

Coulomb-Streuung in Halbleiter-Quantenfilmen

Studienarbeit

von

Michael Lorke

angefertigt am

Institut für Theoretische Physik

der Universität Bremen

18. November 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Theoretische Beschreibung	7
2.1	Modell und Hamilton-Operator	7
2.1.1	Freier Hamiltonoperator	7
2.1.2	Hamiltonoperator der Coulomb-Wechselwirkung	8
2.2	Heisenberg-Bew.Gl. für Feldoperatoren	10
2.3	Dichtematrixformalismus	11
2.4	Hartree-Fock-Näherung	13
2.5	Korrelationen	14
2.5.1	Markov-Näherung	15
2.6	Übergang zum Elektron-Loch-Bild	15
2.7	Abschirmung der Coulomb Wechselwirkung	18
2.8	Halbleiter-Bloch-Gleichungen	19
3	Numerische Methoden	21
3.1	Materialparameter	21
3.2	Runge-Kutta-Verfahren	21
3.3	GTS-Stützstellen	22
4	Ergebnisse	25
4.1	Lineares Spektrum	25
4.2	Halbleiter-Bloch-Gl. in Hartree-Fock-Näherung	26
4.3	Halbleiter-Bloch-Gl. mit Korrelationstermen	29
4.3.1	Lineare Antwort eines wechselwirkenden Elektron-Loch- Systems im Gleichgewicht auf ein schwaches Lichtfeld .	29
4.3.2	Korrelationen durch optisch generierte Ladungsträger .	31
5	Zusammenfassung und Ausblick	35
6	Danksagung	37

A	Streuterme in 2. Bornscher Näherung	39
A.1	Bew.Gl. für f_k^c nach Gleichung (2.12)	39
A.1.1	Erster Term	39
A.1.2	Zweiter Term	46
A.1.3	Zusammenfassung	48
A.2	Bew.Gl. für ψ_k nach Gleichung (2.14)	49
A.2.1	Erster Term	49
A.2.2	Zweiter Term	51
A.2.3	Dritter Term	57
A.2.4	Vierter Term	59
A.2.5	Zusammenfassung	61

Kapitel 1

Einleitung

In den letzten Jahren hat die Bedeutung niederdimensionaler Strukturen für die Halbleiteroptik stark zugenommen. Viele optoelektronische Bauelemente werden heute auf der Basis nanostrukturierter Materialien realisiert. Die bisher häufigsten Vertreter sind Halbleiter-Quantenfilme, auf die sich diese Studienarbeit konzentriert. Quantenfilme haben inzwischen ein breites technologisches Anwendungsspektrum, so arbeiten z.B. so gut wie alle kommerziell erhältlichen Laserdioden auf Quantenfilmbasis. Unter einem Quantenfilm versteht man dabei ein System, das aus einer wenige Nanometer dünnen mittleren Schicht (dem eigentlichen Quantenfilm) und zwei Deckschichten besteht, wobei diese eine höhere Bandlücke aufweisen als der Quantenfilm. Dadurch wird in der Raumdimension senkrecht zum Quantenfilm ein Ladungsträgereinschluß erreicht, der die optischen und elektronischen Eigenschaften des Systems in kontrollierter Weise beeinflusst.

Auf der anderen Seite handelt es sich bei hochangeregten Halbleitern um ein System, dessen Eigenschaften wesentlich durch die Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger bestimmt werden. Das Verständnis der Renormierung der elektronischen Zustände durch Coulomb-Effekte sowie die Ladungsträgerstreuung und das Dephasieren einer optisch induzierten Polarisation sind von grundlegendem Interesse für die Entwicklung und Optimierung neuer Bauelemente. Außerdem handelt es sich um ein physikalisch interessantes System, bei dem zeitlich nichtstationäre Zustände fernab von thermodynamischen Gleichgewicht untersucht werden müssen.

In dieser Arbeit soll auf der Basis einer *mikroskopischen* Beschreibung die Relaxation optisch generierter Ladungsträger und das Dephasieren der im Medium induzierten makroskopischen Polarisation untersucht werden. Hierzu wird im zweiten Kapitel das Modellsystem vorgestellt, der Hamilton-Operator wird in einer geeigneten Basis formuliert und es werden Bewegungsgleichungen aufgestellt. Im dritten Kapitel sollen die numerischen Me-

thoden vorgestellt werden, mit denen die Rechnungen der im vierten Kapitel enthaltenen Ergebnisse auf einem Supercomputer (Cray T3E) durchgeführt wurden. Der Anhang stellt die genaue Ableitung der im zweiten Kapitel angegebenen Streuterme dar, die dort den Lesefluß behindern würden.

Das hier untersuchte Problem wurde schon sowohl mit Bewegungsgleichungsmethoden ([5, 6, 7, 9, 10]), als auch mit der Methode der Green'schen Funktionen [3, 4, 8] studiert. Allerdings wurden dabei meistens einige Terme (wie z.B. die Austausch- oder Elektron-Loch-Korrelationsterme) vernachlässigt. In dieser Arbeit soll der einfachere Zugang über die Bewegungsgleichungsmethoden nachvollzogen werden, wobei allerdings genaue Vergleiche der Effekte, die sich durch die Vernachlässigung der obengenannten Terme ergeben, nicht Inhalt der Arbeit sein sollen. Ziel der Arbeit ist vielmehr, im Sinne einer systematischen Aufarbeitung obengenannter Publikationen, alle Terme, die sich in 2. Ordnung im abgeschirmten Potential im Rahmen der Markov-Näherung ergeben, mitzuberechnen.

Kapitel 2

Theoretische Beschreibung

2.1 Modell und Hamilton-Operator

In dieser Arbeit wird die Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger in einem als Zweibandsystem modellierten Quantenfilm (im folgenden "QW" von "Quantum Well") quantenmechanisch beschrieben, wobei der QW als ideal angenommen wird. Dies bedeutet, daß die Eigenfunktionen des Einteilchen-Hamilton-Operators als Bloch-Funktionen in der Ebene senkrecht zu den Grenzflächen des QW, und als Eigenfunktionen eines unendlich tiefen Potentialtopfes in der Wachstumsrichtung (im folgenden als z-Richtung bezeichnet) angenommen werden.

Um dies zu erreichen, soll zuerst der Hamilton-Operator des Problems formuliert und in eine problemadäquate Form gebracht werden. Da sich der Hamilton-Operator additiv aus den freien Anteilen der Elektronen und Löcher sowie der Elektron-Elektron-, Loch-Loch- und Elektron-Loch-Wechselwirkung zusammensetzt, kann man die Beiträge dieser Terme beim Übergang zur Bloch-Basis und bei der Berechnung von Kommutatoren für die Heisenberg-Bewegungsgleichungen getrennt betrachten, und nach der Rechnung wieder zusammenfügen.

2.1.1 Freier Hamiltonoperator

Der Hamilton-Operator für nicht wechselwirkende Elektronen im Kristall schreibt sich in 2. Quantisierung

$$H_0 = \sum_s \int d^3r \psi_s^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \psi_s(\vec{r}),$$

wobei $U(\vec{r})$ das gitterperiodische Potential darstellt. Da wir das Kristallgitter mit berücksichtigen, werden die Feldoperatoren $\psi_s^\dagger(\vec{r})$ und $\psi_s(\vec{r})$ nach Bloch-

Funktