die Zeitentwicklung der Einteilchen Green's Funktion (3.28)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G(\underline{1}, \underline{2}) &= \delta(\underline{1}, \underline{2}) + h(\underline{1}) G(\underline{1}, \underline{2}) \\ &\quad - \frac{n_2}{i\hbar} \int d\underline{3} V(\underline{1}, \underline{3}) \langle \langle T_C \Psi(\underline{1}) \Psi(\underline{3}) \Psi^\dagger(\underline{3}^+) \Psi^\dagger(\underline{2}) \rangle \rangle \\ &= \delta(\underline{1}, \underline{2}) + h(\underline{1}) G(\underline{1}, \underline{2}) - i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) \end{aligned} \quad (3.36)$$

erhält. Dabei ist die  $\delta$ -Funktion mit Keldysh-Argumentan definiert als

$$\delta(\underline{1}, \underline{2}) = \delta(1, 2) \delta(n_1, n_2) . \quad (3.37)$$

Die Zeitentwicklung der Einteilchen Green's Funktion ist von einer Zweiteilchen Green's Funktion

$$G(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) = \frac{n_2 n_3}{(i\hbar)^2} \langle \langle T_C \Psi(\underline{1}) \Psi(\underline{3}) \Psi^\dagger(\underline{3}^+) \Psi^\dagger(\underline{2}) \rangle \rangle \quad (3.38)$$

abhängig, deren zeitliche Entwicklung wiederum von einer Dreiteilchen Green's Funktion abhängt und so weiter. Dieses Problem wird Hierarchieproblem genannt und im Folgenden durch die Funktionalableitungs-Technik in ein geschlossenes Gleichungssystem umgeformt.

## Funktionalableitung

Die Funktionalableitungs-Technik erlaubt Zweiteilchen Green's Funktion durch Einteilchen Green's Funktion darzustellen, so dass das Hierarchieproblem formal gelöst werden kann. Dabei wird eine Selbstenergie  $\Sigma$  eingeführt, welche die betrachtete Wechselwirkung beschreibt.

Dazu betrachtet man die Green's Funktionen

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = \frac{1}{i\hbar} \frac{\langle T_C [S_C \Psi(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{2})] \rangle}{\langle S_C \rangle} , \quad (3.39)$$

$$G(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) = \frac{n_2 n_3}{(i\hbar)^2} \frac{\langle T_C S_C \Psi(\underline{1}) \Psi(\underline{3}) \Psi^\dagger(\underline{3}^+) \Psi^\dagger(\underline{2}) \rangle}{\langle S_C \rangle} \quad (3.40)$$

mit den Entwicklungsoperatoren

$$S_C = T_C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_C dt H_{ext}(t)} \quad (3.41)$$

und einer externen Störung

$$H_{ext}(\underline{t}) = \int d\underline{1} U_{ext}(t) \Psi^\dagger(\underline{1}) \Psi(\underline{1}) \quad (3.42)$$

als vom Potential der externen Störung  $U_{ext}$  abhängige Funktionale. Mit den entsprechenden Funktionalableitungen

$$\frac{\partial S_C}{\partial U_{ext}(\underline{1})} = n_1 \frac{i}{\hbar} T_C S_C \Psi(\underline{1}) \Psi^\dagger(\underline{1}^+) , \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial U_{ext}(\underline{1})} \frac{1}{\langle S_C \rangle} = \frac{1}{\langle S_C \rangle} G(\underline{1}, \underline{1}^+) \quad (3.44)$$

lässt sich die Zweiteilchen Green's Funktion

$$G(\underline{1}, \underline{3}, \underline{2}, \underline{3}^+) = -\frac{\partial G(\underline{1}, \underline{2})}{\partial U_{ext}(\underline{3})} + G(\underline{3}, \underline{3}^+) G(\underline{1}, \underline{2}) \quad (3.45)$$

durch Einteilchen Green's Funktionen und eine Funktionalableitung ausdrücken. Dies liefert für die zeitliche Entwicklung der Einteilchen Green's Funktion (3.36)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G(\underline{1}, \underline{2}) &= \delta(\underline{1}, \underline{2}) + h(\underline{1}) G(\underline{1}, \underline{2}) \\ &\quad - i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{3}^+) G(\underline{1}, \underline{2}) \\ &\quad + i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) \frac{\partial G(\underline{1}, \underline{2})}{\partial U_{ext}(\underline{3})} . \end{aligned} \quad (3.46)$$

Um dies nun in ein geschlossenes Gleichungssystem umzuformen, definiert man über

$$i\hbar \int d\underline{3} n_3 V(\underline{1}, \underline{3}) \frac{\partial G(\underline{1}, \underline{2})}{\partial U_{ext}(\underline{3})} = \int d\underline{3} \Sigma(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) \quad (3.47)$$

eine Selbstenergie  $\Sigma$ . Dadurch erhält man mittels Einführung eines effektiven Potentials

$$U_{eff}(\underline{1}) = U_{ext}(\underline{1}) - i\hbar \int d\underline{2} n_2 V(\underline{1}, \underline{2}) G(\underline{2}, \underline{2}^+) \quad (3.48)$$

für die Green's Funktion

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(\underline{1}) - U_{eff}(\underline{1}) \right] G(\underline{1}, \underline{2}) - \int d\underline{3} \Sigma(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) = \delta(\underline{1}, \underline{2}) . \quad (3.49)$$

Mithilfe der über

$$\int d\underline{3} G(\underline{1}, \underline{3}) G^{-1}(\underline{3}, \underline{2}) = \int d\underline{3} G^{-1}(\underline{1}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{2}) = \delta(\underline{1}, \underline{2}) \quad (3.50)$$

definierten inversen Green's Funktion  $G^{-1}$  erhält man dabei für die Selbstenergie

$$\begin{aligned}\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) &= i\hbar \int d\underline{3} d\underline{4} V(\underline{1}, \underline{3}) \frac{\partial G(\underline{1}, \underline{4})}{\partial U_{ext}(\underline{3}^+)} G^{-1}(\underline{4}, \underline{2}) \\ &= i\hbar \int d\underline{3} d\underline{4} d\underline{5} V(\underline{1}^+ - \underline{3}) G(\underline{1}, \underline{4}) \frac{\partial G^{-1}(\underline{4}, \underline{2})}{\partial U_{eff}(\underline{5})} \frac{\partial U_{eff}(\underline{5})}{\partial U_{ext}(\underline{3})}.\end{aligned}\quad (3.51)$$

Durch die Vertex-Funktion

$$\Gamma(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) = \frac{\partial G^{-1}(\underline{1}, \underline{2})}{\partial U_{eff}(\underline{3})} \quad (3.52)$$

und die abgeschirmte Wechselwirkung

$$W(\underline{2}, \underline{1}) = \int d\underline{3} V(\underline{1}, \underline{3}) \frac{\partial U_{eff}(\underline{2})}{\partial U_{ext}(\underline{3})} = \int d\underline{3} V(\underline{1}, \underline{3}) \epsilon^{-1}(\underline{2}, \underline{3}) \quad (3.53)$$

lässt sich die zu

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 \int d\underline{4} d\underline{5} W(\underline{5}, \underline{1}^+) G(\underline{1}, \underline{4}) \Gamma(\underline{4}, \underline{2}, \underline{5}) \quad (3.54)$$

vereinfachen.

Für die eingeführte inverse dielektrische Funktion  $\epsilon^{-1}$  erhält man durch Einführung der Polarisationsfunktion

$$P(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 \frac{\partial G(\underline{1}, \underline{1}^+)}{\partial U_{eff}(\underline{2})} \quad (3.55)$$

und Ableitung des effektiven Potentials (3.48) gemäß Gl. (3.53)

$$\epsilon^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) = \delta(\underline{1}, \underline{2}) + \int d\underline{3} d\underline{4} V(\underline{1}, \underline{3}) P(\underline{3}, \underline{4}) \epsilon^{-1}(\underline{4}, \underline{2}), \quad (3.56)$$

so dass für die abgeschirmte Wechselwirkung  $W$  Gl. (3.61) folgt.

Durch Ableitung von Gl. (3.50) nach  $U_{eff}$  erhält man mit der Vertex-Funktion (3.52) für die Polarisationsfunktion (3.55) durch entsprechende Umformungen Gl. (3.63).

Mit Gl. (3.50) erhält man aus Gl. (3.49)

$$G^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) = G_0^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) - \Sigma(\underline{1}, \underline{2}) \quad (3.57)$$

und

$$G_0^{-1}(\underline{1}, \underline{2}) = \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(\underline{1}) - U_{eff}(\underline{1}) \right] \delta(\underline{1}, \underline{2}), \quad (3.58)$$

so dass Gl. (3.49) mit  $G_0(\underline{1}, \underline{2})$  von links multipliziert die Dyson-Gleichung (3.60) liefert.

Für die Vertex-Funktion erhält man ferner

$$\Gamma(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) = -\delta(\underline{1}, \underline{2}) \delta(\underline{1}, \underline{3}) - \frac{\partial \Sigma(\underline{1}, \underline{2})}{\partial U_{eff}(\underline{3})}. \quad (3.59)$$

Dies lässt sich mit Gl. (3.55) und (3.63) zu Gl. (3.64) umschreiben.

## Geschlossenes Gleichungssystem

Somit erhält man fünf Gleichungen, die ein geschlossenes Gleichungssystem bilden, mit dem die Green's Funktionen über die Dyson-Gleichungen

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = G_0(\underline{1}, \underline{2}) + \int d\underline{3} d\underline{4} G_0(\underline{1}, \underline{3}) \Sigma(\underline{3}, \underline{4}) G(\underline{4}, \underline{2}) , \quad (3.60)$$

$$W(\underline{1}, \underline{2}) = V(\underline{1}, \underline{2}) + \int d\underline{3} d\underline{4} V(\underline{1}, \underline{3}) P(\underline{3}, \underline{4}) W(\underline{4}, \underline{2}) , \quad (3.61)$$

die Selbstenergie und Polarisationsfunktion

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 \int d\underline{3} d\underline{4} G(\underline{1}, \underline{3}) \Gamma(\underline{3}, \underline{2}, \underline{4}) W(\underline{4}, \underline{1}^+) , \quad (3.62)$$

$$P(\underline{1}, \underline{2}) = i\hbar n_1 \int d\underline{3} d\underline{4} G(\underline{1}, \underline{3}) \Gamma(\underline{3}, \underline{4}, \underline{2}) G(\underline{4}, \underline{1}^+) \quad (3.63)$$

sowie die Vertex-Funktion

$$\Gamma(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) = -\delta(\underline{1}, \underline{2}) \delta(\underline{1}, \underline{3}) + \int d\underline{4} d\underline{5} d\underline{6} d\underline{7} \frac{\partial \Sigma(\underline{1}, \underline{2})}{\partial G(\underline{4}, \underline{5})} G(\underline{4}, \underline{6}) \Gamma(\underline{6}, \underline{7}, \underline{3}) G(\underline{7}, \underline{5}) \quad (3.64)$$

bestimmt sind.

Diese Gleichungen lassen sich auch als Feynman-Diagramme (Abb. (3.2)) darstellen, wobei eine doppelt durchgezogene Linie einer Green's Funktion und eine einfach durchgezogene Linie einer freien Green's Funktion entspricht. Selbiges gilt für die geschlängelten Wechselwirkungslinien.

Mit diesem Gleichungssystem ist das Hierarchieproblem formal gelöst. Aufgrund der Rekursion und der großen Anzahl von Integralen über mehrzeitige Größen ist der Aufwand zur Lösung allerdings so groß, dass weitere vereinfachende Näherungen notwendig sind.

## 3.4 Auswertung der Keldysh-Dynamik

### Random-Phase-Approximation

Eine erste Näherung stellt die Random-Phase-Approximation (RPA) dar, bei der die Vertex-Korrekturen vernachlässigt werden. Damit vereinfacht sich die Vertex-Funktion (3.64) zu einer  $\delta$ -Funktion

$$\Gamma^{RPA}(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}) = -\delta(\underline{1}, \underline{2}) \delta(\underline{1}, \underline{3}) , \quad (3.65)$$

so dass sich Selbstenergie und Polarisationsfunktion durch Einsetzen der RPA-Vertex-Funktion zu

$$\Sigma^{RPA}(\underline{1}, \underline{2}) = i\hbar n_1 G(\underline{1}, \underline{2}) W(\underline{2}, \underline{1}) , \quad (3.66)$$

$$P^{RPA}(\underline{1}, \underline{2}) = -i\hbar n_1 G(\underline{1}, \underline{2}) G(\underline{2}, \underline{1}) \quad (3.67)$$

vereinfachen.

$$\underline{1} \Rightarrow \underline{2} = \underline{1} \rightarrow \underline{2} + \underline{1} \rightarrow \overset{\underline{3}}{\bullet} \Sigma \bullet \overset{\underline{4}}{\bullet} \Rightarrow \underline{2} \quad (3.60')$$

$$\underline{1} \rightsquigarrow \underline{2} = \underline{1} \rightsquigarrow \underline{2} + \underline{1} \rightsquigarrow \overset{\underline{3}}{\bullet} P \bullet \overset{\underline{4}}{\bullet} \rightsquigarrow \underline{2} \quad (3.61')$$

$$\underline{1} \bullet \Sigma \bullet \underline{2} = \underline{1} \bullet \begin{array}{c} \overset{\underline{3}}{\bullet} \\ \curvearrowright \Gamma \curvearrowleft \\ \underset{\underline{4}}{\bullet} \end{array} \bullet \underline{2} \quad (3.62')$$

$$\underline{1} \bullet P \bullet \underline{2} = \underline{1} \bullet \begin{array}{c} \overset{\underline{3}}{\bullet} \\ \curvearrowright \Gamma \curvearrowleft \\ \underset{\underline{4}}{\bullet} \end{array} \bullet \underline{2} \quad (3.63')$$

$$\begin{array}{c} \underline{1} \\ \bullet \\ \Gamma \\ \bullet \\ \underline{3} \end{array} \bullet \underline{2} = - \overset{\bullet}{\underline{1}=\underline{2}=\underline{3}} + \begin{array}{c} \underline{1} \quad \overset{\underline{4}}{\bullet} \quad \overset{\underline{7}}{\bullet} \\ \bullet \quad \quad \bullet \\ \frac{\delta \Sigma}{\delta G} \quad \quad \Gamma \\ \bullet \quad \quad \bullet \\ \underline{2} \quad \underset{\underline{5}}{\bullet} \quad \underset{\underline{6}}{\bullet} \end{array} \bullet \underline{3} \quad (3.64')$$

Abbildung 3.2: Geschlossenes Gleichungssystem in diagrammatischer Darstellung, wobei Gl. (3.60') - (3.64') jeweils Gl. (3.60) - (3.64) entsprechen.

## Kadanoff-Baym-Gleichungen

Um von der Keldysh-Zeit wieder auf eine physikalische Zeit zu kommen, kann die Zeitintegration über die Keldysh-Kontur in Integrationen über die einzelnen Zeitstränge zerlegt werden

$$\int_C dt = \int_{-\infty}^{\infty} dt_+ - \int_{-\infty}^{\infty} dt_- . \quad (3.68)$$

Dabei gelten nach dem Langreth-Wilkins-Theorem für Ausdrücke der Form

$$\int d\underline{3} A(\underline{1}, \underline{3}) B(\underline{3}, \underline{2}) \quad (3.69)$$

die Relationen

$$(AB)^{\lessgtr} = A^R B^{\lessgtr} + A^{\lessgtr} B^A , \quad (3.70)$$

$$(AB)^{R/A} = A^{R/A} B^{R/A} . \quad (3.71)$$

Damit lässt sich die Dyson-Gleichung (3.60) durch Anwendung der freien inversen Green's Funktion in Gleichungen für die Propagatoren, sowie die retardierte und



avancierte Green's Funktion umformen,

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(1) - U_{eff}(t_1) \right] G^{\lessgtr}(1, 2) = \int d3 \left[ \Sigma^R(1, 3) G^{\lessgtr}(3, 2) + \Sigma^{\lessgtr}(1, 3) G^R(3, 2) \right], \quad (3.72)$$

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(1) - U_{eff}(t_1) \right] G^{R/A}(1, 2) = \delta(1, 2) + \int d3 \Sigma^{R/A}(1, 3) G^{R/A}(3, 2), \quad (3.73)$$

die als Kadanoff-Baym-Gleichungen bezeichnet werden. Die singulären Beiträge für  $G^{\lessgtr}$  verschwinden, weil jeweils eine Zeit auf dem oberen Zweig und die andere auf dem unteren Zweig der Keldysh-Zeitkontur liegt und somit die Keldysh-Zeiten nie übereinstimmen.

Selbiges bewirkt auch, dass im Falle einer instantanen Wechselwirkung  $\Sigma^{\lessgtr}$  verschwindet.

Dabei sind die Kadanoff-Baym-Gleichungen über  $G^R$  in Gl. (3.72) und die Selbstenergien  $\Sigma$  miteinander gekoppelt, so dass die durch  $G^<$  und  $G^R$  beschriebenen kinetischen und spektralen Eigenschaften des Systems koppeln.

## Verallgemeinerter Kadanoff-Baym Ansatz (GKBA)

Die Besetzungen des Systems werden durch die diagonalen Propagatoren bestimmt. Zur Berechnung dieser über die Kadanoff-Baym-Gleichungen sind allerdings nicht-diagonale Propagatoren erforderlich. Um das Problem weiter zu vereinfachen, sollen die zeitlich nicht-diagonalen Propagatoren im Rahmen des verallgemeinerten Kadanoff-Baym Ansatzes durch zeitlich diagonale Propagatoren ausgedrückt werden, so dass nur noch diese berechnet werden müssen.

Dazu wird die in [14] gezeigte Identität

$$\begin{aligned} G^{\lessgtr}(t_1, t_2) = & i\hbar \left[ G^R(t_1, t_2) G^{\lessgtr}(t_2, t_2) - G^{\lessgtr}(t_1, t_1) G^A(t_1, t_2) \right] \\ & + \Theta(t_1 - t_2) \int_{t_2}^{t_1} dt_3 \int_{-\infty}^{t_2} dt_4 \\ & G^R(t_1, t_3) \left[ \Sigma^R[t_3, t_4] G^{\lessgtr}(t_4, t_2) + \Sigma^{\lessgtr}[t_3, t_4] G^A(t_4, t_2) \right] \\ & + \Theta(t_2 - t_1) \int_{t_1}^{t_2} dt_3 \int_{-\infty}^{t_1} dt_4 \\ & \left[ G^{\lessgtr}(t_1, t_4) \Sigma^A[t_4, t_3] + G^R(t_1, t_4) \Sigma^{\lessgtr}[t_4, t_3] \right] G^A(t_3, t_2) \end{aligned} \quad (3.74)$$

betrachtet, deren 0-te Näherung als verallgemeinerter Kadanoff-Baym Ansatz

$$G^{\lessgtr}(t_1, t_2) = i\hbar \left[ G^R(t_1, t_2) G^{\lessgtr}(t_2, t_2) - G^{\lessgtr}(t_1, t_1) G^A(t_1, t_2) \right] \quad (3.75)$$

bezeichnet wird. Dabei werden die Propagatoren  $G^{\lessgtr}$  durch zweizeitige retardierte Green's Funktionen und einzeitige, also die Zeit betreffend diagonale, Propagatoren ausgedrückt, so dass nun die Berechnung der zeitlich nicht-diagonalen Propagatoren nicht mehr erforderlich ist.

## Basis aus Einteilchen-Zuständen

Im Folgenden sollen die Dyson-Gleichung (3.60) und die Selbstenergie (3.66) nach Einteilchen-Eigenfunktionen  $\Phi_{\alpha_1}$  entwickelt werden

$$G(\underline{1}, \underline{2}) = \sum_{\alpha, \beta, 1, 2} \Phi_{\alpha_1} G_{\alpha_1, \beta_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \Phi_{\beta_2}^* , \quad (3.76)$$

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = \sum_{\alpha, \beta, 1, 2} \Phi_{\alpha_1} \Sigma_{\alpha_1, \beta_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) \Phi_{\beta_2}^* . \quad (3.77)$$

Dazu werden die im Anhang (A.3) dargestellten orthogonalen Eigenfunktionen als Basis verwendet. Die Entwicklungsindizes  $\alpha_1, \beta_2$  stehen dabei für das Band  $1, 2 \in c, v$  sowie bei den Zuständen in der Benetzungsschicht für den Impuls  $\mathbf{k}$  und in den Quantenpunkten für die Position des Quantenpunkts  $\mathbf{R}$  und den Zustand  $m$ .

Allgemein erhält man so für die Dyson-Gleichung und die Selbstenergie

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{t}_1} - h_{\alpha_1}(\underline{t}_1) \right] G_{\alpha_1, \beta_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \delta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) + \sum_{\gamma, 3} \int d\underline{t}_3 \Sigma_{\alpha_1, \gamma_3}(\underline{t}_1, \underline{t}_3) G_{\gamma_3, \beta_2}(\underline{t}_3, \underline{t}_2) , \quad (3.78)$$

$$\Sigma_{\alpha_1, \beta_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \sum_{\gamma, \delta, 3, 4} W_{\alpha_1, \beta_2, \gamma_3, \delta_4}(\underline{t}_2, \underline{t}_1) G_{\gamma_3, \delta_4}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) . \quad (3.79)$$

Sowohl die Dyson-Gleichung als auch die Selbstenergie weisen in den Entwicklungsindizes nichtdiagonale Kopplungen auf, die durch physikalische Annahmen deutlich reduziert werden können.

Die Selbstenergie beschreibt die Wechselwirkungen, so dass es ausreicht, bei der Selbstenergie nur die Zustände zu betrachten, zwischen denen auch eine Wechselwirkung stattfindet. Da die hier betrachteten Quantenpunkte auf der Benetzungsschicht homogen verteilt sind, kann diese im Mittel in der Wachstumsebene als homogen angenommen werden, so dass aufgrund der damit verbundenen Translationsinvarianz nur bezüglich des Impulses diagonale Elemente beitragen (s. Kap. A.3).

Die geringe Dichte der hier betrachteten Quantenpunkte und der damit verbundene große Abstand zwischen diesen führt zu kleinen Überlapps der stark lokalisierten Wellenfunktionen verschiedener Quantenpunkte. Dementsprechend schwach sind die Korrelationen zwischen diesen, so dass diese hier nicht berücksichtigt werden.

Ferner werden die Green's Funktionen, die einen Quantenpunkt-Zustand mit einem Benetzungsschicht-Zustand verbinden, die sogenannten Kreuz-Korrelationen  $G_{\mathbf{k}, \nu, \nu'}$ , und die Korrelationen verschiedener Zustände eines Quantenpunkts  $G_{\nu, \nu'}$  vernachlässigt. Die Gültigkeit dieser Näherung wurde in [22] für retardierte Green's Funktionen bestätigt.

In der Selbstenergie werden somit nur noch bezüglich des Zustands diagonale Green's Funktionen berücksichtigt,

$$\Sigma_{\alpha_1, \alpha_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \sum_{\beta, 3, 4} W_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_3, \beta_4}(\underline{t}_2, \underline{t}_1) G_{\beta_3, \beta_4}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) . \quad (3.80)$$

Diese Näherung vereinfacht nicht nur die Berechnung einzelner Green's Funktionen, sondern ermöglicht es auch, nur bezüglich des Zustandes mit Ausnahme des Bandes diagonale Green's Funktionen zu berücksichtigen. Für die Dyson-Gleichung erhält man somit

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_{\alpha_1}(\underline{t}_1) \right] G_{\alpha_1, \alpha_2}(\underline{t}_1, \underline{t}_2) = \delta(\underline{t}_1, \underline{t}_2) + \sum_3 \int d\underline{t}_3 \Sigma_{\alpha_1, \alpha_3}(\underline{t}_1, \underline{t}_3) G_{\alpha_3, \alpha_2}(\underline{t}_3, \underline{t}_2) . \quad (3.81)$$

Somit koppeln verschiedene Zustände nur über die Selbstenergie.

## 3.5 Polaronische Selbstenergie

Durch Wahl der Selbstenergie wird festgelegt, welche Wechselwirkungsklassen betrachtet werden. Bisher wurde eine Coulomb-Wechselwirkung betrachtet, die durch die abgeschirmte Wechselwirkung  $W(\underline{2}, \underline{1})$  in der Selbstenergie dargestellt ist. Analog kann auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung, die eine über die Gitterionen vermittelte Coulomb-Wechselwirkung darstellt (s.Kap. A.2), betrachtet werden. Dazu wird die abgeschirmte Wechselwirkungslinie  $W(\underline{2}, \underline{1})$  der Coulomb-Wechselwirkung durch eine Linie der Elektron-Phonon-Wechselwirkung  $D(\underline{2}, \underline{1})$  ersetzt, was die polaronische Selbstenergie in RPA-Näherung

$$\Sigma(\underline{1}, \underline{2}) = G(\underline{1}, \underline{2}) D(\underline{2}, \underline{1}) \quad (3.82)$$

liefert, die der Selbstenergie der Coulomb-Wechselwirkung bis auf die Wechselwirkungslinie entspricht. In [21] ist eine direkte Herleitung über die Funktionalableitungstechnik zu finden.

Für die polaronische Selbstenergie der Propagatoren ergibt sich mittels der Feynman-Regeln [18] und durch Berücksichtigung der nur den Zustand betreffend diagonalen Green's Funktionen

$$\Sigma_{\alpha, \beta}^{\leqslant}(t_1, t_2) = \sum_{\gamma} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha, \gamma}(\mathbf{q}) M_{\gamma, \beta}(\mathbf{q}) G_{\gamma, \gamma}^{\leqslant}(t_1, t_2) d_{\mathbf{q}}^{\leqslant}(t_1, t_2) , \quad (3.83)$$

wobei  $M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})$  die Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung sind, die in Kap. A.2 genauer analysiert werden.

Daraus ergibt sich für die diagonalen Elemente der retardierten Selbstenergie

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha, \alpha}^R(t_1, t_2) &= \Theta(t_1 - t_2) (\Sigma_{\alpha, \alpha}^>(t_1, t_2) - \Sigma_{\alpha, \alpha}^<(t_1, t_2)) \\ &= \Theta(t_1 - t_2) \sum_{\beta} (G_{\beta, \beta}^> D_{\beta, \alpha}^< - G_{\beta, \beta}^< D_{\beta, \alpha}^>) \\ &= \Theta(t_1 - t_2) \sum_{\beta} (G_{\beta, \beta}^R D_{\beta, \alpha}^< + G_{\beta, \beta}^< (D_{\beta, \alpha}^< - D_{\beta, \alpha}^>)) . \end{aligned} \quad (3.84)$$

Geht man von einem unangeregten Kristall aus, so erhält man im Elektron-Loch-Bild (s. Kap. C.1) durch die verschwindende Besetzung  $G^<$  den vereinfachten Ausdruck

$$\Sigma_{\alpha,\alpha}^R(t_1, t_2) = \sum_{\beta} G_{\beta,\beta}^R D_{\beta,\alpha}^>. \quad (3.85)$$

Da sich die spektralen Eigenschaften bei einer geringen Anregungsdichte kaum ändern, stellt dies eine gute Näherung dar [8]. Durch das Wegfallen von  $G^<$  in der retardierten Selbstenergie entkoppelt die Kadanoff-Baym-Gleichung für die retardierte Green's Funktion (3.73) von der Besetzung, so dass  $G^R$  separat von der Kinetik berechnet werden kann.

Dabei beschreibt der freie Phononenpropagator

$$\begin{aligned} D_{\alpha,\beta}^>(t_1, t_2) &= \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) M_{\beta,\alpha}(-\mathbf{q}) d_{\mathbf{q}}^>(t_1, t_2) \\ &= \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) M_{\beta,\alpha}(-\mathbf{q}) \left\langle [b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^\dagger]_{t_2} [b_{-\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^\dagger]_{t_1} \right\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) M_{\beta,\alpha}(-\mathbf{q}) \left[ (1 + N_{LO}) e^{-i\omega_{LO}(t_1-t_2)} + N_{LO} e^{i\omega_{LO}(t_1-t_2)} \right] \end{aligned} \quad (3.86)$$

das sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindende Phononbad.

Ferner wird die Lebensdauer der LO-Phononen phänomenologisch durch eine zusätzliche Dämpfung  $e^{-\Gamma_{LO}/\hbar}$  berücksichtigt

$$D_{\alpha,\beta}^>(t_1, t_2) = \sum_{\mathbf{q}} |M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q})|^2 \left[ (1 + N_{LO}) e^{-i\omega_{LO}(t_1-t_2)} + N_{LO} e^{i\omega_{LO}(t_1-t_2)} \right] e^{-\frac{\Gamma_{LO}}{\hbar}(t_1-t_2)}. \quad (3.87)$$

In [20] wurde die Lebensdauer von LO-Phononen in einem analogen System experimentell untersucht. Dementsprechend wird hier  $\Gamma_{LO}/\hbar = 0,2/\text{ps}$  als phänomenologische Dämpfung verwendet.

## 4 Spektrale Eigenschaften von Polaronen

In diesem Kapitel werden die spektralen Eigenschaften, also die Eigenenergien des Systems, untersucht. Diese sind für die polaronische Selbstenergie unabhängig von der Kinetik, die allerdings weiterhin von den spektralen Eigenschaften abhängt und im nächsten Kapitel behandelt wird.

Zunächst wird die retardierte Green's Funktion als Spektralfunktion interpretiert, bevor ausgehend von den Kadanoff-Baym-Gleichungen die zeitliche Entwicklung der retardierten Green's Funktionen quantenkinetisch hergeleitet und untersucht wird. Anschließend werden diese im Frequenzraum als Spektralfunktionen betrachtet, um die Energie-Renormierungen durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung zu bestimmen. Zur Interpretation werden die Ladungsträger als Polaronen beschrieben, die eine gekoppelte Anregung aus Ladungsträger und Phononen darstellen.

### 4.1 Spektralfunktion

Für diagonale Green's Funktionen  $G$  und Selbstenergien  $\Sigma$  wird im Folgenden die Schreibweise  $G_\alpha = G_{\alpha,\alpha}$  verwendet.

Die Spektralfunktion eines Zustandes  $\alpha$

$$\hat{G}_\alpha(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im G_\alpha^R(\omega) \quad (4.1)$$

ergibt sich aus der zugehörigen, im Zustand diagonalen retardierten Green's Funktion. Diese lässt sich im Frequenzraum als

$$G_\alpha^R(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_\alpha + \Sigma_\alpha^R(\omega)} \quad (4.2)$$

schreiben, so dass die Spektralfunktion über

$$\hat{G}_\alpha(\omega) = \frac{1}{\pi} \Im \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_\alpha + \Sigma_\alpha^R(\omega)} \quad (4.3)$$

gegeben ist, wobei  $\epsilon_\alpha$  die freie Energie des Zustandes  $\alpha$  ist.

Die Bedeutung der Spektralfunktion wird zunächst anhand eines freien Teilchens diskutiert. Für dieses gilt

$$\Sigma_{\alpha}^R(\omega) = 0, \quad (4.4)$$

so dass für dessen Spektralfunktion ein  $\delta$ -Peak

$$\begin{aligned} \hat{G}_{\alpha,0}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \Im \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha} + i\nu} \quad \text{mit } \nu \rightarrow +0 \\ &= \delta(\hbar\omega - \epsilon_{\alpha}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

bei der freien Energie  $\epsilon_{\alpha}$  des betrachteten Zustandes folgt. Dies entspricht der Tatsache, dass nicht wechselwirkende Zustände eine fest definierte Energie besitzen.

Im einfachsten Fall bewirkt eine Wechselwirkung eine Renormierung der Zustandsenergie

$$\tilde{\epsilon}_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} + (\Delta_{\alpha} - i\Gamma_{\alpha}), \quad (4.6)$$

wobei der reale Anteil  $\Delta_{\alpha}$  eine Verschiebung der Energie und der imaginäre Anteil  $\Gamma_{\alpha}$  eine Verbreiterung des Energiepeaks bewirkt, die der durch die Wechselwirkung hervorgerufenen begrenzten Lebensdauer des Zustands entspricht. Dementsprechend erhält man anstelle eines  $\delta$ -Peaks, der einer unendlichen Lebensdauer entspricht, einen verbreiterten lorentzförmigen Peak

$$\hat{G}_{\alpha}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\alpha}}{(\hbar\omega - \epsilon_{\alpha} - \Delta_{\alpha})^2 + \Gamma_{\alpha}^2}. \quad (4.7)$$

Der wechselwirkende Zustand kann also nicht mehr mit einer scharfen Energie beschrieben werden, sondern mit einer Energieverteilung.

Im allgemeinen Fall können Spektralfunktionen komplexere Renormierungen mit mehreren Peaks aufweisen. Dabei kann jeder dieser Peaks als Quasiteilchen aufgefasst werden, dessen Energie durch die Position des Peaks und dessen Lebensdauer durch die Breite des Peaks gegeben ist.

### Zustandsdichte

Die Spektralfunktion eines Zustands kann als Projektion der Zustandsdichte auf den betreffenden Zustand aufgefasst werden. Die Zustandsdichte des Systems

$$D(\omega) = \sum_{\alpha} \hat{G}_{\alpha}(\omega) \quad (4.8)$$

ergibt sich somit direkt durch Summation über alle Zustände aus den Spektralfunktionen. Über die Normierung der Zustandsdichte ist so auch die Spektralfunktionen normiert,

$$1 = \int d\omega D(\omega) = \int d\omega \sum_{\alpha} \hat{G}_{\alpha}(\omega). \quad (4.9)$$

## 4.2 Quantenkinetische Beschreibung

Gemäß der Kadanoff-Baym-Gleichung (3.73) gilt für die zeitliche Entwicklung der retardierten Green's Funktionen

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_\alpha(t_1) \right] G_{\alpha,\beta}^R(t_1, t_2) = \delta(\alpha, \beta) \delta(t_1, t_2) + \sum_\gamma \int dt_3 \Sigma_{\alpha,\gamma}^R(t_1, t_3) G_{\gamma,\beta}^R(t_3, t_2) . \quad (4.10)$$

Von Interesse für die Bestimmung der Spektralfunktion und für die spätere Berechnung der Kinetik sind allerdings nur die den Zustand betreffend diagonalen retardierten Green's Funktionen,

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_\alpha(t_1) \right] G_\alpha^R(t_1, t_2) = \delta(t_1, t_2) + \sum_\beta \int dt_3 \Sigma_{\alpha,\beta}^R(t_1, t_3) G_{\beta,\alpha}^R(t_3, t_2) . \quad (4.11)$$

Indem entsprechend Kap. 3.4 nur diagonale Green's Funktionen berücksichtigt werden, vereinfacht sich diese Gleichung weiter,

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h_\alpha(t_1) \right] G_\alpha^R(t_1, t_2) = \delta(t_1, t_2) + \int dt_3 \Sigma_\alpha^R(t_1, t_3) G_\alpha^R(t_3, t_2) . \quad (4.12)$$

### Zweizeiten-Formalismus

Dabei ist  $h_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\alpha$  zeitunabhängig, so dass mit der Selbstenergie in RPA-Näherung

$$\Sigma_\alpha^R(t_1, t_2) = \Theta(t_1 - t_2) \sum_\beta D_{\alpha,\beta}^>(t_1, t_2) G_\beta^R(t_1, t_2) \quad (4.13)$$

folgt, dass die retardierten Green's Funktionen und Selbstenergien nur von Zeitdifferenzen  $t_1 - t_2$  abhängen, so dass durch Einführung der Schwerpunktszeit  $t$  und der Relativzeit  $\tau$

$$\begin{aligned} t &= \frac{t_1 + t_2}{2} \\ \tau &= t_1 - t_2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

mittels

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_1} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \frac{\partial}{\partial t_2} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \tau} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Gl. (4.12) weiter vereinfacht werden kann

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - h_\alpha \right] G_\alpha^R(\tau) = \delta(\tau) + \int d\tau' \Sigma_\alpha^R(\tau - \tau') G_\alpha^R(\tau') . \quad (4.16)$$

Damit sind die retardierten Green's Funktionen nur noch von einer Relativzeit  $\tau$  abhängig, so dass diese wie die Propagatoren als einzeitige Größen betrachtet werden können.

## Auswertung

Für die Berechnungen wird nicht direkt  $G^R$  bestimmt, sondern die über

$$G_\alpha^R(\tau) = G_{\alpha,0}^R(\tau) \tilde{G}_\alpha^R(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_\alpha \tau} \tilde{G}_\alpha^R(\tau) \quad (4.17)$$

definierte Renormierung  $\tilde{G}^R$ , da sich mit dieser Gl. (4.16) zu

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{G}_\alpha^R(\tau) = \int_0^\tau d\tau' \Sigma_\alpha^R(\tau - \tau') \tilde{G}_\alpha^R(\tau') e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_\alpha (\tau - \tau')} \quad (4.18)$$

vereinfacht.

Aus der Definition der Green's Funktion (3.11) folgt dabei

$$\tilde{G}_\alpha^R(0) = 1. \quad (4.19)$$

## 4.3 Retardierte Green's Funktion

### Asymptotische Lösung für große Zeiten

Für späte Zeiten lässt sich unter der Annahme, dass die Selbstenergie  $\Sigma_\alpha^R$  in Gl. (4.18) schnell verschwindet, für diese eine analytische Lösung finden und die Selbstenergie einordnen [1]. In diesem Fall gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{G}_\alpha^R(\tau) &\approx -\frac{i}{\hbar} \tilde{G}_\alpha^R(\tau) \int_0^\tau d\tau' \Sigma_\alpha^R(\tau - \tau') e^{-\frac{i}{\hbar} (\epsilon_\alpha - \Gamma_{LO})(\tau - \tau')} \\ &\approx -\frac{i}{\hbar} \tilde{G}_\alpha^R(\tau) \tilde{\Sigma}^R(\epsilon_\alpha), \end{aligned} \quad (4.20)$$

so dass man für späte Zeiten eine Energieverschiebung  $\Delta_\alpha = \Re \tilde{\Sigma}^R(\epsilon_\alpha)$  sowie eine exponentielle Dämpfung  $\Gamma_\alpha = \Im \tilde{\Sigma}^R(\epsilon_\alpha)$  erhält

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{G}_\alpha^R(\tau) = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \Re \tilde{\Sigma}^R(\epsilon_\alpha) + i \Im \tilde{\Sigma}^R(\epsilon_\alpha) \right) \tau \right], \quad (4.21)$$

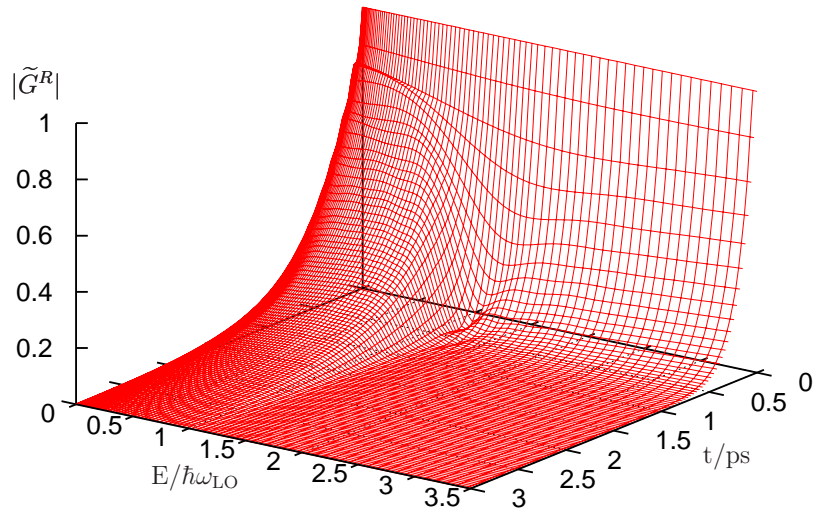
was gerade die in Kap. 4.1 für einfache Renormierungen besprochenen lorentzförmig verbreiterten und energetisch verschobenen Resonanzen der Spektralfunktion bewirkt.

## Nummerische Lösung

Zur numerischen Lösung der Differentialgleichung (4.18) der Renormierungsfunktion  $\tilde{G}_\alpha^R(\tau)$  werden die Relativzeiten  $\tau$  sowie die kontinuierlichen Zustände der



a)



b)

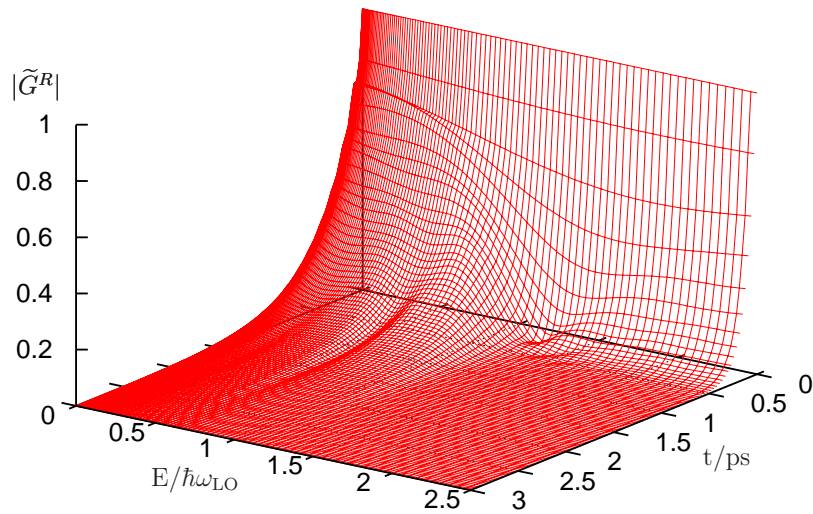


Abbildung 4.1: Betrag der Renormierungsfunktion der Green's Funktion für die Elektronen (a) und Löcher (b) der Benetzungsschicht bei 300K.

Benetzungsschicht diskretisiert. Die verwendeten Materialparameter sind in Kap. C.4 angegeben.

Entsprechend der asymptotischen Lösung für späte Zeiten lassen sich die Ergebnisse der numerischen Berechnung interpretieren. Dazu betrachtet man  $\tilde{G} = |\tilde{G}|e^{i\phi}$  in

Polardarstellung, so dass entsprechend (4.21) der Betrag  $|\tilde{G}|$  eine Dämpfungsfunktion und die Phase  $\phi$  eine Energieverschiebung darstellt.

Der Betrag der Renormierungsfunktion  $|\tilde{G}_\alpha(t)|$  ist für Raumtemperatur (300K) in Abb. (4.1a) für Elektronen und in Abb. (4.1b) für Löcher der Benetzungsschicht als Funktion der Relativzeit  $t$  und der freien Energie  $E$  der Zustände  $\alpha$  dargestellt. Es gilt  $\tilde{G}(0) = 1$ . Mit zunehmender Relativzeit fällt der Betrag näherungsweise exponentiell ab, wobei die Green's Funktionen der Elektronen für Energien oberhalb einer Phononenenergie deutlich schneller abfallen als unterhalb. Dementsprechend besitzen die Zustände unterhalb einer Phononenenergie eine längere Lebensdauer. Dies ist dadurch zu erklären, dass aus diesen Zuständen die Emission von Phononen kaum möglich ist, da es keine passenden Zielzustände mit um eine Phononenenergie reduzierter Energie gibt. Auch die Quantenpunktzustände liegen mit ihren Energien  $1,1\hbar\omega$  bzw.  $2,2\hbar\omega$  unterhalb der Bandkante und sind somit unpassend. Daher tritt fast ausschließlich Absorption auf, wodurch die Möglichkeit der Ausstreuung gegenüber den höherenergetischen Zuständen deutlich reduziert ist.

Bei den Löchern verhält es sich ebenfalls so. Allerdings liegen hier die Quantenpunktzustände  $0,4\hbar\omega$  bzw.  $0,8\hbar\omega$  unterhalb der Bandkante, so dass aus den Benetzungsschichtzuständen mit Energien um  $0,6\hbar\omega$  bzw.  $0,2\hbar\omega$  Emission von Phononen möglich ist. Deren reduzierte Lebensdauern zeigen sich in einem etwas schnelleren Abfall.

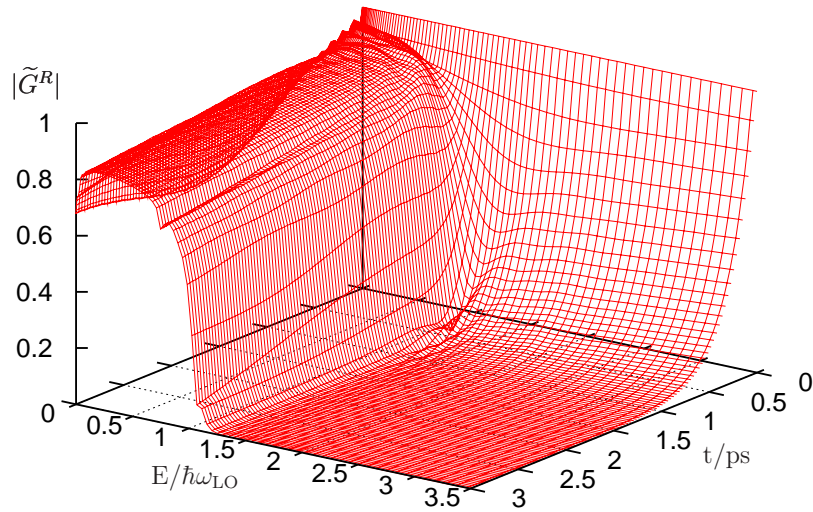
Da die spontane Emission temperaturunabhängig und die Absorption proportional zur Phonondichte ist, die einer Bose-Verteilung folgt, ist die Absorption bei niedrigeren Temperaturen im Vergleich zur Emission deutlich schwächer. So bilden sich bei 77K (s. Abb. (4.2a)) unterhalb einer Phononenenergie nur sehr langsam abnehmende Plateaus, wohingegen oberhalb einer Phononenenergie der Abfall deutlich weniger langsam abläuft. Auch sind die durch die Quantenpunktzustände ermöglichten Emissionsvorgänge bei den Löchern (s. Abb. (4.2b)) entsprechend bedeutsamer gegenüber der Absorption. So fallen die Green's Funktionen der betreffenden Zustände hier deutlich schneller ab als für die übrigen Zustände unterhalb einer Phononenenergie.

Zwar liegt die freie Energie der p-Schale der Elektronen mit  $-1,1\hbar\omega$  deutlich mehr als eine Phononenenergie von der Bandkante entfernt, doch gibt es bei den Elektronen an der Bandkante dennoch einen merklich schnelleren Abfall. Dies kann durch die Renormierungen der Elektron-Phonon-Wechselwirkung erklärt werden, durch die die Energiepeaks in der Spektralfunktion verbreitert werden, so dass auch Streuung zwischen Zuständen stattfindet, deren freie Energien aufgrund der Energieerhaltung keine erlauben würden.

Insbesondere auf den Plateaus sind Oszillationen mit einer Frequenz von etwa  $\omega_{LO}$  zu erkennen, die mit zunehmender Zeit immer schwächer werden. Diese deuten auf zusätzliche Peaks in der Spektralfunktion bei  $\pm\hbar\omega_{LO}$  hin (s. Kap. 4.4).

Für die Quantenpunktzustände sind die Ergebnisse des Betrags der Renormierungsfunktion  $|\tilde{G}|$  für Raumtemperatur (300K) in Abb. (4.3a) für Elektronen und

a)



b)

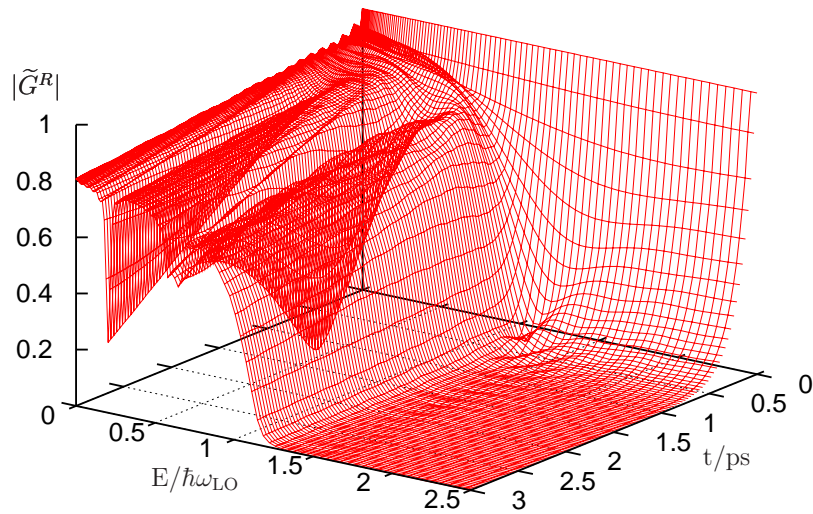


Abbildung 4.2: Betrag der Renormierungsfunktion der Green's Funktion für die Elektronen (a) und Löcher (b) der Benetzungsschicht bei 77K.

in Abb. (4.3b) für Löcher dargestellt. Dabei ergibt sich für die Quantenpunktzustände ein ähnlicher exponentieller Abfall wie für die Benetzungsschichtzustände, der jedoch deutlich komplexere Oszillationen aufweist. Wie auch die Oszillationen bei den Benetzungsschichtzuständen deuten diese auf zusätzliche Peaks in der Spektralfunktion hin. Auf diese wird in Kap. 4.5 eingegangen.

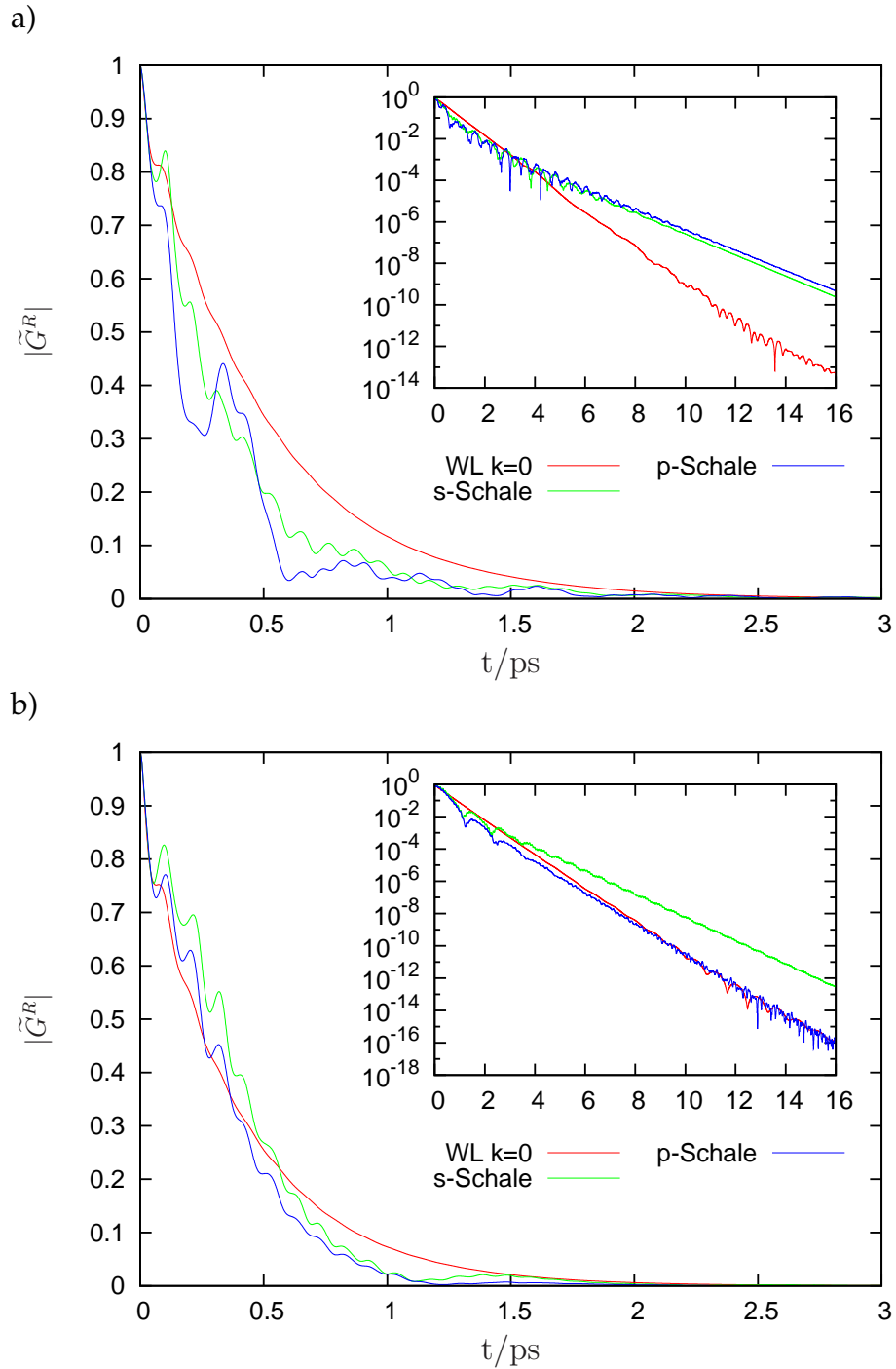


Abbildung 4.3: Betrag der Renormierungsfunktion der Green's Funktion für die Elektronen (a) und Löcher (b) der Quantenpunkte bei 300K: Zusätzlich zur s-Schale (grün) und p-Schale (blau) ist die Bandkante ( $k = 0$ ; rot) der Benetzungsschicht dargestellt. Inset: Selbiges logarithmisch aufgetragen.

## 4.4 Polaronen in Quantenfilmen

Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen führt zu neuen Quasiteilchen, den Polaronen, die sich aus einem Elektron und einer variablen Anzahl von Phononen zusammensetzen. Diese Quasiteilchen stellen sich gemäß Kap. 4.1 als Peaks in der Spektralfunktion dar, die entsprechend Gl. (4.1) leicht durch Fouriertransformation aus der bisher als Funktion der Zeit betrachteten retardierten Green's Funktion gewonnen werden kann. Da sich die Diskussion von Polaronen in Quantenfilmen und in Quantenpunkten deutlich unterscheiden, werden diese getrennt betrachtet. Dabei wird jeweils zuerst das Bild des Polarons vorgestellt, bevor die numerisch berechnete Spektralfunktion interpretiert wird.

Ein Elektron, das sich durch einen Ionenkristall bewegt, zieht durch die Coulomb-Wechselwirkung positiv geladene Ionen an und stößt negativ geladene ab, wodurch eine Polarisationswolke um das Elektron erzeugt wird (s. Abb. (4.4)). Durch diese wird die Energie des Elektrons abgesenkt, sowie dessen effektive Masse erhöht. Über diese Polarisationswolke wechselwirkt das Elektron mit Gitterschwingungen, wodurch eine gekoppelte Anregung aus Elektron und Gitterpolarisation entsteht.

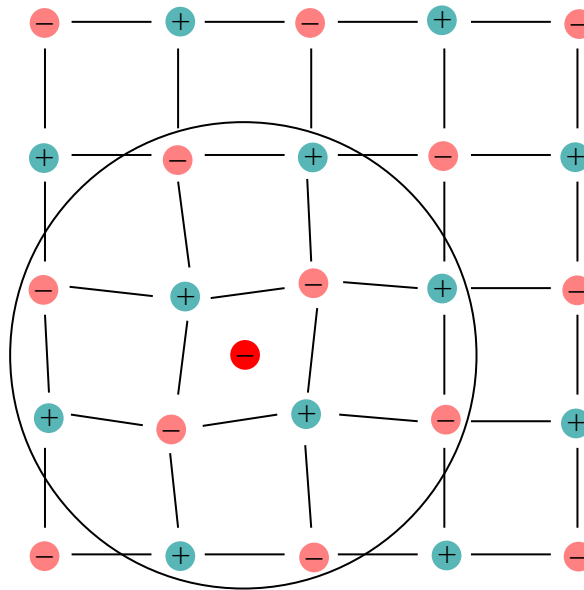


Abbildung 4.4: Ein Elektron verursacht in einem Ionenkristall eine Polarisationswolke.

In zweiter Quantisierung werden die Auslenkungen bzw. die Polarisation der Gitterionen als Phononen beschrieben. So wird eine gekoppelte Anregung aus Elektron und Gitterpolarisation durch ein ständig Phononen emitierendes und absorbierendes Elektron dargestellt, das als Polaron bezeichnet wird. Entsprechendes gilt für Löcher.

## Dispersion

Die Polaronen stellen dabei Eigenzustände des Hamiltonoperators der Elektron-Phonon-Wechselwirkung dar, deren Eigenwerte für eine schwache Kopplung ( $\alpha \ll 1$ ) ansatzweise durch Störungsrechnung 2. Ordnung [5,16] bestimmt werden können,

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - \Delta, \quad (4.22)$$

wobei

$$\Delta \approx \alpha \hbar \omega_{LO}, \quad (4.23)$$

$$\frac{m^*}{m} \approx 1 + \frac{\alpha}{6}. \quad (4.24)$$

Die Renormierung bewirkt eine konstante Energieabsenkung  $\Delta$ , den Polaronenshift sowie eine vergrößerte Masse  $m^*$  gegenüber einem starren Kristall (keine Phononen), wobei die parabolische Dispersion erhalten bleibt. Die Energieabsenkung wird durch die anziehende Wechselwirkung zwischen Elektron und Polarisationswolke hervorgerufen, die dadurch entsteht, dass abstoßende Gitterionen einen größeren Abstand und anziehende einen kleineren Abstand zum Elektron gegenüber einem starren Kristall einnehmen. Durch die Polarisationswolke, die sich bei der Bewegung des Elektrons mit bewegt, wird die Bewegung erschwert, wodurch die effektive Masse größer wird.

## Phononrepliken

Aus der Dyson-Gleichung (4.16) und der Selbstenergie (4.13) erhält man im Frequenzraum

$$G_{\alpha}^R(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha} - \Sigma_{\alpha}^R(\omega) + i\eta}, \quad (4.25)$$

$$\Sigma_{\alpha}^R(\omega) = \sum_{\beta, \mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 \left[ (N_{LO} + 1) G_{\beta}^R(\omega - \omega_{LO}) + N_{LO} G_{\beta}^R(\omega + \omega_{LO}) \right]. \quad (4.26)$$

Dabei liefert das Faltungsintegral der Dyson-Gleichung (4.16) im Frequenzraum ein Produkt und die Exponentialfunktionen des Phononpropagators der Selbstenergie die um  $\pm\omega_{LO}$  verschobenen retardierten Green's Funktionen.

In niedrigster Ordnung reicht es aus, in der Selbstenergie freie retardierte Green's Funktionen zu verwenden, so dass sich die Selbstenergie zu

$$\Sigma_{\alpha}^R(\omega) = \sum_{\beta, \mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 \left[ \frac{N_{LO} + 1}{\hbar(\omega - \omega_{LO}) - \epsilon_{\beta} + i\eta} + \frac{N_{LO}}{\hbar(\omega + \omega_{LO}) - \epsilon_{\beta} + i\eta} \right] \quad (4.27)$$

vereinfacht. Für kontinuierliche Zustände  $\beta$ , die hier in Form quasikontinuierlicher Zustände vorliegen, erhält man über die Dirac-Identität für den Imaginärteil

$$\Sigma_{\alpha}^R(\omega) = -\pi \sum_{\beta, \mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 [(N_{LO} + 1) \delta(\hbar(\omega - \omega_{LO}) - \epsilon_{\beta}) + N_{LO} \delta(\hbar(\omega + \omega_{LO}) - \epsilon_{\beta})] . \quad (4.28)$$

Die hierdurch beschriebenen  $\delta$ -förmigen Resonanzen in der Spektralfunktion gehen im Fall kontinuierlicher Zustände durch die Summation über  $\beta$  in eine kontinuierliche Spektralfunktion über. Durch die Form der Matrixelemente  $M_{\alpha, \beta}$  mit breiten Peaks für  $\epsilon_{\alpha} = \epsilon_{\beta}$  (s. Kap. A.5) erhält man verbreiterte Resonanzen bei  $\omega = \epsilon_{\alpha} \pm \omega_{LO}$ , die als Phononrepliken bezeichnet werden.

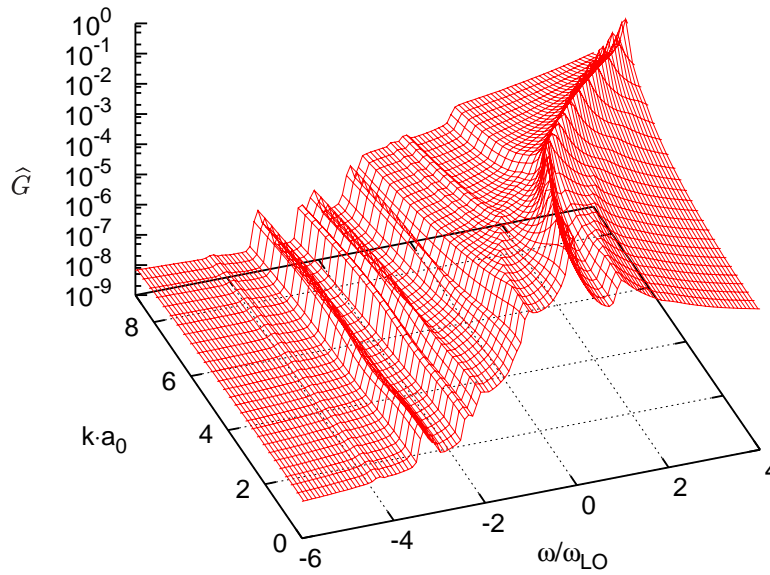
## Nummerische Ergebnisse

Abb. (4.5) zeigt die Ergebnisse der numerischen Rechnung für die Benetzungsschichtzustände bei 300K. Aufgetragen ist die Spektralfunktion  $\hat{G}$  als Funktion der Frequenz  $\omega$  und des Impulses  $k$  der betrachteten Zustände. Sowohl bei den Elektronen (Abb. (4.5a)) als auch bei den Löchern (Abb. (4.5b)) folgt der Hauptpeak in der  $\omega$ - $k$ -Ebene näherungsweise einer Parabel, welche weitgehend mit der modifizierten Dispersion der Störungsrechnung (Gl. (4.22)) übereinstimmt, also eine leicht erhöhte Masse und einen Polaronenshift, also eine abgesenkte Energie, aufweist. Dabei ist die Krümmung des Hauptpeaks bei den Löchern aufgrund ihrer größeren effektiven Masse schwächer als bei den Elektronen. Die Verbreiterung entspricht der Dämpfung und somit der Lebensdauer der Polaronen. Ab etwa einer Phononenergie wird dieser Peak entsprechend der verkürzten Lebensdauer, die besonders in den retardierten Green's Funktionen sichtbar ist, deutlich breiter.

Auch treten Phononrepliken auf, also um eine Phononenergie  $\hbar\omega_{LO}$  verschobene Peaks, die der Dispersion des Hauptpeaks folgen. Diese sind allerdings deutlich schwächer als der Hauptpeak. Die Phononrepliken können als Polaron, das gerade ein Phonon emittiert ( $+\hbar\omega_{LO}$ ), bzw. als Polaron, das gerade ein Phonon absorbiert ( $-\hbar\omega_{LO}$ ), aufgefasst werden. Dementsprechend ist der niederenergetische Peak nur für entsprechend große Temperaturen sichtbar.

Daneben sind mehrere dispersionslose Features zu erkennen, die ein Resultat der Wechselwirkung mit den Quantenpunktzuständen sind, auf die in Kap. 4.5 eingegangen wird.

a)



b)

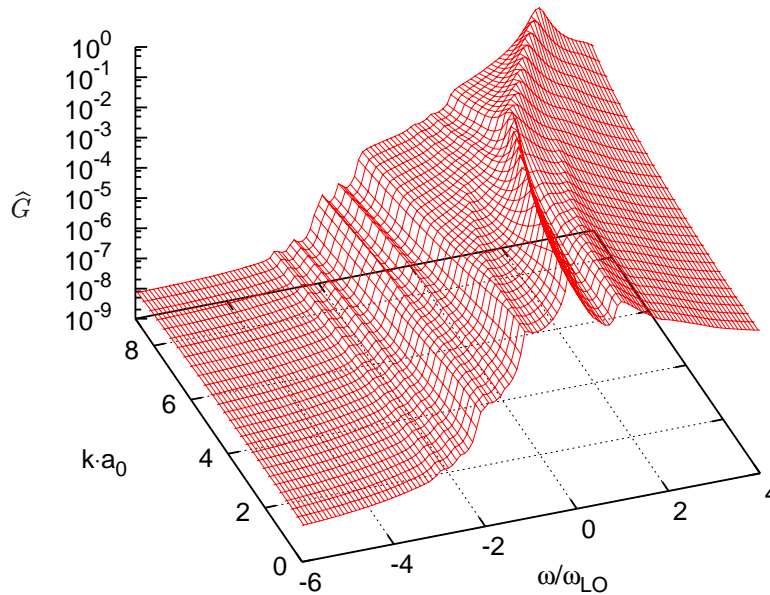


Abbildung 4.5: Polaronische Spektralfunktion für Elektronen (a) und Löcher (b) der Benetzungsschicht bei 300K

### 4.5 Polaronen in Quantenpunkten

Bei den diskreten Quantenpunktzuständen kommt es wie in der Benetzungsschicht zur Bildung von Phononrepliken. Im Gegensatz zu Quantenfilmen sind aber die Ladungsträger in Quantenpunkten lokalisiert, was zu einer starken Kopplung der



Quantenpunktzustände und damit auch zu einer Hybridisierung dieser führt.

## Independent Boson Model

Zunächst wird im Rahmen des Independent Boson Models ein einzelner diskreter Quantenpunktzustand  $\alpha$  betrachtet, der an LO-Phononen koppelt. Der Hamilton-Operator des Systems ist

$$H = \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} \left( b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha,\alpha}(\mathbf{q}) a_\alpha^\dagger a_\alpha (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) \quad (4.29)$$

und lässt sich durch eine kanonische Transformation zu

$$H = a_\alpha^\dagger a_\alpha (\epsilon_\alpha - \Delta) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (4.30)$$

mit

$$\Delta = \sum_{\mathbf{q}} \frac{|M_{\alpha,\alpha}(\mathbf{q})|^2}{\omega_{LO}} \quad (4.31)$$

umformen. Dies führt zu einer Spektralfunktion

$$\hat{G}_\alpha(\omega) = 2\pi e^{-\frac{\Delta(2N_{LO}+1)}{\omega_{LO}}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} I_l \left[ \frac{2\Delta}{\omega_{LO}} \sqrt{N_{LO}(N_{LO}+1)} \right] e^{\frac{l\beta\omega_{LO}}{2}} \delta(\omega - \epsilon_\alpha + \Delta - l \cdot \omega_{LO}) , \quad (4.32)$$

die sich aus mehreren  $\delta$ -Peaks im Abstand der Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  zusammensetzt [16], wobei  $I_l$  die Besselfunktionen sind. Dabei werden die Peaks mit zunehmendem Abstand von der renormierten Energie  $\epsilon_\alpha - \Delta$  schwächer.

Diese Peaks  $\hbar\omega = \epsilon_\alpha - \Delta + l \cdot \hbar\omega_{LO}$  lassen sich analog zur Benetzungsschicht verstehen.

## Hybridisierung

Bei zwei Zuständen, die an LO-Phononen koppeln, ergibt sich nicht nur für jeden Zustand eine Aufspaltung entsprechend des Independent Boson Models, sondern es kommt aufgrund der starken Kopplung zwischen Quantenpunktzuständen auch zu einer Hybridisierung zwischen diesen.

Der Hamilton-Operator für dieses System ist bei Vernachlässigung nicht resonanter Beiträge entsprechend Gl. (2.20) - (2.22)

$$H = \hbar\omega_1 a_1^\dagger a_1 + \hbar\omega_2 a_2^\dagger a_2 + \hbar\omega_{LO} \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} \left( b_{\mathbf{q}}^\dagger a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 b_{\mathbf{q}} \right) , \quad (4.33)$$

wobei der Index 1 den energetisch niedrigeren und 2 den höherenergetischen Zustand beschreibt. Dieses Modell ist analog zu dem aus der Quantenoptik bekannten Jaynes-Cummings Modell [17,24], das die Kopplung zweier atomarer Zustände durch ein einmodiges Photonen-Feld beschreibt, wobei hier allerdings mehrere Phononenmoden betrachtet werden. Da in dieser Arbeit dispersionslose Phononen behandelt werden, reicht es, statt der Anzahl der Phononen der einzelnen Moden, deren Gesamtanzahl  $N_{LO} = \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}}$  zu verwenden.

Betrachtet man nun ein Elektron im höherenergetischen Zustand ohne Phononen  $|0, a_2\rangle$  und ein Elektron im niederenergetischen Zustand mit einem Phonon  $|1, a_1\rangle$  als Funktion der Phononenenergie  $\hbar\omega_{LO}$  (gestrichelte Linien in Abb. (4.6)), ergibt sich in Resonanz ( $\hbar\omega_2 - \hbar\omega_1 = \hbar\omega_{LO}$ ) eine Entartung der beiden Zustände. Aufgrund der Kopplung zwischen diesen Zuständen kommt es zur Hybridisierung, also zur Bildung zweier neuer Zustände  $|1, \pm\rangle$  (durchgezogene Linien in Abb. (4.6)) aus den ursprünglichen. Dabei vermeiden die Hybridzustände eine Entartung, was als anti-crossing bezeichnet wird.

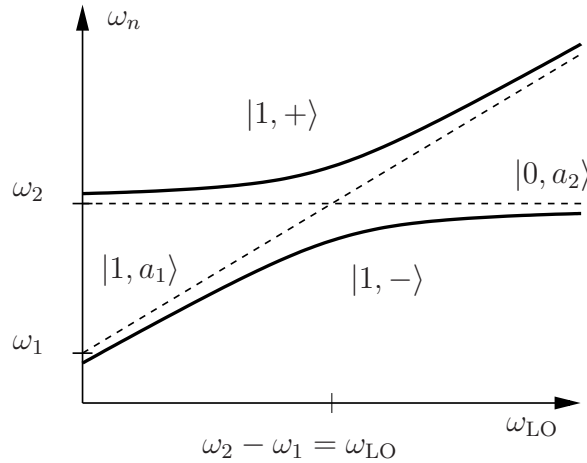


Abbildung 4.6: Qualitative Darstellung der Hybridisierung zweier wechselwirkender Zustände: Die unabhängigen Zustände  $|0, a_2\rangle$  und  $|1, a_1\rangle$  (gestrichelte Linien) gehen aufgrund der Wechselwirkung in die Hybridzustände  $|1, \pm\rangle$  (durchgezogene Linien) über.

Dies gilt für beliebige Phononenbesetzungen  $N_{LO}$ , so dass  $|N_{LO}, a_2\rangle$  und  $|N_{LO} + 1, a_1\rangle$  die Hybridzustände  $|N_{LO}, \pm\rangle$  bilden.

Durch eine Diagonalisierung des Hamilton-Operators [24] erhält man die Eigenfrequenzen der Hybridzustände  $|N_{LO}, \pm\rangle$ ,

$$\omega_{N_{LO}, \pm} = \frac{1}{2} \left[ \omega_1 + \omega_2 + (2N_{LO} + 1) \omega_{LO} \pm \sqrt{\delta^2 + \sum_{\mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 (2N_{LO} + 1)} \right], \quad (4.34)$$

wobei  $\delta = \omega_2 - \omega_1 - \omega_{LO}$  die Verstimmung gegenüber der Resonanz ist.

Wie aus Gl. (4.34) hervorgeht, hängt das Maß der Energieverschiebung gegenüber den freien Zuständen auch leicht von der Anzahl  $N_{LO}$  der Phononen im System ab,

so dass sich zwei Serien von Hybridzuständen bilden. Die ursprünglichen Zustände lassen sich nun als Linearkombination der Hybridzustände verstehen, so dass diese Anteile aller Hybridzustände beinhalten und damit in der Spektralfunktion auch Peaks bei allen zugehörigen Energien aufweisen.

## Nummerische Ergebnisse

Die numerischen Ergebnisse für die Spektralfunktionen in Abb. (4.7) zeigen sowohl deutlich die nach dem Independent Boson Model zu erwartende Aufspaltung, als auch Hybridisierung. Dabei ist die Aufspaltung deutlich stärker als in der Benetzungsschicht, so dass jeweils sechs bzw. sieben Peakstrukturen zu erkennen sind.

Die Doppelpeakstruktur lässt sich direkt auf die Hybridisierung zurückführen. Dabei sind allerdings nicht die einzelnen Peaks der Hybridzustände zu sehen, sondern die Serien der Hybridzustände, die jeweils einen der Peaks bewirken. Dass die einzelnen Peaks nicht aufgelöst werden können, ist zum Einen die Folge der Kopplung mit den quasikontinuierlichen Zuständen der Benetzungsschicht und zum Anderen der RPA-Näherung (3.65), die eine modellbedingte Verbreiterung der Peaks bewirkt. Auch ist hier gut zu erkennen, dass sich die Zustände aus den gleichen Hybridzuständen zusammensetzen, da jeweils s- und p-Schale bei gleichen Energien Peaks aufweisen.

Anhand der aufgetragenen Bandkante ( $k = 0$ ) der Benetzungsschicht ist auch gut die Wirkung der Quantenpunktzustände auf die Benetzungsschicht zu erkennen. So ist insbesondere die durch die Quantenpunktzustände beeinflusste Peakstruktur der Elektronen bei niedrigen Energien erkennbar. Für höhere Energien wird die Struktur erst bei größeren  $k$  sichtbar, da diese dort nicht mehr von dem Hauptpeak und den Phononrepliken überdeckt werden (s. Abb. (4.5)).

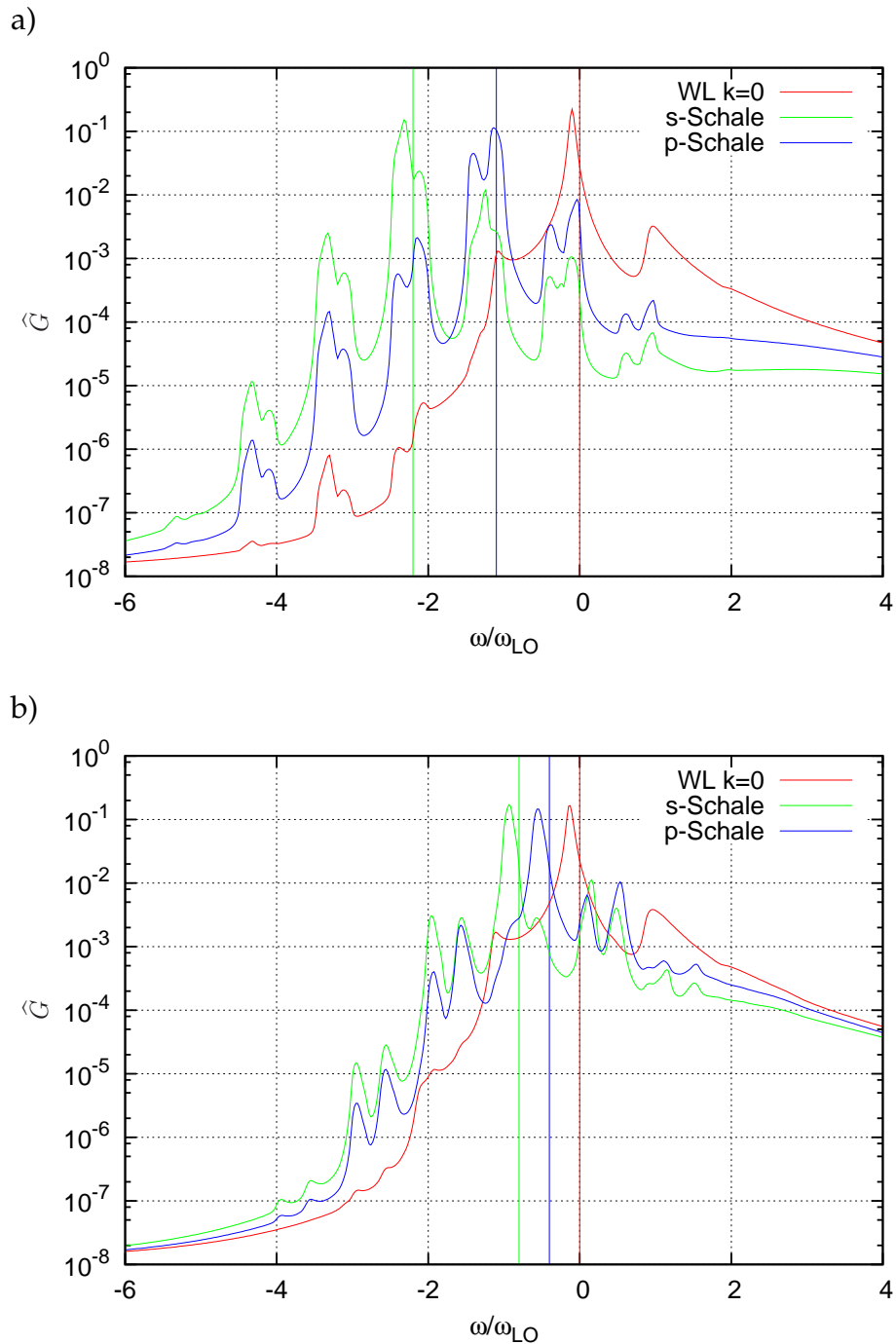


Abbildung 4.7: Polaronische Spektralfunktion für Elektronen (a) und Löcher (b) in den Quantenpunkten bei 300K: Zusätzlich zur s-Schale (grün) und p-Schale (blau) ist die Bandkante ( $k = 0$ ; rot) der Benetzungsschicht dargestellt. Die jeweilige freie Energie wird durch eine vertikale Linie angegeben.

# 5 Ladungsträgerkinetik

Mit den bekannten spektralen Eigenschaften lässt sich nun die Kinetik des Systems bestimmen. Ausgehend von den aus Kap. 3 bekannten Kadanoff-Baym-Gleichungen wird dazu eine quantenkinetische Beschreibung verwendet. Zunächst wird auf die optische Anregung der betrachteten Ladungsträger durch ein klassisches Lichtfeld eingegangen, die durch die Halbleiter-Bloch-Gleichungen beschrieben wird. Daraufhin wird die Relaxation von Ladungsträgern im Band der Benetzungsschicht und in die Quantenpunktzustände nach einer solchen optischen Anregung diskutiert.

## 5.1 Quantenkinetische Beschreibung

Gemäß der Kadanoff-Baym-Gleichung Gl. (3.72) gilt für die zeitliche Entwicklung des Propagators  $G^<$  und damit für die Besetzungen und Polarisationen

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(t_1) \right] G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t_1, t_2) = \sum_{\beta_3} \int dt_3 \left\{ \Sigma_{\alpha_1, \beta_3}^R(t_1, t_3) G_{\beta_3, \alpha_2}^<(t_3, t_2) + \Sigma_{\alpha_1, \beta_3}^<(t_1, t_3) G_{\beta_3, \alpha_2}^A(t_3, t_2) \right\}, \quad (5.1)$$

wobei hier entsprechend Kap. 3.4 abgesehen vom Band diagonale Zustände betrachtet werden. Die Indizes  $1, 2, 3 = c, v$  bezeichnen in Verbindung mit einem Zustand  $\alpha, \beta$  das Band des jeweiligen Zustands. Dementsprechend bezeichnen  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  den bis auf das Band gleichen Zustand.

Gemäß Gl. (4.15) ergibt sich für die Ableitung von  $G^<$  nach der Schwerpunktszeit  $t$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t, t) = i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2} \right] G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t, t). \quad (5.2)$$

Aus Gl. (5.1) folgt so zusammen mit der analogen Bewegungsgleichung für  $t_2$  bei Vernachlässigung der den Zustand betreffend nicht-diagonalen Green's Funktionen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t, t) = \sum_3 \int_{-\infty}^t dt' \left\{ \Sigma_{\alpha_1, \alpha_3}^>(t, t') G_{\alpha_3, \alpha_2}^<(t', t) - \Sigma_{\alpha_1, \alpha_3}^<(t, t') G_{\alpha_3, \alpha_2}^>(t', t) - G_{\alpha_1, \alpha_3}^>(t, t') \Sigma_{\alpha_3, \alpha_2}^<(t', t) + G_{\alpha_1, \alpha_3}^<(t, t') \Sigma_{\alpha_3, \alpha_2}^>(t', t) \right\}, \quad (5.3)$$

wobei hier nach dem GKBA (3.75) mit  $t > t'$  für die Selbstenergie

$$\Sigma_{\alpha_1, \alpha_2}^{\lessgtr}(t, t') = i\hbar \sum_{\beta, 3} G_{\beta_1, \beta_3}^R(t, t') G_{\beta_3, \beta_2}^{\lessgtr}(t') D_{\alpha, \beta}^{\gtrless}(t', t), \quad (5.4)$$

$$\Sigma_{\alpha_1, \alpha_2}^{\lessgtr}(t', t) = -i\hbar \sum_{\beta, 3} G_{\beta_1, \beta_3}^{\lessgtr}(t') G_{\beta_3, \beta_2}^A(t', t) D_{\alpha, \beta}^{\gtrless}(t, t') \quad (5.5)$$

gilt. Dabei wird für die zeitlich diagonalen Propagatoren die Kurzschreibweise  $G^{\lessgtr}(t) = G^{\lessgtr}(t, t)$  verwendet.

## Besetzungsstreuung

Um die Besetzungsstreuung zu erhalten, wird die Zeitentwicklung der bezüglich des Bandes diagonalen Propagatoren ( $1 = 2$ ) bestimmt. Dabei folgt durch Nichtberücksichtigung der dem Zustand und Band betreffend nicht-diagonalen retardierten und avancierten Green's Funktionen sowie der bis auf das Band nicht-diagonalen Propagatoren und erneuter Anwendung des GKBA

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha_1}^<(t) &= 2i\hbar \Re \sum_{\beta} \int_{-\infty}^t dt' G_{\beta_1}^R(t, t') G_{\alpha_1}^A(t', t) \\ &\quad * \left\{ G_{\alpha_1}^>(t') G_{\beta_1}^<(t') D_{\alpha, \beta}^>(t', t) - G_{\alpha_1}^<(t') G_{\beta_1}^>(t') D_{\alpha, \beta}^<(t', t) \right. \\ &\quad \left. + G_{\alpha_3, \alpha_1}^>(t') G_{\beta_1, \beta_3}^<(t') D_{\alpha, \beta}^>(t', t) - G_{\alpha_3, \alpha_1}^<(t') G_{\beta_1, \beta_3}^>(t') D_{\alpha, \beta}^<(t', t) \right\}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

wobei  $3 \neq 1$ .

Mit Gl. (3.17), (3.18), (3.19) und (3.24) folgt im Elektron-Loch-Bild

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha_1}(t) &= 2\Re \sum_{\beta} \int_{-\infty}^t dt' G_{\beta_1}^R(t - t') [G_{\alpha_1}^R(t - t')]^* \\ &\quad * \left\{ [f_{\beta_1} (1 - f_{\alpha_1}) - \Psi_{\alpha} \Psi_{\beta}^*]_{t'} D_{\alpha, \beta}^>(t', t) \right. \\ &\quad \left. - [f_{\alpha_1} (1 - f_{\beta_1}) - \Psi_{\alpha} \Psi_{\beta}^*]_{t'} D_{\alpha, \beta}^<(t', t) \right\}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Entsprechend dem Vorzeichen beschreibt der erste Term die Einstreuung in den Zustand  $\alpha$  aus den Zuständen  $\beta$  und der zweite Term die Ausstreuung. Durch Summation über  $\beta$  wird so jede Möglichkeit der betrachteten Streuung für  $\alpha$  erfasst. Die Streuraten sind jeweils zur Besetzung des Ausgangszustands und zur Nichtbesetzung des Endzustands proportional. Letzteres ist eine Folge des Pauli-Prinzips, demzufolge ein fermionischer Zustand maximal durch ein Fermion besetzt sein kann, so dass die Besetzung eines Zustands die Möglichkeit der Einstreuung in diesen Zustand reduziert.

Dabei ist die Energieerhaltung implizit über die retardierten Green's Funktionen  $G^R$  und den Phononenpropagatoren  $D^{\lessgtr}$  in dieser Gleichung gegeben. Betrachtet man

zunächst freie retardierte Green's Funktionen, die mit der freien Energie des betreffenden Zustands oszillieren, erhält man zusammen mit den Phononenpropagatoren, die mit einer Phononenergie oszillieren, in Markovnäherung  $f(t') = f(t)$  durch die Zeitintegration eine  $\delta$ -Funktion, durch die strikte Energieerhaltung  $\epsilon_{\alpha_1} - \epsilon_{\beta_1} = \pm \hbar \omega_{LO}$  gegeben ist. Ohne Markovnäherung kommt es aufgrund der sich mit der Zeit ändernden Besetzungen und Polarisierungen zu einer Aufweichung der Energieerhaltung.

Für wechselwirkende Teilchen ändert sich dies. Aus dem vorhergehenden Kapitel ist bekannt, dass man für einen Zustand nicht mehr eine Energie, sondern eine Spektralfunktion erhält (s. Abb. (4.7) und (4.5)), die eine Energieverteilung des Zustands beschreibt. Dementsprechend erhält man keine  $\delta$ -förmige Energieerhaltung, sondern eine Übergangswahrscheinlichkeit, die zum um eine Phononenergie verschobenen Überlapp der Spektralfunktionen proportional ist.

Die Impulserhaltung wird direkt über die in den Phononenpropagatoren inbegriffenen Matrixelemente gewährleistet.

Für die freien retardierten Green's Funktionen entspricht dies der Boltzmann-Streuung (s. Kap. B).

## Dephasieren der optischen Polarisationen

Zur Bestimmung der Dephasierung (dephasing) wird analog zur Besetzungsstreuung vorgegangen, wobei allerdings die bis auf das Band diagonalen Propagatoren ( $1 \neq 2$ ) in Gl. (5.3) betrachtet werden, welche gerade der Polarisation entsprechen. Aus Gl. (5.3) folgt so

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t) = i\hbar \sum_{\beta} \int_{-\infty}^t dt' & \\ & G_{\beta_1}^R(t, t') G_{\alpha_2}^A(t', t) \left\{ G_{\beta_1, \beta_2}^<(t') [G_{\alpha_2}^<(t') D_{\alpha, \beta}^<(t', t) + G_{\alpha_2}^>(t') D_{\alpha, \beta}^>(t', t)] \right. \\ & \quad \left. - G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t') [G_{\beta_1}^>(t') D_{\alpha, \beta}^<(t', t) + G_{\beta_1}^<(t') D_{\alpha, \beta}^>(t', t)] \right\} \\ & + G_{\alpha_1}^R(t, t') G_{\beta_2}^A(t', t) \left\{ G_{\beta_1, \beta_2}^<(t') [G_{\alpha_1}^<(t') D_{\alpha, \beta}^<(t', t) + G_{\alpha_1}^>(t') D_{\alpha, \beta}^>(t', t)] \right. \\ & \quad \left. - G_{\alpha_1, \alpha_2}^<(t') [G_{\beta_2}^>(t') D_{\alpha, \beta}^<(t', t) + G_{\beta_2}^<(t') D_{\alpha, \beta}^>(t', t)] \right\}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Unter Verwendung von Gl. (3.17), (3.18) und (3.19) erhält man im Elektron-Loch-

Bild

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\alpha}(t) = \sum_{\beta} \sum_{1 \neq 2} \int_{-\infty}^t dt' G_{\alpha_2}^R(t-t') G_{\beta_1}^R(t-t') \Big\{ [\Psi_{\alpha} f_{\beta_1} - \Psi_{\beta} f_{\alpha_2}]_{t'} D_{\alpha,\beta}^{<}(t, t') \\ + [\Psi_{\alpha} (1 - f_{\beta_1}) - \Psi_{\beta} (1 - f_{\alpha_2})]_{t'} D_{\alpha,\beta}^{>}(t, t') \Big\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Man kann hier zwischen dem diagonalen Dephasing und dem nicht-diagonalen Dephasing unterscheiden. Dabei bewirkt das diagonale Dephasing, also die Streuung, die proportional der Polarisation des betrachteten Zustandes ist, ein exponentielles Abklingen der Polarisation. Dagegen führt das nicht-diagonale Dephasing, also die zu den Polarisationen anderer Zustände proportionale Streuung, zu einem Anstieg der Polarisation, so dass das diagonale Dephasing durch das nicht-diagonale Dephasing teilweise kompensiert wird. Durch das nicht-diagonale Dephasing mischen sich die Polarisationen verschiedener Zustände.

## 5.2 Optische Anregung

Die Erzeugung der betrachteten Ladungsträgerverteilung soll durch einen optischen Puls über die Dipol-Wechselwirkung erfolgen. Dazu werden die im Folgenden hergeleiteten Halbleiter-Bloch-Gleichungen genutzt, welche die zeitliche Entwicklung von Ladungsträgern in einem Halbleiter unter Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung und der Dipol-Wechselwirkung mit einem klassischen externen elektromagnetischen Feld beschreiben. Dabei wird hier, anders als zuvor bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung, nicht mit Green's Funktionen, sondern mit einer Faktorisierungsnäherung gearbeitet. Eine Herleitung mittels Green's Funktionen ist in [15] zu finden.

Aus den Bewegungsgleichungen der Vernichtungsoperatoren

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_{\alpha} |_e = -E_{\alpha}^c c_{\alpha}, \quad (5.10)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_{\alpha} |_{coul} = -\frac{1}{V} \sum_{\alpha' \beta \beta' \mathbf{q}} v_{\alpha \alpha' \beta \beta'}(\mathbf{q}) \left[ c_{\beta}^{\dagger} c_{\beta'} c_{\alpha'} + v_{\beta}^{\dagger} v_{\beta'} c_{\alpha'} \right], \quad (5.11)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} c_{\alpha} |_D = \mathbf{d} \mathbf{E} v_{\alpha}, \quad (5.12)$$

und Erzeugungsoperatoren (s. auch Kap. 2.2) folgt für die betrachteten Wechselwir-



kungen

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\Psi_\alpha &= \left\langle \frac{dv_\alpha^\dagger}{dt}c_\alpha \right\rangle + \left\langle v_\alpha^\dagger \frac{dc_\alpha}{dt} \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} (E_\alpha^v - E_\alpha^c) \Psi_\alpha \\
 &\quad + \frac{i}{\hbar} \mathbf{dE} (f_\alpha^v - f_\alpha^c) \\
 &\quad + \frac{i}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\alpha'\beta\beta'\mathbf{q}} v_{\alpha\alpha'\beta\beta'}(\mathbf{q}) \left\{ - \left\langle v_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_{\beta'} c_{\alpha'} \right\rangle + \left\langle v_\alpha^\dagger v_{\beta'}^\dagger v_\beta c_\alpha \right\rangle \right. \\
 &\quad \left. - \left\langle v_\alpha^\dagger v_\beta^\dagger v_{\beta'} c_{\alpha'} \right\rangle + \left\langle v_\alpha^\dagger c_{\beta'}^\dagger c_\beta c_\alpha \right\rangle \right\}
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

und

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}f_\alpha^c &= \left\langle \frac{dc_\alpha^\dagger}{dt}c_\alpha \right\rangle + \left\langle c_\alpha^\dagger \frac{d}{dt}c_\alpha \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} (\mathbf{dE}\psi_\alpha^* - \mathbf{d}^* \mathbf{E}\Psi_\alpha) \\
 &\quad + \frac{i}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\alpha'\beta\beta'\mathbf{q}} v_{\alpha\alpha'\beta\beta'}(\mathbf{q}) \left\{ \left\langle c_{\alpha'}^\dagger c_{\beta'}^\dagger c_\beta c_\alpha \right\rangle + \left\langle c_{\alpha'}^\dagger v_{\beta'}^\dagger v_\beta c_\alpha \right\rangle \right. \\
 &\quad \left. - \left\langle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_{\beta'} c_{\alpha'} \right\rangle - \left\langle c_\alpha^\dagger v_\beta^\dagger v_{\beta'} c_{\alpha'} \right\rangle \right\}
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

mit

$$\frac{d}{dt}f_\alpha^v = -\frac{d}{dt}f_\alpha^c. \tag{5.15}$$

Die Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte von zwei Operatoren  $\Psi_\alpha, f_\alpha^{v,c}$  liefern also durch die Coulomb-Wechselwirkung Erwartungswerte von vier Operatoren, deren Bewegungsgleichungen Erwartungswerte von sechs Operatoren beinhalten und so weiter. Eine Möglichkeit mit dem Hierarchieproblem umzugehen ist, das Gleichungssystem auf dieser Ebene von vier Operatoren abzuschließen, indem man faktorisiert. Die Näherung besteht dabei darin, Erwartungswerte von vier Operatoren so in Produkte von Erwartungswerten von jeweils zwei Operatoren zu zerlegen, dass nur makroskopische Erwartungswerte entstehen, also Besetzungen und Polarisationen. Andere Kombinationen von Operatoren werden nicht berücksichtigt, weil deren Erwartungswerte klein gegenüber den Berücksichtigten sind. Dies wird als Hartree-Fock-Faktorisierung bezeichnet.

So erhält man die Halbleiter-Bloch-Gleichungen

$$i\hbar \frac{d}{dt}\Psi_\alpha = (\epsilon_\alpha^e + \epsilon_\alpha^h) \Psi_\alpha - (1 - f_\alpha^e - f_\alpha^h) \Omega_\alpha, \tag{5.16}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}f_\alpha^{e,h} = \Omega_\alpha^* \Psi_\alpha - \Omega_\alpha \Psi_\alpha^*, \tag{5.17}$$

die hier im Elektron-Loch-Bild angegeben sind. Dabei gilt für die verallgemeinerte Rabi-Energie  $\Omega_\alpha$  und die durch die Coulomb-Wechselwirkung renormierte Einteilchenenergie  $\epsilon_\alpha^{e,h}$

$$\epsilon_\alpha^{e,h} = E_\alpha^{e,h} - \frac{1}{V} \sum_{\beta, \mathbf{q}} v_{\alpha\beta\beta\alpha}(\mathbf{q}) f_\beta^{e,h}, \quad (5.18)$$

$$\Omega_\alpha = d\mathbf{E} + \frac{1}{V} \sum_{\beta, \mathbf{q}} v_{\alpha\beta\beta\alpha}(\mathbf{q}) \Psi_\beta. \quad (5.19)$$

## Rotierendes Bild

Für eine optische Anregung wird zur Überwindung der Bandlücke ein schnell oszillierendes  $\mathbf{E}$ -Feld benötigt, was eine sehr hohe Zeitauflösung für die Numerik voraussetzt. Um dies zu umgehen, kann man auf ein rotierendes Bild zurückgreifen, in dem nicht direkt mit  $\mathbf{E}$ ,  $\Omega$  und  $\Psi$  gerechnet wird, sondern man die Frequenz  $\omega$  des externen Feldes von diesen abspaltet,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(t) &= \tilde{\mathbf{E}}(t) e^{-i\omega t}, \\ \Omega(t) &= \tilde{\Omega}(t) e^{-i\omega t}, \\ \Psi(t) &= \tilde{\Psi}(t) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

so dass man mit Größen rechnen kann, die sich nur relativ langsam verändern. In diesem Bild haben die Halbleiter-Bloch-Gleichungen die Form

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}_\alpha = (\epsilon_\alpha^e + \epsilon_\alpha^h - \hbar\omega) \tilde{\Psi}_\alpha - (1 - f_\alpha^e - f_\alpha^h) \tilde{\Omega}_\alpha, \quad (5.21)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_\alpha^{e,h} = \tilde{\Omega}_\alpha^* \tilde{\Psi}_\alpha - \tilde{\Omega}_\alpha \tilde{\Psi}_\alpha^*. \quad (5.22)$$

## Exzitonen

In den Halbleiter-Bloch-Gleichungen (5.16)-(5.19) ist die Wannier-Gleichung, die Schrödinger-Gleichung des Exzitons, bereits enthalten. Diese erhält man für ein unangeregtes System  $f_\alpha^{e,h} = 0$ , wenn nur in  $\mathbf{E}$  lineare Terme berücksichtigt werden

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi_\alpha - (\epsilon_\alpha^e + \epsilon_\alpha^h) \Psi_\alpha = -d\mathbf{E} - \frac{1}{V} \sum_{\beta, \mathbf{q}} v_{\alpha\beta\beta\alpha}(\mathbf{q}) \Psi_\beta, \quad (5.23)$$

durch mehrere Umformungen [11]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - V(\mathbf{r}) \right] \Psi_n(\mathbf{r}) = E_n \Psi_n(\mathbf{r}). \quad (5.24)$$

Die Wannier-Gleichung beschreibt die Relativbewegung eines Elektrons und eines Lochs mit reduzierter Masse  $\mu$  unter Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung. Analog zum Wasserstoff-Atom kommt es zur Bildung diskreter Zustände, die als Exzitonen bezeichnet werden; für den rein zwei-dimensionalen Fall liegen deren Energien bei

$$E_n = -\frac{E_B}{(1/2 + n)^2} \quad (5.25)$$

mit der drei-dimensionalen exzitonischen Grundzustandsenergie  $E_B$  und der Quantenzahl  $n = 0, 1, 2, \dots$

## Optische Eigenschaften

Neben den Exzitonen kommt es durch die Renormierungen (5.18) und (5.19) durch die Coulomb-Wechselwirkung auch zu Veränderungen der optischen Eigenschaften bei den anderen Zuständen, wie anhand des Absorptionsspektrums des Systems sichtbar wird.

Um das Absorptionsspektrum des Systems zu erhalten, reicht es die Suszeptibilität  $\chi(\omega)$  zu bestimmen, deren Imaginärteil die Absorption darstellt. Die Suszeptibilität

$$\chi(\omega) = \frac{\mathbf{P}(\omega)}{\mathbf{E}(\omega)} \quad (5.26)$$

und somit die Absorption können über das vorgegebene externe elektrische Feld  $\mathbf{E}$  und die dadurch erzeugte Polarisation  $\mathbf{P} = 2\Re \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}$  bestimmt werden. Durch einen hinreichend kurzen und daher spektral breiten Puls kann das System über einen großen Bereich angeregt werden und damit auch die Suszeptibilität über einen großen spektralen Bereich bestimmt werden.

Abb. (5.1) zeigt das so erhaltene Absorptionsspektrum. Gegenüber dem Fall ohne Coulomb-Wechselwirkung

$$\epsilon_{\alpha}^{e,h} = E_{\alpha}^{e,h} , \quad (5.27)$$

$$\Omega_{\alpha} = d\mathbf{E} , \quad (5.28)$$

bei dem neben den Quantenpunktniveaus nur noch das Band der Benetzungsschichtzustände vorhanden ist, erhält man durch die Coulomb-Wechselwirkung gebundene Benetzungsschicht-Exzitonen und eine deutliche Verschiebung der Quantenpunktübergänge.

So sind knapp unterhalb der Bandkante zwei Peaks zu erkennen, die dem exzitonischen Grundzustand  $(-3, 2E_B)$  und dem ersten angeregten Zustand  $(-0, 4E_B)$  zugeordnet werden können. Diese Werte weichen wegen der endlichen Benetzungsschichtdicke leicht von denen für den rein zwei-dimensionalen Fall ab, bei dem sich für die beiden niedrigsten exzitonischen Energieniveaus gemäß Gl. (5.25)  $-4E_B$  und  $-4/9E_B$  ergeben.

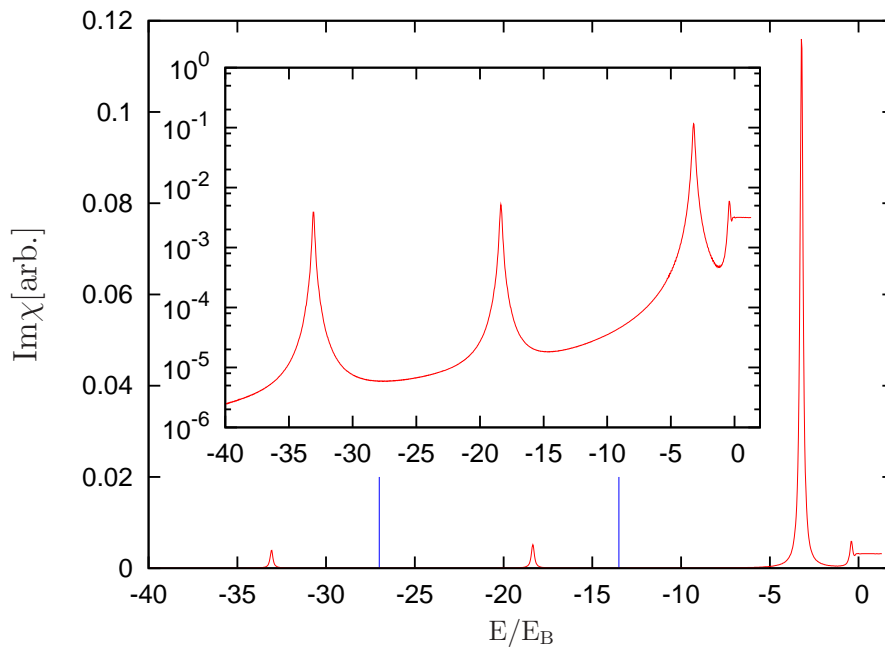


Abbildung 5.1: Durch die Coulomb-Wechselwirkung renormiertes Absorptionsspektrum des Systems: Die Interbandübergänge zwischen den Quantenzuständen sind die beiden niederenergetischen Peaks, deren freie Energien durch die blauen Linien dargestellt sind. Die Peaks knapp unterhalb der Bandkante ( $E = 0$ ) stellen den Grundzustand und ersten angeregten Zustand der zweidimensionalen Benetzungsschicht-Exzitonen dar. Der konstante Verlauf oberhalb der Bandkante ergibt sich durch das zweidimensionale Band der Benetzungsschicht. Inset: Selbiges logarithmisch aufgetragen.

Die Quantenpunktübergänge liegen bei  $33E_B$  für die s-Schale und  $18,5E_B$  bei der p-Schale entgegen  $27E_B$  und  $13,5E_B$  ohne Coulomb-Wechselwirkung. Diese starke Verschiebung ist eine Folge der starken Kopplung der lokalisierten Quantenzustände, die entsprechend große Matrixelemente und damit eine entsprechend große Renormierung in den Halbleiter-Bloch-Gleichungen bewirken.

### 5.3 Relaxation

Bei der Kinetik ist insbesondere das Relaxationsverhalten interessant. Dabei soll betrachtet werden, wie eine durch einen optischen Puls im Band der Benetzungsschicht erzeugte Ladungsträgerverteilung im Band relaxiert, in die Quantenpunkte eingefangen wird und in diesen weiter relaxiert. Diese Vorgänge zeigt Abb. (5.2) schematisch.

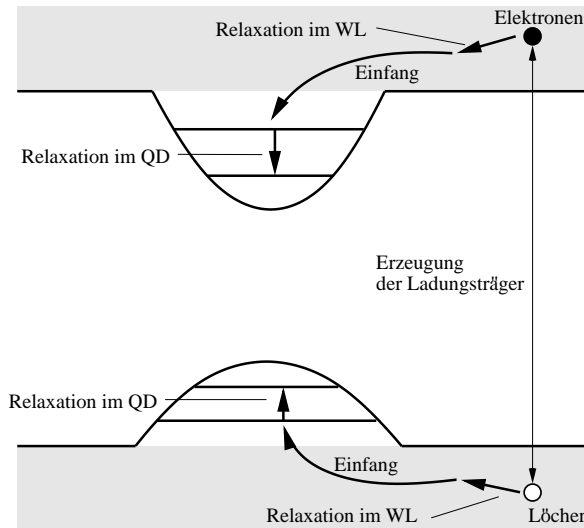


Abbildung 5.2: Ablauf der Relaxation: Durch eine optische Anregung werden sowohl Elektronen als auch Löcher im Band der Benetzungsschicht (WL) erzeugt. Diese relaxieren im Band und werden in die Quantenpunkte (QD) eingefangen.

## Nummerische Ergebnisse

Es wird durch einen optischen, gaussförmigen Puls eine Ladungsträgerverteilung im Band der Benetzungsschicht mittels der Halbleiter-Bloch-Gleichungen (5.16) bis (5.19) erzeugt, um deren anschließende Relaxation durch die Elektron-Phonon-Streuung (Gl. (5.7) und (5.9)) zu untersuchen.

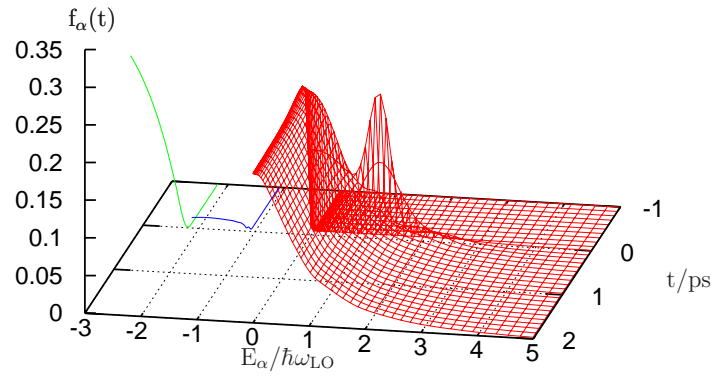
Der zeitliche Verlauf der Relaxation bei 300K nach einer optischen Anregung mittels eines gaussförmigen Pulses bei  $t = 0$  und  $\hbar\omega = E_G + 1,5\hbar\omega_{LO}$  mit einer Halbwertsbreite von 500fs ist in Abb. (5.3) dargestellt, wobei Abb. (5.3a) die Besetzung der Elektronen und Abb. (5.3b) die der Löcher angibt. Aufgetragen ist die Besetzung  $f_\alpha(t)$  als Funktion der Zeit  $t$  und der freien Energie  $E$  der Zustände  $\alpha$ .

## Einfang in die Quantenpunktzustände

Während die Löcher mit ähnlicher Rate in die Quantenpunktzustände eingefangen werden, wie sie in der Benetzungsschicht relaxieren und sich innerhalb einer ps eine dem Gleichgewicht ähnliche Verteilung einstellt, ist dies bei den Elektronen deutlich verlangsamt, so dass die Besetzungen der Quantenpunktzustände auch noch nach mehreren ps deutlich zunehmen.

Dies kann dadurch erklärt werden, dass die freien Energien der Quantenpunktzustände der Löcher  $0,4\hbar\omega_{LO}$  und  $0,8\hbar\omega_{LO}$  unterhalb der Bandkante liegen, so dass in dem Bereich eine Phononenergie  $\hbar\omega_{LO}$  oberhalb des Hauptpeaks der Spektralfunktion eine große Zustandsdichte vorhanden ist, so dass die Löcher aus den betreffenden Benetzungsschichtzuständen problemlos in die Quantenpunktzustände

a)



b)

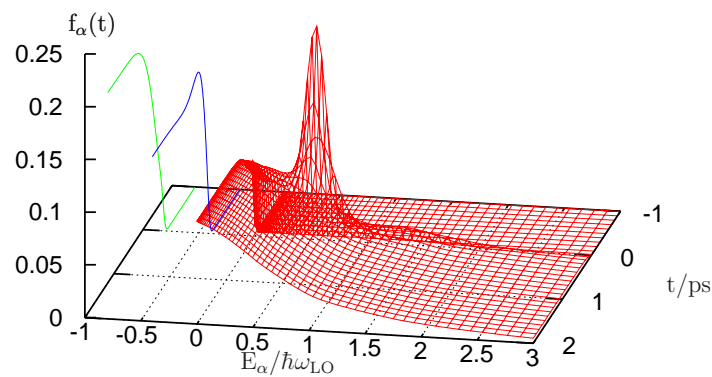


Abbildung 5.3: Relaxation der Elektronen (a) und Löcher (b) nach Anregung im Band (rot) in die p-Schale (blau) und s-Schale (grün) der Quantenpunkte bei 300K

gestreut werden können. Dagegen liegen die freien Energien der Quantenpunktzustände der Elektronen  $1, \hbar\omega_{LO}$  und  $2, 2\hbar\omega_{LO}$  unterhalb der Bandkante. Dementsprechend liegt in dem Bereich eine Phononenergie  $\hbar\omega_{LO}$  oberhalb des Hauptpeaks der p-Schale, also etwa  $0,1\hbar\omega_{LO}$  unterhalb der Bandkante, nur eine kleine Zustandsdichte (s. Spektralfunktionen Abb. (4.7) und (4.5)) und somit nur eine relativ geringe Streuung von den Benetzungsschichtzuständen in die p-Schale vor. Ferner ist

anders als bei den Löchern ein direkter Einfang aus der Benetzungsschicht in die s-Schale aufgrund der großen Energiedifferenz, zu deren Überwindung Mehrphonenprozesse notwendig sind, nur sehr schwach vorhanden. So findet im Wesentlichen nur Einstreuung aus der p-Schale statt, die allerdings durch die Spektralfunktionen der Quantenpunktzustände, die aufgrund der Hybridisierung einen recht großen Überlapp haben, sehr schnell geschieht. So nimmt die s-Schalen-Besetzung deutlich schneller zu als die der p-Schale.

Würde man von den freien Zuständen mit einer  $\delta$ -förmigen Energieerhaltung ausgehen, wäre für die Elektronen aufgrund der unpassenden Energiedifferenzen keine Streuung mit den Quantenpunktzuständen möglich. Dies wird als Flaschenhalsverhalten bezeichnet. Wegen der Polaroneneigenschaften sind die wechselwirkenden Zustände allerdings dermaßen energetisch unbestimmt, dass ungeachtet der Energiedifferenzen der freien Zustände und der Hauptpeaks der polaronischen Spektralfunktionen dennoch Streuung stattfindet, die allerdings gegenüber den Löchern schwächer ist.

## Gleichgewicht in einem wechselwirkenden System

Während die Gleichgewichtsbesetzung von freien Zuständen durch die Fermiverteilung

$$F(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega - \mu}{k_b T}} + 1} \quad (5.29)$$

mit der Temperatur  $T$ , der Boltzmannkonstante  $k_b$  und dem chemischen Potential  $\mu$  gegeben ist, wird das Gleichgewicht in einem wechselwirkenden System über das Fluktuations-Dissipations-Theorem (auch Kubo-Martin-Schwinger-Relation)

$$f_\alpha = \int d\omega F(\omega) \hat{G}_\alpha(\omega) \quad (5.30)$$

bestimmt [9]. Nach diesem ergibt sich die Gleichgewichtsverteilung aus dem Überlapp der Fermiverteilung  $F$  und der Spektralfunktion  $\hat{G}$  im Frequenzraum. Also entspricht die Gleichgewichtsverteilung den mit der Spektralfunktion gewichteten Fermibesetzungen aller Energien. Für die Spektralfunktion eines freien Teilchens  $\hat{G}_\alpha(\omega) \propto \delta(\omega - \omega_\alpha)$  entspricht dies gerade wieder einer Fermiverteilung.

Für die numerische Berechnung einer Gleichgewichtsbesetzung bietet es sich an, im Zeitraum und nicht im Frequenzraum zu arbeiten. Nach [22] erhält man dann

$$f_\alpha = \int_0^\infty dt \frac{h(t)}{t} 2\Im \left[ e^{-\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - \mu)t} G_\alpha^R(t) \right] + \frac{1}{2} \quad (5.31)$$

mit

$$h(\omega) = -\frac{\partial}{\partial \omega} F\left(\omega + \frac{\mu}{\hbar}\right) . \quad (5.32)$$

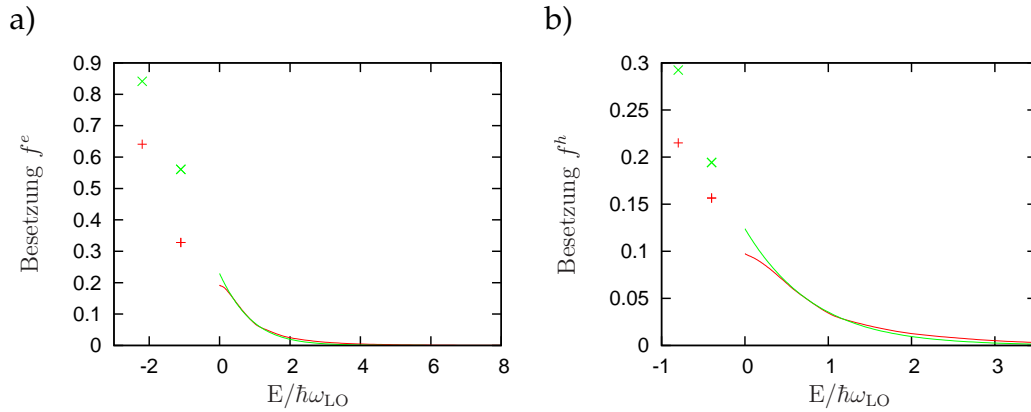


Abbildung 5.4: Besetzung nach 10ps für Elektronen (a) und Löcher (b): Neben der Besetzung (rot) ist der Gleichgewichtszustand nach Fluktuations-Dissipations-Theorem (grün) aufgetragen. Diesem liegt eine Ladungsträgerdichte von  $2,34 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$  und eine Temperatur von 300K zugrunde.

Der Gleichgewichtszustand nach Fluktuations-Dissipations-Theorem für die hier vorgefundene Ladungsträgerdichte von  $2,34 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$  und die Temperatur des Phononenbades von 300K ist in Abb. (5.4) als Funktion der Energie  $E$  der Zustände dargestellt (grün). Daneben ist der stationäre Zustand der kinetischen Rechnung aufgetragen (rot). Für die Benetzungsschicht stimmt die kinetische Rechnung mit dem Fluktuations-Dissipations-Theorem relativ gut überein. Bei der kinetischen Rechnung ist allerdings ein Aufheizen zu erkennen. So sind die Besetzungen gegenüber dem Fluktuations-Dissipations-Theorem bei den niederenergetischen Zuständen kleiner und bei den höherenergetischen größer. Dies wird insbesondere an der Bandkante deutlich, deren Besetzung bei der kinetischen Rechnung deutlich kleiner ist. Noch stärker unterscheiden sich die Besetzungen der Quantenpunkte, die entsprechend dem Aufheizen deutlich unterhalb des Gleichgewichtszustands nach Fluktuations-Dissipations-Theorem liegen.



## 6 Rabi-Oszillationen unter dem Einfluss der Elektron-Phonon-Streuung

Rabi-Oszillationen sind durch optische Anregung erzeugte Besetzungs-Oszillationen. Im kohärenten Regime führen resonante Anregungen zu einer Oszillation, die alle Besetzungen umfasst und über die Pulsstärke bestimmt ist. Ein kohärentes Regime liegt z.B. in einem nicht wechselwirkenden Zwei-Niveau-System vor, in dem sich diese Oszillationen durch die optischen Bloch-Gleichungen beschreiben lassen. Dies ermöglicht, durch Pulse mit definierter Pulsfläche definierte Besetzungssituation zu erzeugen.

Betrachtet man allerdings kein Zwei-Niveau-System, sondern eine Halbleiterstruktur mit mehreren wechselwirkenden Zuständen, liegt aufgrund des Dephasings und der Besetzungsstreuung ein inkohärentes Regime vor, so dass dies nur noch eingeschränkt der Fall ist. Im Folgenden wird untersucht, wie die Rabi-Oszillationen hierdurch gedämpft werden. Dazu werden, nachdem die Rabi-Oszillationen in einem Zwei-Niveau-System erläutert wurden, die Wirkungen des Dephasings und der Besetzungsstreuung auf diese vorgestellt und anhand von numerischen Berechnungen diskutiert.

### 6.1 Rabi-Oszillationen

Die optische Anregung eines Zwei-Niveaue-Systems  $\alpha$  wird durch die optischen Bloch-Gleichungen

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi_\alpha = (E_\alpha^e + E_\alpha^h) \Psi_\alpha - (1 - f_\alpha^e - f_\alpha^h) \mathbf{dE}, \quad (6.1)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_\alpha^{e,h} = \mathbf{dE}^* \Psi_\alpha - \mathbf{dE} \Psi_\alpha^* \quad (6.2)$$

beschrieben. Die zuvor eingeführten Halbleiter-Bloch-Gleichungen (5.16)-(5.19) sind eine Erweiterung dieser, welche zusätzlich die Coulomb-Wechselwirkung auf Hartree-Fock-Niveau beinhaltet. Entgegen den Halbleiter-Bloch-Gleichungen kommt es hier nicht zu einer Kopplung von verschiedenen Zuständen  $\alpha$ .

Für ein isoliertes Zwei-Niveau-System  $\alpha$  können Besetzungen  $f$  und Polarisation  $\Psi$

im Bloch-Vektor

$$\mathbf{U}_\alpha = \begin{pmatrix} 2\Re\Psi_\alpha \\ 2\Im\Psi_\alpha \\ f_\alpha^e + f_\alpha^h - 1 \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

zusammengefasst werden. Dabei ist die Inversion  $f_\alpha^e + f_\alpha^h - 1$  durch  $f_\alpha^e = f_\alpha^h$  eindeutig mit den Besetzungen verknüpft.

Mit dem Bloch-Vektor können die Optischen-Bloch-Gleichungen (5.21) und (5.22) in Vektorform

$$\frac{d\mathbf{U}_\alpha}{dt} = \Omega_R \times \mathbf{U}_\alpha \quad (6.4)$$

geschrieben werden, wobei

$$\Omega_R = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} -d\mathbf{E} \\ 0 \\ E_\alpha^e + E_\alpha^h - \hbar\omega \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Dies stellt eine Rotation von  $\mathbf{U}_\alpha$  mit der Winkelgeschwindigkeit  $\Omega_R$  dar.

Für eine resonante Anregung ist  $E_\alpha^e + E_\alpha^h - \hbar\omega = 0$ , so dass sich  $\mathbf{U}_\alpha$  mit  $-d\mathbf{E}/\hbar$  um die x-Achse dreht, also Inversion und Imaginärteil der Polarisierung oszillieren. Diese Oszillationen werden als Rabi-Oszillationen bezeichnet. Dabei wird die Rotation des Bloch-Vektors von der durch  $\mathbf{E}(t)$  beschriebenen Pulsfläche

$$P = \int dt \frac{d\mathbf{E}(t)}{\hbar} \quad (6.6)$$

bestimmt.

Geht man von einem unangeregten System aus ( $\Psi = 0$ ,  $f = 0$ ,  $U = (0, 0, -1)$ ) und gibt einen  $\pi$ -Puls auf das System, der eine Rotation des Bloch-Vektors um  $P = \pi$  bewirkt, geht das unangeregte System in ein vollständig angeregtes System über ( $U = (0, 0, 1)$ ). Ein erneuter  $\pi$ -Puls bringt das System wieder in den Grundzustand. Einen  $2\pi$ -Puls, bei dem das unangeregte System zuerst in ein vollständig angeregtes System und dann wieder in den Grundzustand übergeht, nennt man einen Rabi-Flop. Siehe hierzu auch [10].

## Coulomb-Renormierungen

Um nun von einem Zwei-Niveau-System zu einem wechselwirkenden System überzugehen, werden in einem ersten Schritt die durch die Coulomb-Wechselwirkung verursachte Energie-Renormierung der elektronischen Zustände und des Pulses erfasst. Dazu werden die Optischen-Bloch-Gleichungen durch die Halbleiter-Bloch-Gleichungen ersetzt, in die die Coulomb-Wechselwirkung in Form der Renormierungen (5.18)-(5.19) eingeht. Dadurch wird die Winkelgeschwindigkeit  $\Omega_R$  gegenüber den Optischen-Bloch-Gleichungen verändert. Die Renormierung der Rabi-

Energie (5.19) bewirkt eine schnellere Drehung des Bloch-Vektors, so dass der für einen Rabi-Flop notwendige Puls kleiner ist als ohne Coulomb-Wechselwirkung. Im Folgenden beziehen sich die Angaben der Pulsstärken auf die renormierten Pulse.

Durch die Renormierung der Einteilchenenergien (5.18) wird dagegen der optische Übergang mit steigender Besetzung zunehmend energetisch verschoben, so dass keine resonante Anregung mehr gegeben ist. Gemäß Gl. (6.5) bedeutet eine nicht-resonante Anregung eine zusätzliche Rotation um die z-Achse des Bloch-Vektors, die für sich alleine eine Oszillation der Polarisierung zwischen Realteil und Imaginärteil darstellt. Die Länge des Bloch-Vektors bleibt also weiterhin erhalten. Allerdings kann eine vollständige Inversion nicht mehr erreicht werden, da durch diese Oszillation der Realteil der Polarisierung zugunsten des Imaginärteils zunimmt und somit die Amplitude der Oszillation zwischen Imaginärteil der Polarisierung und Inversion abnimmt.

## 6.2 Berücksichtigung der Elektron-Phonon-Streuung

### Dephasing

Betrachtet man zunächst ein Zwei-Niveau-System und vernachlässigt die Wechselwirkung mit anderen Zuständen, so erhält man durch die Elektron-Phonon-Streuung nur das sogenannte "pure Dephasing". Im einfachsten Fall kann das pure Dephasing phänomenologisch als exponentieller Abfall der Polarisierung beschrieben werden. Das Dephasing bewirkt nun, während der optische Puls für eine Rotation um die x-Achse sorgt, eine Abnahme der Polarisierung und somit eine Verkürzung des Blochvektors, die um so stärker ist, je größer die Polarisierung ist. Daher bewirkt das Dephasing keine Änderungen der Besetzungen oder der Polarisierung, wenn keine Polarisierung vorhanden ist ( $\Psi = 0$ ), wie z.B. im Grundzustand oder bei Inversion. Wird also ein  $\pi$ -Puls auf ein System im Grundzustand gegeben, verringert der Bloch-Vektor während des Pulses seine Länge, so dass keine vollständige Inversion erreicht wird. Da nach einem  $\pi$ -Puls die Polarisierung wieder abgebaut ist, hat das Dephasing dann allerdings keine Wirkung mehr.

Dabei ist es von der Pulsdauer abhängig, wie stark die erreichte Inversion ist, da ein längerer Puls mehr Zeit zum Abbau der Polarisierung bietet und somit eine kleinere Inversion nach dem  $\pi$ -Puls bewirkt. Demzufolge kann man prinzipiell durch beliebig kurze Pulse beliebig nah an eine vollständige Inversion kommen. Allerdings sind kurze Pulse spektral breit, so dass die übrigen Zustände stärker angeregt werden, was zu einer Zunahme der Streuung mit anderen Zuständen führt.

Betrachtet man nun das Halbleiter-System mit wechselwirkenden Zuständen, ist neben dem pure Dephasing auch Dephasing durch Wechselwirkungen mit anderen Zuständen möglich. Dabei bewirkt das diagonale Dephasing wie das pure Dephasing näherungsweise einen exponentiellen Abfall der Polarisierung (s. Gl. (5.9)). Durch die Wechselwirkung vieler Zustände verhält sich die Polarisierung dabei kom-

plex.

Das offdiagonale Dephasing wirkt dabei dem diagonalen Dephasing entgegen, wie aus Gl. (5.9) ersichtlich ist. Dabei ist es aber überwiegend schwächer als das diagonale Dephasing, so dass die Polarisation weiterhin abfällt. Auch tritt offdiagonales Dephasing unabhängig von der Polarisation des betrachteten Zustandes auf, also auch zwischen  $\pi$ -Pulsen, wobei dies aufgrund der Polarisationsdämpfung relativ schwach ist.

### Besetzungsstreuung

Für Rabi-Oszillationen ist besonders die Besetzungsstreuung hinderlich, weil diese entgegen dem Dephasing unabhängig von Pulsen wirkt, da für diese keine Polarisation notwendig ist und die Besetzungen insgesamt durch die Elektron-Phonon-Streuung nicht abnehmen. Andere hier nicht betrachtete Prozesse, welche die Besetzungen abbauen, laufen deutlich langsamer ab (ns-Skala). Da die für die Rabi-Oszillationen notwendigen Pulsstärken auch in anderen Zuständen hohe Besetzungen erzeugen, tritt eine entsprechend starke Besetzungsstreuung auf.

Dies führt auch dazu, dass der Bloch-Vektor die nun miteinander wechselwirkenden Zustände nicht mehr vollständig beschreibt, da Ladungsträger zwischen den zuvor getrennten Zuständen hin und her gestreut werden können und somit unterschiedliche Besetzungen von Elektronen und Löchern möglich sind.

Um die Besetzungsstreuung möglichst klein zu halten, wird die s-Schale der Quantenpunkte für die Rabi-Oszillationen verwendet, da in deren Umgebung die wenigsten Zustände liegen, so dass trotz spektral breiten Pulsen nur relativ wenig Ladungsträger in anderen Zuständen angeregt werden. Auch ist so die Ausstreuung, die hier nur durch Absorption von Phononen erfolgen kann, für niedrige Temperaturen schwach.

Dabei sind Dephasing und Besetzungsstreuung der Elektron-Phonon-Streuung gekoppelt. Da die Halbleiter-Bloch-Gleichungen ebenfalls eine Kopplung zwischen Polarisationen und Besetzungen aufweisen, wirken sich Dephasing und Besetzungsstreuung der Elektron-Phonon-Streuung - selbst bei isolierter Betrachtung - sowohl auf die Polarisationen, als auch auf die Besetzungen aus.

## 6.3 Numerische Ergebnisse

Für die Rabi-Oszillationen werden entsprechend der Rechnungen zum Relaxationsverhalten (Kap. 5.3) Gl. (5.7) für die Besetzungsstreuung, Gl. (5.9) für das Dephasing und Gl. (5.21) - (5.22) für die optische Anregung verwendet.

## Rabi-Flops

Um zu untersuchen, über welchen Zeitraum im wechselwirkenden System Rabi-Oszillationen zu beobachten sind, wird betrachtet, wie sich die Besetzung der s-Schale bei verschieden langen, gauss-förmigen und resonanten  $4\pi$ -Pulsen verhält, die im nicht wechselwirkenden System zwei Rabi-Flops bewirken. Dabei wird die Renormierung des Pulses durch die Wechselwirkungen - insbesondere die Coulomb-Renormierungen - berücksichtigt. Die Ergebnisse der Rechnung bei 77K sind in Abb. (6.1) dargestellt, wobei Abb. (6.1a) die zeitliche Entwicklung der s-Schalen-Besetzung der Elektronen für verschiedene Pulslängen (rot) und Abb. (6.1b) entsprechende Ergebnisse zum einen nur mit Dephasing (lila) und zum anderen nur mit Besetzungsstreuung (blau) zeigt. Zum Vergleich ist jeweils der wechselwirkungsfreie Fall in grün dargestellt.

Dabei bestätigt Abb. (6.1a), dass die Rabi-Oszillationen mit zunehmender Pulsdauer stärker ausgedämpft werden. So sind für den 40fs breiten Puls fast vollständige Rabi-Flops zu erkennen, während die s-Schalen-Besetzung beim 400fs breiten Puls nur noch 0,8 statt 1 erreicht und nach dem  $4\pi$ -Puls nur knapp unter 0,5 statt bei 0 liegt.

Nach dem kurzen 40fs Puls ergibt sich eine starke Zunahme der s-Schalen-Besetzung, während bei den längeren Pulsen (120 und 400fs) eine tendenzielle Abnahme festzustellen ist. Dies lässt sich nicht nur durch die niedrigere Besetzung der s-Schale nach kurzen Pulsen, sondern auch durch größere Besetzungen anderer Zustände nach diesen kurzen und damit spektral breiten Pulsen erklären. Die nach den Pulsen zu beobachtenden Oszillationen der s-Schalen-Besetzung sind auf die Besetzungsstreuung zurückzuführen und finden mit der p-Schale statt.

Wie aus Abb. (6.1b) mit den gezeigten Entwicklungen für reines Dephasing (lila, keine Besetzungsstreuung durch Elektron-Phonon-Streuung) und reine Besetzungsstreuung (blau, kein Dephasing durch Elektron-Phonon-Streuung) ersichtlich ist, wirkt während der Pulse hauptsächlich das Dephasing indirekt über die Halbleiter-Bloch-Gleichungen auf die Besetzung. Dagegen wirkt die Besetzungsstreuung der Fröhlich-Kopplung nur wenig, so dass ohne Dephasing auch für längere (400fs) Pulse relativ gute Rabi-Flops vorliegen. Dies wird dadurch begünstigt, dass die längeren Pulse spektral schmal sind und somit weniger Ladungsträger in anderen Zuständen anregen, so dass weniger Streuung stattfinden kann, was die längere Zeitspanne, innerhalb der gestreut werden kann, teilweise kompensiert.

Die Stärke des Dephasings ist dagegen relativ unempfindlich von der Anregung anderer Zustände, so dass dieses die Rabi-Oszillationen mit zunehmender Pulsdauer zunehmend dämpft. So sind Besetzungsstreuung und Dephasing für den 40fs-Puls etwa gleich stark, wohingegen das Dephasing für die längeren Pulse im Vergleich zur Besetzungsstreuung stärker wird. Nach den Pulsen ergibt sich erwartungsgemäß nur noch eine schwache Besetzungsänderung durch das reine Dephasing (lila). Dies resultiert nicht nur aus dem schnellen Polarisationsabbau nach dem Puls, sondern vor allem daraus, dass sich das Dephasing nur über die Halbleiter-Bloch-Gleichungen auf die Besetzungen auswirkt, wobei sich dies linear zur renormierten

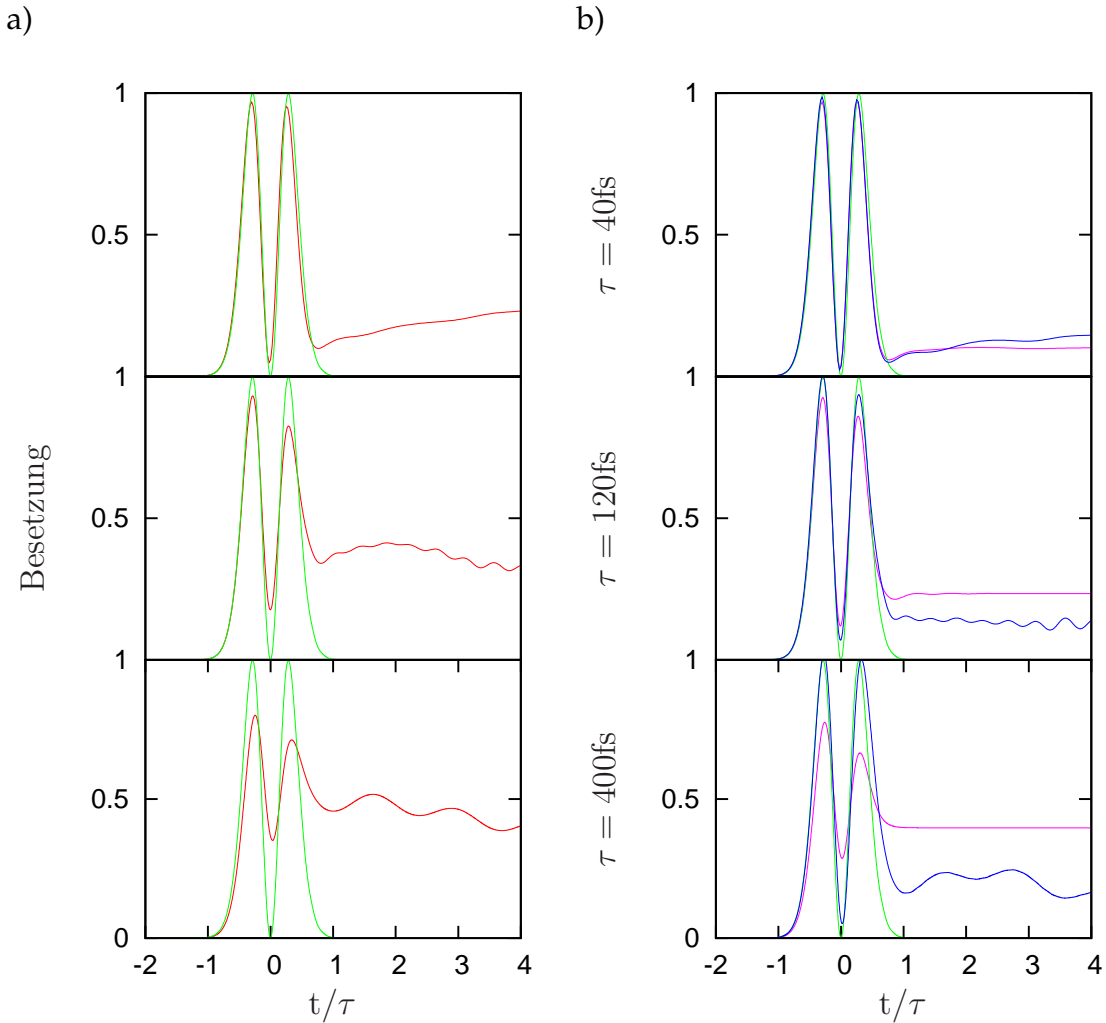


Abbildung 6.1: Besetzung der s-Schale der Elektronen bei verschiedenen langen ( $\tau = 40, 120, 400\text{fs}$ )  $4\pi$ -Pulsen: Ohne Elektron-Phonon-Streuung (grün) kommt es wiederholt zur vollständigen und leeren Besetzung, wohingegen dies mit Wechselwirkung nicht eintritt ((a) rot; nur Dephasing (b) lila; nur Besetzungsstreuung (b) blau).

optischen Anregung verhält, die nach dem Puls schnell abfällt. Dagegen wirkt die reine Besetzungsstreuung (blau) auch nach den Pulsen weiter.

In [6-7] wurden analoge Rechnungen mit LA-Phononen durchgeführt, die eine deutlich kleinere Wirkung auf die Rabi-Oszillationen aufweisen. So ergeben sich noch bei Pulsbreiten von 500fs nur geringe Abweichungen vom wechselwirkungsfreien Fall, wohingegen bei den Rechnungen für LO-Phononen schon bei Pulsbreiten von 40fs deutliche Abweichungen festzustellen sind. Zwar wurde bei der Berechnung für die LA-Phononen nur pure Dephasing betrachtet, das allerdings aufgrund der geringeren Energie der LA-Phononen für die energetisch isolierten Quantenzustände den Hauptbeitrag liefert. Dagegen ist bei den LO-Phononen das pure Dephasing schwach; hier sind die übrigen Streuterme - insbesondere die Besetzungsstreuung - deutlich stärker.

## Optisches Schalten

Rabi-Oszillationen bieten sich an, um Informationen zu speichern, da im wechselwirkungsfreien Fall mit  $\pi$ -Pulsen zwischen definierten Zuständen wie dem Grundzustand und der vollständigen Inversion hin und her geschaltet werden kann. Nachfolgend soll untersucht werden, wie dieses Schalten durch die Elektron-Phonon-Streuung beeinträchtigt wird. Insbesondere stellt sich die Frage, wie sich das System verhält, wenn es sich vor einem Puls nicht im Grundzustand befindet, sondern schon durch vorhergehende  $\pi$ -Pulse angeregt wurde. Um dies zu betrachten, werden vier 20fs lange und zur s-Schale resonante  $\pi$ -Pulse im Abstand von jeweils mehreren 100fs auf das System gegeben. Der zeitliche Verlauf der s-Schalen-Besetzung der Elektronen bei 77K ist in Abb. (6.2) dargestellt. Während in der Abbildung oben die volle Elektron-Phonon-Streuung dargestellt ist, wird in der Mitte nur Dephasing und unten nur Besetzungsstreuung betrachtet, wobei jeweils zum Vergleich der wechselwirkungsfreie Fall in grün dargestellt ist.

Gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall (grün), in dem jeder  $\pi$ -Puls die Besetzung von 0 auf 1 bzw. von 1 auf 0 schaltet und sich dies auch beliebig oft wiederholen lässt, stellt sich die Situation mit Elektron-Phonon-Streuung vollkommen anders dar. Betrachtet man zunächst einmal nur die Dephasing-Beiträge (lila, Mitte), erhält man neben den Besetzungsänderungen bei jedem  $\pi$ -Puls zwischen den Pulsen lediglich kleine Besetzungsänderungen, wie auch schon bei dem  $4\pi$ -Pulsen festzustellen war. Dabei werden die Besetzungsänderungen bei den  $\pi$ -Pulsen aufgrund des durch Dephasing bei jedem Puls verkürzten Bloch-Vektors zunehmend schwächer.

Die Besetzungsstreuung (blau, unten) wirkt dagegen auch zwischen den Pulsen. Dabei ändert sich die Besetzung zwischen den Pulsen teilweise drastisch um bis zu 0,2 und es bilden sich relativ starke, komplexe Oszillationen. Insbesondere bewirkt dies vor dem dritten Puls eine derart starke Besetzungszunahme, dass dieser  $\pi$ -Puls nicht nur zu einer Zunahme, sondern auch im weiteren Verlauf des Pulses zu einer Abnahme der Besetzung führt.

Mit der vollen Elektron-Phonon-Streuung (rot, oben) ergibt sich ein ähnliches Bild, wobei hier die Abweichungen gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall noch größer sind. Zwar sind die Oszillationen zwischen den Pulsen durch das Dephasing deutlich geglättet, doch schwankt die Besetzung zwischen den Pulsen aufgrund des Zusammenwirkens von Besetzungsstreuung und Dephasing noch stärker. Insbesondere der dritte Puls, der hier nur eine sehr geringe Besetzungsänderung bewirkt, macht dies deutlich.

Das wesentliche Problem beim Schalten ist das Fehlen eines dämpfenden Mechanismus für die Besetzungen, der also eine Rekombination von Elektronen und Löchern ermöglicht - dies findet nur auf der ns-Skala statt und ist somit deutlich langsamer als die hier betrachtete Elektron-Phonon-Streuung. Ohne einen solchen Mechanismus führt jedes Schalten im Mittel zu einer Zunahme der Ladungsträger, die eine Rückkehr in den unbesetzten Grundzustand verhindern und zu starken Schwankungen der Besetzung auch ohne Schaltpulse führen. Dagegen wird die Polarisati-

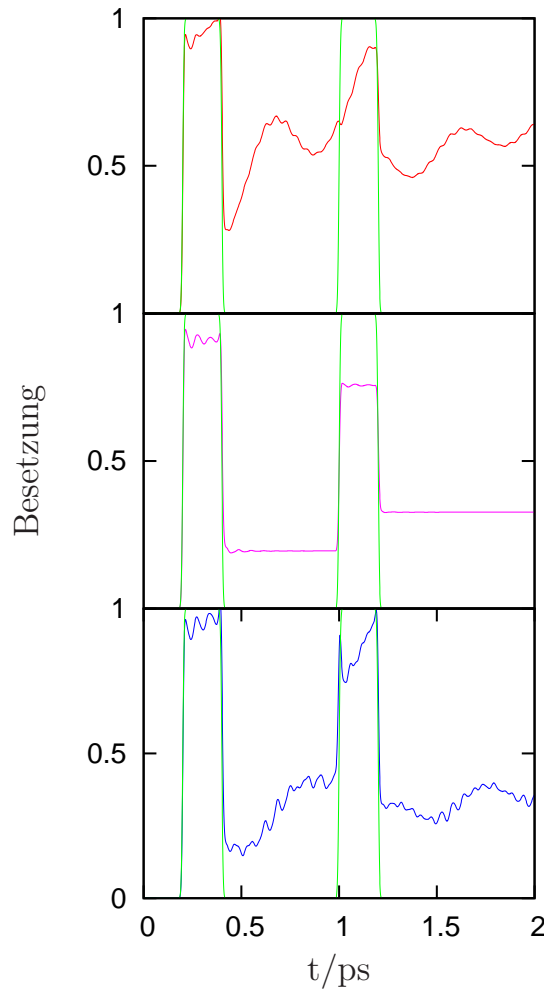


Abbildung 6.2: Besetzung der s-Schale der Elektronen für verschiedene Wechselwirkungen bei 77K und einer Reihe von durch  $\pi$ -Pulsen ausgelöste Schaltvorgänge bei  $t = 0, 2ps; 0, 4ps; 1, 0ps; 1, 2ps$ : Die Schaltvorgänge führen ohne Elektron-Phonon-Streuung (grün) zur wiederholten vollständigen und leeren Besetzung der s-Schale der Elektronen. Mit Elektron-Phonon-Streuung ist dies nicht der Fall (volle Elektron-Phonon-Streuung (rot, oben); nur Dephasing (lila, Mitte), nur Besetzungsstreuung (blau, unten)).

on relativ schnell abgebaut, so dass sich das System nach Schaltungen davon wieder erholen kann.



## 7 Zusammenfassung und Ausblick

Es wurde eine quantenkinetische Beschreibung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Quantenpunkt-Strukturen vorgestellt. Die von GaAs umgebene Quantenpunkt-Struktur aus selbstorganisiert gewachsenen Quantenpunkten und einer Benetzungsschicht aus InGaAs weist dabei zunächst eine schwache polare Kopplung auf. Durch die Wechselwirkung der Phononen mit diskreten lokalisierten Zuständen ist jedoch eine Behandlung jenseits der Störungstheorie notwendig. Zur Beschreibung wurde die Methode der Green's Funktionen im Nicht-Gleichgewicht verwendet. Dabei wurde auf die polaronische Selbstenergie in RPA-Näherung und den verallgemeinerten Kadanoff-Baym Ansatz zurückgegriffen.

Durch die Verwendung der polaronischen Selbstenergie entkoppeln die spektralen Eigenschaften der Halbleiter-Struktur von dessen Kinetik. Die Untersuchung der Spektralfunktion führt auf die Beschreibung der Ladungsträger als Quasiteilchen, den Polaronen, die sich aus einem Elektron und einer variablen Anzahl von Phononen zusammensetzen. Dabei bilden sich in den Spektralfunktionen Phononrepliken. Die diskreten Quantenpunktzustände weisen daneben trotz der schwachen polaren Kopplung eine Hybridisierung auf. Ferner kommt es zu einer starken Einwirkung der Quantenpunktzustände auf Benetzungsschichtzustände, die sich in Form dispersionsloser Features in deren Spektralfunktionen zeigt.

Mit den spektralen Eigenschaften kann die Kinetik des Systems bestimmt werden. Zunächst wurde die Relaxation von Ladungsträgern nach einer optischen Anregung im Band untersucht. Die Relaxation im Band der Benetzungsschicht führt innerhalb einer ps zu einer gleichgewichtsähnlichen Besetzung der Zustände. Der Einfang in die Quantenpunktzustände für die Löcher verläuft ähnlich schnell, wohingegen die Elektronen dafür deutlich länger brauchen. Anders als man aber für freie Teilchen wegen der nicht erfüllten Energieerhaltung bei von einer Phononenergie abweichenden Energiedifferenzen der Zustände erwarten könnte, kommt es nicht zu einem Flaschenhalsverhalten, bei dem es keinerlei Streuung in die Quantenpunktzustände gäbe.

Eine weitere interessante Anwendung stellen Rabi-Oszillationen dar. Bei der Untersuchung von durch optischen Pulsen ausgelösten Rabi-Flops zeigt sich, dass diese durch die Elektron-Phonon-Streuung innerhalb von 400fs stark ausgedämpft werden. Dabei wirkt das Dephasing aufgrund der getriebenen Polarisierung hauptsächlich während der Pulse, wohingegen die Besetzungsstreuung auch nach den Pulsen stark ist, da die Besetzungen anders als die Polarisierung nicht abgebaut werden. Dies ist insbesondere beim definierten Schalten von Besetzungen hinderlich, da selbst bei kurzen Pulsen zwischen einzelnen Schaltvorgängen starke Besetzungsänderungen

auftreten können.

In der vorliegenden Arbeit wurde nur die Elektron-Phonon-Streuung betrachtet; es liegt nahe, auch weitere Wechselwirkungen einzubeziehen. Insbesondere die Coulomb-Streuung ist bei größeren Elektronendichten wichtig, die bei Rabi-Oszillationen vorkommen. Weiterhin erlaubt das vorgestellte Modell die Berechnungen von Relaxationszeiten, welche z.B. in Laserrechnungen benötigt werden. Aktuell sind Nitrid-Materialien wie AlGa<sub>N</sub>, die zur Herstellung von im blauen Spektralbereich emittierenden Laser-Dioden dienen, von großem Interesse. Dabei sind allerdings anders als in InGaAs Piezofelder zu berücksichtigen, so dass eine komplexere Modellierung notwendig ist.

# A Matricelemente

## A.1 Matricelemente der Coulomb-Wechselwirkung

Die Coulomb-Wechselwirkung wird durch den Hamilton-Operator

$$H_{coul} = \sum_{1,2} \frac{1}{2} v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2 \Psi_1 \quad (\text{A.1})$$

beschrieben, wobei  $\mathbf{r}_1$  der Ort des Elektrons 1 ist. Für die Coulombenergie folgt durch Fouriertransformation

$$\begin{aligned} v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \frac{e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

mit

$$v_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{\epsilon_0 \mathbf{q}^2} \quad (\text{A.3})$$

und der Elementarladung  $e$  sowie der Dielektrizitätskonstante des Vakuums  $\epsilon_0$ .

Durch die Entwicklung der Elektronenzustände

$$\Psi_1 = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} a_{\alpha} \quad (\text{A.4})$$

nach Eigenfunktionen  $\phi_{\alpha}$  lässt sich der Hamilton-Operator mit den Matricelementen

$$v_{\alpha\beta\beta'\alpha'}(\mathbf{q}) = v_{\mathbf{q}} \langle \phi_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \phi_{\alpha'} \rangle \langle \phi_{\beta} | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \phi_{\beta'} \rangle \quad (\text{A.5})$$

zu

$$H_{coul} = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'\mathbf{q}} v_{\alpha\beta\beta'\alpha'}(\mathbf{q}) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta'} a_{\alpha'} \quad (\text{A.6})$$

umschreiben.

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

Die Taylor-Entwicklung des Potentials der Gitterionen liefert für kleine Auslenkungen

$$v_G(\mathbf{r}) = \sum_j v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0 - \mathbf{u}_j(t)) = \sum_j \{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) - \nabla v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j(t) + \dots\} . \quad (\text{A.7})$$

Während der erste Term dabei das statische Potential der Gitterionen beschreibt, das die Bandstruktur der Ladungsträger bewirkt, beschreibt der zweite Term das durch Auslenkungen der Gitterionen verursachte Potential. Dieses bewirkt die Elektron-Phonon-Wechselwirkung, die die Bewegung von Elektronen im zeitlich veränderlichen Potential der Auslenkungen  $\mathbf{u}_j(t)$  von  $N$  Gitterionen aus deren Ruhelage  $\mathbf{R}_j^0$  beschreibt. Dabei ist  $v$  die Coulombenergie (A.2).

Damit erhält man für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in zweiter Quantisierung den Hamilton-Operator

$$H_{e-pn} = \sum_j \nabla v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j \Psi^\dagger \Psi . \quad (\text{A.8})$$

Durch Entwicklung der Auslenkung in Normalmoden und der Feldoperatoren nach Eigenfunktionen

$$\mathbf{u}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j^0} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) , \quad (\text{A.9})$$

$$\Psi = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} a_{\alpha} , \quad (\text{A.10})$$

wobei  $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$  der Polarisationsvektor,  $\mu$  die effektive Masse der Ladungsträger und  $\omega_{\mathbf{q}}$  die Frequenz der Mode  $\mathbf{q}$  ist, erhält man mit

$$\nabla v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} i\mathbf{q} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0)} , \quad (\text{A.11})$$

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} = N\delta(\mathbf{q}) \quad (\text{A.12})$$

für den Hamilton-Operator

$$H_{e-pn} = \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q}) (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) a_{\alpha}^\dagger a_{\beta} \quad (\text{A.13})$$

mit den Wechselwirkungsmatrixelementen

$$M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q}) = -i \sqrt{\frac{N\hbar}{2\mu\omega_{\mathbf{q}}}} \frac{1}{V} v_{\mathbf{q}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} \langle \phi_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \phi_{\beta} \rangle , \quad (\text{A.14})$$

wobei  $v_q$  das Coulomb-Potential (A.3) ist.

Aufgrund des Skalarproduktes  $qe_q$  tragen hier nur longitudinale Phononen bei. Für kleine  $q$ , also Zustände nahe dem  $\Gamma$ -Punkt, kann für LO-Phononen in guter Näherung eine konstante Dispersion  $\omega_q = \omega_{LO}$  angenommen werden, so dass man für einen polaren Kristall mit zwei Ionen pro Elementarzelle die Matricelemente der Fröhlich-Kopplung

$$M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{M_{LO}}{|q|} \langle \phi_\alpha | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_\beta \rangle \quad (\text{A.15})$$

mit der Kopplungsstärke

$$\begin{aligned} M_{LO}^2 &= 4\pi\alpha \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} (\hbar\omega_{LO})^{3/2} \\ &= 4\pi\alpha E_B^2 a_0 \left( \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

erhält.

Für den Fall einer abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung ist

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2\hbar\omega_{LO}}} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \\ &= \sqrt{\frac{E_B}{\hbar\omega_{LO}}} \left( 1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

die dimensionslose Fröhlich-Kopplungskonstante, die materialabhängig ist und experimentell bestimmt werden kann. In Störungsrechnung für  $T = 0$  entspricht  $\alpha \cdot \hbar\omega_{LO}$  der Energieabsenkung der Elektronen durch die Wechselwirkung mit den LO-Phononen der Energie  $\hbar\omega_{LO}$  [5]. Diese Energieabsenkung wird Polaronen-Shift genannt. Ferner liefert die Störungsrechnung für  $T = 0$  eine durch die Wechselwirkung um  $\alpha \cdot m/6$  erhöhte effektive Masse [5].

Die jeweils zweite Zeile in Gl. (A.16) und (A.17) ist in exzitonischen Einheiten angegeben, wobei  $E_B$  die exzitonische Grundzustandsenergie und  $a_0$  der exzitonische Bohrradius ist. Diese exzitonischen Einheiten ermöglichen es, mit dimensionslosen Größen zu rechnen. Zu exzitonischen Einheiten siehe auch Kap. C.2. Ferner ist  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante des Vakuums,  $\epsilon$  die statische Dielektrizitätskonstante und  $\epsilon_\infty$  die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante,  $e$  die Elementarladung und  $\mu$  mit

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (\text{A.18})$$

die reduzierte Masse.

Die Matricelemente der Fröhlich-Kopplung entsprechen also bis auf einen Vorfaktor den Matricelementen der Coulomb-Wechselwirkung

$$|M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q})|^2 \propto v_{\alpha\beta\alpha\beta}(\mathbf{q}) . \quad (\text{A.19})$$

### A.3 Zustände

Gemäß des Bloch-Theorem [11] kann eine Wellenfunktion von Elektronen in einem translationssymmetrischen Kristall als Produkt aus einer einhüllenden ebenen Welle  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  und einer gitterperiodischen Bloch-Funktion  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  dargestellt werden.

Nimmt man an, dass sich die einhüllende nur schwach über einer Elementarzelle ändert, kann man die Envelope-Function-Approximation [11] anwenden, bei der die Bloch-Funktionen durch ihren Wert nahe der Bandkante ( $\mathbf{k} \approx 0$ ) genähert werden.

Hier liegt allerdings kein translationssymmetrischer Kristall vor. Die Translationssymmetrie ist in Wachstumsrichtung gebrochen, besteht aber weiterhin in der Wachstumsebene, da die Quantenpunkte im Mittel homogen verteilt sind. Um dies gesondert betrachten zu können, kann man, wenn man von einer schwachen Variation des Potentials innerhalb der Benetzungsschicht und der Quantenpunkte ausgeht, die Wellenfunktionen näherungsweise als Produkt einer Wellenfunktion  $\xi(z)$  in Wachstumsrichtung  $z$  und einer Wellenfunktion  $\phi(\rho)$  in der zu  $z$  senkrechten Wachstumsebene darstellen

$$\Phi(\mathbf{r}) = \phi(\rho) \xi(z) u_{\mathbf{k} \approx 0}(\mathbf{r}) , \quad (\text{A.20})$$

wobei  $\rho$  ein Vektor in der Wachstumsebene ist.

### Formfaktor

Diese Aufspaltung der Wellenfunktionen erlaubt es, den  $z$ -abhängigen Anteil der Matricelemente in einem Formfaktor  $F_{\alpha,\beta}(|\mathbf{q}_{||}|)$  zusammenzufassen, so dass

$$\sum_{\mathbf{q}} |M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q})|^2 = \frac{1}{4\pi^2} \int d^2 q_{||} \frac{M_{LO}^2}{2|\mathbf{q}_{||}|} F_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}_{||}) |\langle \phi_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}_{||}\rho} | \phi_{\beta} \rangle|^2 \quad (\text{A.21})$$

bei gegebenen Formfaktor nicht mehr vom vollständigem  $\mathbf{q}$ , sondern nur noch vom Anteil in der Wachstumsebene  $q_{||}$  abhängt.

Für den Formfaktor ergibt sich so

$$F_{\alpha,\beta}(|\mathbf{q}_{||}|) = \int dz \int dz' \xi_{\alpha}^*(z) \xi_{\alpha}(z') e^{-q_{||}|z-z'|} \xi_{\beta}^*(z') \xi_{\beta}(z) , \quad (\text{A.22})$$

wobei zur Ausführung der  $q_z$ -Integration

$$\int dq_z \frac{1}{q_z^2 + q_{||}^2} e^{iq_z(z-z')} = \frac{\pi}{q_{||}} e^{-q_{||}|z-z'|} \quad (\text{A.23})$$

verwendet wurde.

Dabei gilt  $F(q_{||} = 0) = 1$  und dass der Formfaktor für größer werdende  $q_{||}$  stetig abnimmt.

Für die Matricelemente der Coulomb-Wechselwirkung folgt dies vollkommen analog.

## Zustände in Wachstumsrichtung

Durch die deutlich kleinere Bandlücke des InGaAs der Benetzungsschicht und der Quantenpunkte gegenüber dem umliegenden GaAs sind die Ladungsträger in Wachstumsrichtung eingeschlossen. Im Fall eines schnellen Übergangs zwischen den Materialien kann das Potential der Ladungsträger in Wachstumsrichtung durch einen Potentialtopf beschrieben werden.

Nimmt man vereinfachend ein unendlich großes Potential außerhalb der Benetzungsschicht und der Quantenpunkte an, erhält man für einen Potentialtopf der Breite  $L$

$$\xi^\infty(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right), \quad (\text{A.24})$$

mit der Quantenzahl  $n = 1, 2, 3, \dots$

Für wie hier betrachtete kleine Breiten  $L = 2,2\text{nm}$  liegen die Energien der Lösungen mit  $E_2 - E_1 = 234\text{meV}$  in Bezug zu den betrachteten Phononenenergien  $\hbar\omega_{LO} = 36\text{meV}$  so weit auseinander, dass es ausreicht, nur den Grundzustand  $n = 1$  zu betrachten.

Für diesen erhält man den Formfaktor

$$F(|q_{||}|) = \frac{2}{qL} + \frac{qL}{(qL)^2 + 4\pi^2} + 2(e^{-qL} - 1) \left( \frac{1}{qL} - \frac{qL}{(qL)^2 + 4\pi^2} \right)^2. \quad (\text{A.25})$$

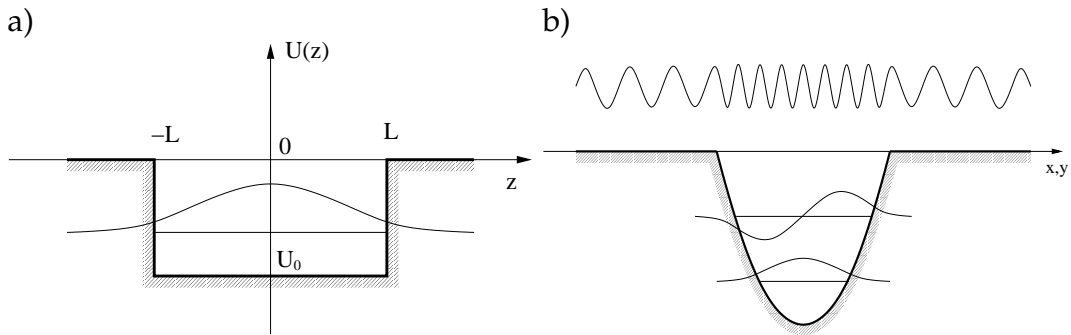


Abbildung A.1: (a) Zustände in Einschlussrichtung: Der durch einen Potentialtopf genäherte Einschluss führt zu weit auseinander liegenden Energieniveaus, von denen nur das unterste betrachtet wird. (b) Das harmonische Einschlusspotential der Quantenpunkte in der Wachstumsebene führt zu gebundenen Zuständen mit zwei Energieniveaus. Für die Benetzungsschicht ergeben sich durch die Quantenpunkte modifizierte ebene Wellen, die ein quasikontinuierliches Band bilden.

## Quantenpunkt-Zustände

Das Einschlusspotential der linsenförmigen QDs in der Benetzungsschicht kann in guter Näherung als harmonisch angenommen werden. So wurde in [2] gezeigt, dass die Wellenfunktionen und Energieeigenwerte von linsenförmigen QDs sehr gut mit denen eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators übereinstimmen. Diese sind aus der Standardliteratur [4] bekannt und lauten für die zwei energetisch niedrigsten gebundenen Zustände mit den Drehimpulsquantenzahlen  $m = -1, 0, 1$  für einen QD am Ort  $\mathbf{R}$ :

$$\begin{aligned}\phi_{m=0,\mathbf{R}}(\rho) &= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\beta^2 |\rho - \mathbf{R}|^2}{2}}, \\ \phi_{m=\pm 1,\mathbf{R}}(\rho) &= \phi_{m=0,\mathbf{R}}(\rho) \cdot \beta |\rho - \mathbf{R}| e^{\pm i\Phi},\end{aligned}\tag{A.26}$$

wobei  $\Phi$  der Winkel von  $\rho - \mathbf{R}$ , der zum QD relativen Position auf der Benetzungsschicht, ist. Für die Energieeigenwerte des Hamilton-Operators des zweidimensionalen harmonischen Oszillators gilt

$$E_{x,y} = (n_x + n_y + 1) \frac{\hbar^2 \beta^2}{\mu}\tag{A.27}$$

mit den Quantenzahlen  $n_x, n_y = 0, 1, 2, \dots$  und der effektiven Masse  $\mu$ . In Analogie zur Atomphysik wird der Grundzustand  $m = 0$  als  $s$ -Zustand und der erste angeregte Zustand  $m = \pm 1$  als  $p$ -Zustand bezeichnet. Die Energiedifferenz  $\Delta E$  dieser Zustände wird dabei von  $\beta$  bestimmt.

## Benetzungsschicht-Zustände

In einem zwei-dimensionalen, homogenen System ohne Quantenpunkte sind die Zustände durch ebene Wellen

$$\phi_{\mathbf{k}}^0(\rho) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\rho}\tag{A.28}$$

gegeben, wobei  $\mathbf{k}$  der Wellenvektor und  $A$  die Fläche in der Wachstumsebene ist. Diese Zustände sind zwar zueinander orthogonal, aber nicht zu den QD-Zuständen (s. Gl. (A.26)), so dass diese keine orthogonale Basis für das gesamte System darstellen.

## Orthogonalized Plane Waves

Mittels der OPW<sup>1</sup>-Methode können zu den QD-Zuständen orthogonale WL-Zustände konstruiert werden. Dazu wird von den ebenen Wellen deren Überlapp

---

<sup>1</sup>orthogonalized plane waves



mit den QD-Zuständen subtrahiert

$$|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \left[ |\phi_{\mathbf{k}}^0\rangle - \sum_{m,\mathbf{R}} |\phi_{m,\mathbf{R}}\rangle \langle \phi_{m,\mathbf{R}} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle \right]. \quad (\text{A.29})$$

Dabei gilt für den Normierungsfaktor

$$N_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - N \sum_m |\langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_m \rangle|^2}. \quad (\text{A.30})$$

Die verschiedenen Quantenpunktpositionen  $\mathbf{R}$  liefern hier lediglich einen Phasenfaktor, der das Betragsquadrat nicht verändert, so dass die Summation über die Quantenpunktpositionen der  $N$  Quantenpunkte ausgeführt werden kann, wobei  $\phi_m = \phi_{m,0}$ .

Mit Gl. (A.35) erhält man

$$N_{\mathbf{k}}^2 = 1 - 4\pi \frac{n_{QD}}{\beta^2} \left\{ 1 + 2 \frac{k^2}{\beta^2} \right\} e^{-\frac{k^2}{\beta^2}}, \quad (\text{A.31})$$

wobei  $n_{QD} = N/A$  die Dichte der QDs auf der Benetzungsschicht ist.

## A.4 Überlapp-Integrale

### Quantenpunkt-Überlapp-Integrale

Für die Berechnung der Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung und der Fröhlich-Kopplung (Kap. A.1 und (A.2)) werden die Überlapp-Integrale der betrachteten Zustände benötigt.

Für die Quantenpunktzustände ergibt sich für diese gemäß (A.26)

$$\langle \phi_{m,\mathbf{R}} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{m',\mathbf{R}} \rangle = \langle \phi_m | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{m'} \rangle e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \quad (\text{A.32})$$

mit

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_0 \rangle &= e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}}, \\ \langle \phi_0 | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\pm 1} \rangle &= i \frac{q}{2\beta} e^{\pm i\Phi_q} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}}, \\ \langle \phi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\pm 1} \rangle &= \left[ 1 - \frac{q^2}{4\beta^2} \right] e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}}, \\ \langle \phi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mp 1} \rangle &= -\frac{q^2}{4\beta^2} e^{\mp 2i\Phi_q} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Dabei ist  $\Phi_q$  der Winkel von  $\mathbf{q}$  in Polardarstellung. Selbiges gilt im Folgenden auch für die Vektoren  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ .

## Überlapp-Integrale der ebenen Wellen

Zur Berechnung der OPW-Überlapp-Integrale werden die Skalarprodukte zwischen QD-Zuständen und ebenen Wellen sowie die Überlapp-Integrale der ebenen Wellen benötigt.

Für die Skalarprodukte zwischen den QD-Zuständen erhält man mit (A.26) und (A.28)

$$\langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_{\nu} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_m \rangle e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \quad (\text{A.34})$$

mit

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_0 \rangle &= \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}} \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2\beta^2}}, \\ \langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_{\pm 1} \rangle &= \langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_0 \rangle \frac{-i|\mathbf{k}|}{\beta} e^{\pm i\Phi_{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

wobei sich die übrigen Skalarprodukte durch komplexes Konjugieren ergeben.

Die Überlapp-Integrale der ebenen Wellen ergeben sich aus selbigen Gleichungen und lauten

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\nu} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle &= \langle \phi_m | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle e^{i\{\mathbf{k}+\mathbf{q}\}\mathbf{R}} \\ &= \langle \phi_m | \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \rangle e^{i\{\mathbf{k}+\mathbf{q}\}\mathbf{R}} \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

mit

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle &= \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}} \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\mathbf{k}+\mathbf{q}^2}{2\beta^2}}, \\ \langle \phi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle &= \langle \phi_0 | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle i \frac{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}{\beta} e^{\mp i\Phi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

und

$$\langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}). \quad (\text{A.38})$$

## Überlapp-Integrale zwischen Quantenpunkten und Orthogonalized Plane Waves

Gemäß Gl. (A.29) gilt für die Überlapp-Integrale der QD-Zustände mit den OPW-Zuständen

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\nu} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle &= \langle \phi_m | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}} \\ &= \frac{1}{N_k} \left\{ \langle \phi_m | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle - \sum_{m'} \langle \phi_m | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{m'} \rangle \langle \phi_{m'} | \phi_{\mathbf{k}}^0 \rangle \right\} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{R}}. \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Durch Einsetzen der Überlappintegrale (A.33) und der Skalarprodukte (A.35) erhält man

$$\langle \phi_0 | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_k \rangle = \frac{1}{N_k} \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}\beta} \left\{ e^{-\frac{(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}{2\beta^2}} - e^{-\frac{2\mathbf{k}^2+\mathbf{q}^2}{4\beta^2}} \left[ 1 - \frac{kq}{\beta^2} \cos(\Phi_q - \Phi_k) \right] \right\} \quad (\text{A.40})$$

und

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\pm 1} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_k \rangle = & \frac{1}{N_k} \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}\beta} \left\{ \frac{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|}{\beta} e^{-\frac{(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}{2\beta^2}} e^{\mp i\Phi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} + e^{-\frac{2\mathbf{k}^2+\mathbf{q}^2}{4\beta^2}} \right. \\ & \left. * \left[ \frac{q}{2\beta} e^{\mp i\Phi_q} - \frac{k}{\beta} e^{\mp i\Phi_k} + \frac{q^2}{4\beta^2} \frac{k}{\beta} (e^{\mp i\Phi_k} + e^{\mp i(2\Phi_q+\Phi_k)}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

## Überlapp-Integrale der Orthogonalized Plane Waves

Analog folgt aus der Definition der OPW-Zustände (A.29) für den Überlapp dieser

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\mathbf{k}} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}'} \rangle = & \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{k}')}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left\{ 1 + \sum_{m, m'} \langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_m \rangle \langle \phi_m | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{m'} \rangle \langle \phi_{m'} | \phi_{\mathbf{k}'}^0 \rangle \right. \\ & \left. - \sum_m |\langle \phi_{\mathbf{k}}^0 | \phi_m \rangle|^2 - \sum_m |\langle \phi_{\mathbf{k}'}^0 | \phi_m \rangle|^2 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

was sich durch Einsetzen der Überlappintegrale (A.33) und der Skalarprodukte (A.35) in

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\mathbf{k}} | e^{i\mathbf{q}\rho} | \phi_{\mathbf{k}'} \rangle = & \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{k}')}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'}} \left\{ 1 - 4\pi \frac{n_{QD}}{\beta^2} \left[ e^{-\frac{k'^2}{\beta^2}} \left( 1 + 2\frac{k'}{\beta} \right) + e^{-\frac{k^2}{\beta^2}} \left( 1 + 2\frac{k}{\beta} \right) \right] \right. \\ & + 4\pi \frac{n_{QD}}{\beta^2} e^{-\frac{2\mathbf{k}^2+2\mathbf{k}'^2+\mathbf{q}^2}{4\beta^2}} \left\{ 1 - \frac{q}{\beta} (k' \cos(\Phi_{k'} - \Phi_q) - k \cos(\Phi_k - \Phi_q)) \right. \\ & \left. \left. + 2\frac{kk'}{\beta^2} \left[ \left( 1 - \frac{q^2}{4\beta^2} \right) \cos(\Phi_k - \Phi_{k'}) - \frac{q^2}{4\beta^2} \cos(\Phi_k + \Phi_{k'} - 2\Phi_q) \right] \right\} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

umformen lässt.

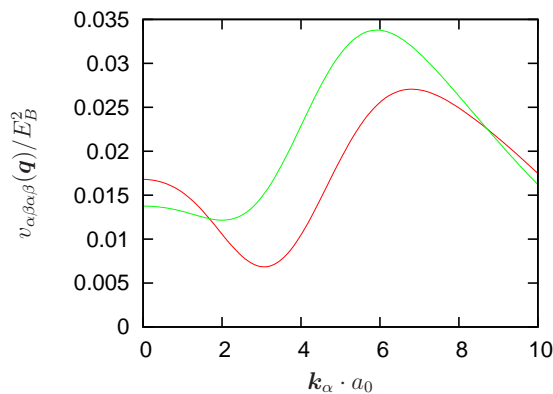
## A.5 Numerisch berechnete Matricelemente

Abb. (A.2) zeigt die berechneten Matrix-elemente. Dargestellt sind die zu den Matrix-elementen der Elektron-Phonon-Wechselwirkung proportionalen Matricelemente der Coulomb-Wechselwirkung.

a)

$v_{\alpha\beta\alpha\beta}(\mathbf{q})/E_B^2$	$s\ s$	$s\ p_{\pm}$	$p_{\pm}\ p_{\pm}$	$p_{\pm}\ p_{\mp}$
	6.0419	1.4194	4.2221	1.0190

b)



c)

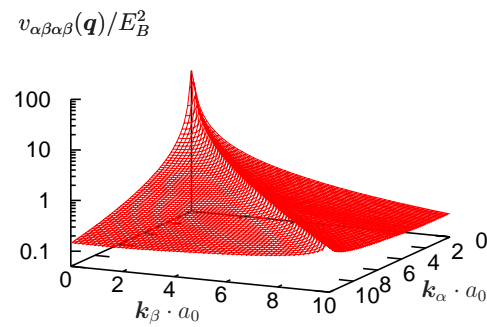


Abbildung A.2: Matricelemente der Coulomb-Wechselwirkung: a) zwischen den Zuständen eines Quantenpunkts; b) zwischen Quantenpunktzuständen (s-Schale in rot und p-Schale in grün) und Benetzungsschichtzuständen; c) zwischen den Zuständen der Benetzungsschicht

## B Faktorisierung der Elektron-Phonon-Streuung

Neben der im Hauptteil durchgeführten Berechnung der Elektron-Phonon-Streuung mit Green's Funktionen, gibt es auch einfachere Vorgehensweisen dieses Problem zu behandeln. Eine Möglichkeit ist, eine Faktorisierungsnäherung zum Abbrechen des Hierarchieproblems zu verwenden. Diese wird im Folgenden skizziert.

Der Hamilton-Operator  $H_{e-pn}$  liefert zusammen mit  $H_e$  die Elektron-Phonon-Streuung.

### Besetzungsstreuung

Es gilt nun, für die Besetzungswahrscheinlichkeit  $f_{\alpha_a} = \langle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle$  mit  $a = c, v$  eine Bewegungsgleichung aufzustellen

$$\frac{d}{dt} f_{\alpha_a} = \frac{d}{dt} \langle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle = \left\langle \frac{da_{\alpha}^{\dagger}}{dt} a_{\alpha} \right\rangle + \left\langle a_{\alpha}^{\dagger} \frac{da_{\alpha}}{dt} \right\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Mit den Bewegungsgleichungen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (2.26), (2.29), (2.30), sowie  $M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) = M_{\alpha,\beta}^*(-\mathbf{q})$  folgt

$$\frac{d}{dt} f_{\alpha_a} = -\frac{2}{\hbar} \Im \sum_{\beta,\mathbf{q}} M_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) \left[ \langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle + \langle b_{\mathbf{q}} a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle \right]. \quad (\text{B.2})$$

Für die Phonon-assistierten Besetzungen ergibt sich wiederum unter Verwendung von Gl. (2.26), (2.29) und (2.30) mittels zur Hartree-Fock-Faktorisierung (s. Kap. 5.2) analoger Faktorisierung

$$\begin{aligned} \langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{\beta_a} - \epsilon_{\alpha_a})(t-t')} \\ &\quad M_{\alpha,\beta}(-\mathbf{q}) [f_{\alpha_a}(1 - f_{\beta_a}) + N(f_{\alpha_a} - f_{\beta_a}) - \psi_{\alpha}\psi_{\beta}^*]_{t'}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} \langle b_{\mathbf{q}} a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{\beta_a}^a - \epsilon_{\alpha_a})(t-t')} \\ &\quad M_{\alpha,\beta}(-\mathbf{q}) [-f_{\alpha_a}(1 - f_{\beta_a}) + (1 + N)(f_{\alpha_a} - f_{\beta_a}) + \psi_{\alpha}\psi_{\beta}^*]_{t'}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

so dass

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\alpha_1}(t) = 2 \sum_{\beta, \mathbf{q}} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 \Re \int_{-\infty}^t dt' G_{0, \alpha_1}^R(t-t') [G_{0, \beta_1}^R(t-t')]^* \\ * \left\{ \left[ -f_{\alpha_1}(1-f_{\beta_1}) + \psi_{\alpha} \psi_{\beta}^* \right]_{t'} \left[ N e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + (1+N) e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right] \right. \\ \left. + \left[ (1-f_{\alpha_1}) f_{\beta_1} - \psi_{\alpha} \psi_{\beta}^* \right]_{t'} \left[ (1+N) e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + N e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

gilt.

## Dephasing

Für die Polarisation  $\psi_{\alpha} = v_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}$  erhält man entsprechend

$$\frac{d}{dt} \psi_{\alpha} = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\alpha_v} - \epsilon_{\alpha_c}) \psi_{\alpha} + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) \left\langle \left( b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) \left( v_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} - v_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \right) \right\rangle. \quad (\text{B.6})$$

Da der erste Term einzig durch die Coulomb-Wechselwirkung hervorgerufen wird, ist dieser bereits in den Halbleiter-Bloch-Gleichungen enthalten und wird hier daher nicht nochmal betrachtet

$$\frac{d}{dt} \psi_{\alpha} = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) \left\langle \left( b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) \left( v_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} - v_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \right) \right\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Für die Phonon-assistierten Polarisationen ergibt sich nach analog zu oben ausgeführter Faktorisierung

$$\begin{aligned} \left\langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} v_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{\alpha_v} - \epsilon_{\beta_c})(t-t')} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) \\ [N(\psi_{\beta} - \psi_{\alpha}) - f_{\beta_c} \psi_{\alpha} + (1-f_{\alpha_v}) \psi_{\beta}]_{t'}, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$\begin{aligned} \left\langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} v_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{\beta_v} - \epsilon_{\alpha_c})(t-t')} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) \\ [N(\psi_{\alpha} - \psi_{\beta}) - f_{\alpha_c} \psi_{\beta} + (1-f_{\beta_v}) \psi_{\alpha}]_{t'}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} \left\langle b_{\mathbf{q}} v_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} (-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{\beta_v} - \epsilon_{\alpha_c})(t-t')} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) \\ [(N+1)(\psi_{\alpha} - \psi_{\beta}) + f_{\alpha_c} \psi_{\beta} - (1-f_{\beta_v}) \psi_{\alpha}]_{t'}, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} \left\langle b_{\mathbf{q}} v_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} (-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{\alpha_v} - \epsilon_{\beta_c})(t-t')} M_{\alpha, \beta}(-\mathbf{q}) \\ [(N+1)(\psi_{\beta} - \psi_{\alpha}) + f_{\beta_c} \psi_{\alpha} - (1-f_{\alpha_v}) \psi_{\beta}]_{t'}, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

---

so dass aus Gl. (B.7) im Elektron-Loch-Bild

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\psi_\alpha = & - \sum_{\beta, \mathbf{q}} \sum_{1 \neq 2} |M_{\alpha, \beta}(\mathbf{q})|^2 \int_{-\infty}^t dt' G_{0, \alpha_2}^R(t-t') G_{0, \beta_1}^R(t-t') \\
& * \left\{ [\psi_\alpha f_{\beta_1} - \psi_\beta f_{\alpha_2}]_{t'} \left( N e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + (N+1) e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right) \right. \\
& \left. + [\psi_\alpha (1 - f_{\beta_1}) - \psi_\beta (1 - f_{\alpha_2})]_{t'} \left( (N+1) e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + N e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right) \right\}
\end{aligned} \tag{B.12}$$

folgt.

Mit Ausnahme, dass hier die freien statt der vollen Green's Funktionen vorkommen, entspricht sowohl das Ergebnis der Besetzungsstreuung als auch das des Dephasings gerade dem Ergebnis der Rechnungen mit Green's Funktionen. Dies entspricht einer Selbstenergie

$$\Sigma = G_0 D, \tag{B.13}$$

bei der im Vergleich zur polaronischen Selbstenergie in RPA-Näherung die volle durch die freie Green's Funktion ersetzt wurde, wodurch sämtliche Renormierungen der Elektron-Phonon-Streuung und polaronischen Eigenschaften (s. Kap. 4) nicht behandelt werden.

# C Numerik und Parameter

## C.1 Elektron-Loch-Bild

Im Elektron-Loch-Bild wird im Valenzband ( $v$ ), das im Grundzustand voll besetzt ist, nicht die Besetzung, sondern die Nicht-Besetzung, also das Fehlen von Elektronen, betrachtet. Das Fehlen von einem solchen Elektron wird dabei als Loch ( $h$ ) bezeichnet und als Quasiteilchen betrachtet. Dies bedeutet

$$f_{\alpha_h} = 1 - f_{\alpha_v} , \quad (\text{C.1})$$

$$\epsilon_{\alpha_h} = -\epsilon_{\alpha_v} . \quad (\text{C.2})$$

Hingegen wird im Leitungsband ( $c$ ) weiterhin die Besetzung der Elektronen ( $e$ ) betrachtet

$$f_{\alpha_e} = f_{\alpha_c} , \quad (\text{C.3})$$

$$\epsilon_{\alpha_e} = \epsilon_{\alpha_c} . \quad (\text{C.4})$$

## C.2 Exzitonische Einheiten

Exzitonische Einheiten werden verwendet, um dimensionslos rechnen zu können. Reziproke Vektoren werden als Produkt mit dem exzitonischen Bohrradius  $a_0$  angegeben

$$\mathbf{x} = a_0 \cdot \mathbf{k} \quad (\text{C.5})$$

und Energien als Vielfaches der exzitonischen Grundzustandsenergie  $E_B$

$$E' = \frac{E}{E_B} . \quad (\text{C.6})$$

Dabei gilt

$$E_B = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \quad (\text{C.7})$$

sowie

$$a_0 E_B = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0\epsilon_\infty}{\mu e^2} , \quad (\text{C.8})$$

wobei  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante des Vakuums,  $\epsilon_\infty$  die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante,  $m$  die freie Elektronenmasse und  $e$  die Elementarladung ist.



## C.3 Numerische Methoden

Zur Durchführung der numerischen Berechnungen wird die Zeit in fs-Schritte diskretisiert. Auch werden die quasikontinuierlichen Zustände der Benetzungsschicht diskretisiert, wobei es aufgrund der Rotationssymmetrie in der Wachstumsebene ausreicht, den Betrag des Impulses zu betrachten.

Zur Integration wird entweder linear zwischen den Stützstellen interpoliert (Trapezverfahren) oder das GTS-Verfahren angewendet. Beim GTS-Verfahren werden nicht-äquidistante Stützstellen verwendet, deren Dichte zu den Integrationsgrenzen  $a, b$  hin zunimmt. Dabei ergibt sich für  $N$  Stützstellen

$$x_j = \left( \frac{j}{N+1} - \frac{1}{2\pi} \sin \left( \frac{2\pi j}{N+1} \right) \right) (b - a) + a. \quad (\text{C.9})$$

Dieses Verfahren eignet sich besonders für die Integration von trigonometrischen Funktionen oder Polstellen an den Integrationsgrenzen.

Zur Lösung der Differentialgleichungen wird hier das Prädiktor-Korrektor-Verfahren dritter Ordnung verwendet, das in [19] detailliert beschrieben ist. Dieses eignet sich besonders für die Lösung von Differentialgleichungen mit Memoryintegralen, da deren Berechnung aufgrund der Zeitdiskretisierung auch von den Werten des zu berechnenden Zeitschritts abhängt. Eben diese Werte werden beim Prädiktor-Korrektor-Verfahren in einem ersten Schritt genähert (Prädiktor), so dass für die Memoryintegrale ein aktueller Wert verfügbar ist, bevor der endgültige Wert (Korrektor) bestimmt wird.

## C.4 Verwendete Parameter und Konstanten

Folgende Parameter und Konstanten wurden für die Berechnungen verwendet:

Parameter:

LO-Phononenenergie	$\hbar\omega_{LO}$	$36\text{meV}$
exzitonische Bindungsenergie	$E_B$	$4,036\text{meV}$
exzitonischer Bohrradius	$a_0$	$14,277\text{nm}$
Fröhlich-Kopplungskonstante	$\alpha$	$0,06$
effektive Elektronenmasse	$m_e$	$0,067m_0$
effektive Lochmasse	$m_h$	$0,150m_0$
Quantenpunktdichte	$n_{QD}$	$10^{10}\text{cm}^{-3}$
Höhe der Quantenpunkte	$L_{QD}$	$4,3\text{nm}$
Höhe der Benetzungsschicht	$L_{WL}$	$2,2\text{nm}$
Energie der s-Schalen Elektronen	$\epsilon_s^e$	$-2,2\hbar\omega_{LO}$
Energie der p-Schalen Elektronen	$\epsilon_p^e$	$-1,1\hbar\omega_{LO}$
Energie der s-Schalen Löcher	$\epsilon_s^h$	$-0,8\hbar\omega_{LO}$
Energie der p-Schalen Löcher	$\epsilon_p^h$	$-0,4\hbar\omega_{LO}$

## D Literaturverzeichnis

- [1] Banyai, L. et al.: *Self-consistent RPA retarded polaron Green function for quantum kinetics*, Eur. Phys. J. B **1**, 209 (1998).
- [2] Bear, N.: *Optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantenpunkten*, Universität Bremen: Diplomarbeit, 2003.
- [3] Bronstein, I.N. et al.: *Taschenbuch der Mathematik*, Frankfurt a.M.: Harri Deutsch, 2005.
- [4] Cohen-Tannoudji, C. et al.: *Quantum Mechanics - Volume One*, Paris: John Wiley & Sons, 1977.
- [5] Czycholl, G.: *Theoretische Festkörperphysik*, Braunschweig: Vieweg, 2000.
- [6] Förster, J. et al.: *Phonon-induced damping of Rabi oscillations in semiconductor quantum dots*, phys. stat. sol. (b) **238**, 419 (2003).
- [7] Förster, J. et al.: *Phonon-Assisted Damping of Rabi Oscillations in Semiconductor Quantum Dots*, Phys. Rev. Let. **91**, 127401 (2003).
- [8] Gardner, P. et al.: *Two-time electron-LO-phonon quantum kinetics and the generalized Kadanoff-Baym approximation*, Phys. Rev. B **60**, 14234 (1999).
- [9] Gardner, P. et al.: *Relaxation properties of the quantum kinetics of carrier-LO-phonon interaction in quantum wells and quantum dots*, Phys. Rev. B **73**, 115307 (2006).
- [10] Haug, H.; Jauho, A.-P.: *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Berlin: Springer, 1996.
- [11] Haug, H.; Koch, S.: *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, Singapore: World Scientific, 1990.
- [12] Jacobi, K.: *Atomic structure of InAs quantum dots on GaAs*, Progress in Surface Science **71**, 185 (2003).
- [13] Jahnke, F.: *Theoretische Festkörperphysik II*, Universität Bremen: Vorlesungsmitschrift, 2007.
- [14] Lipavsky, P. et al.: *Generalized Kadanoff-Baym ansatz for deriving quantum transport equations*, Phys. Rev. B **34**, 6933 (1986).
- [15] Lorke, M.: *Vielteilchen-Coulomb-Effekte in den optischen Spektren von Halbleiter-Quantenpunktstrukturen*, Universität Bremen: Diplomarbeit, 2004.

- 
- [16] Mahan, G. D.: *Many-Particle Physics*, New York: Plenum Press, 1981.
- [17] Meystre, P.; Sargent, M.: *Elements of Quantum Optics*, Berlin: Springer-Verlag, 1990.
- [18] Nolting, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 7 Viel-Teilchen-Theorie*, Braunschweig: Vieweg, 1997.
- [19] Press, W.: *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*, Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- [20] Sauvage, S. et al.: *Long Polaron Lifetime in InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots*, Phys. Rev. B **88**, 177402 (2002).
- [21] Schäfer, W.; Wegener, M.: *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*, Berlin: Springer, 2002.
- [22] Seebeck, J.: *Quantenkinetische Beschreibung von Polaronen in Halbleiter-Quantenpunkten*, Universität Bremen: Diplomarbeit, 2004.
- [23] Shah, J.: *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, Berlin: Springer, 1996.
- [24] Vogel, W.; Welsch, D.-G.: *Quantum Optics - An Introduction*, Berlin: Wiley-VCH Verlag, 2001.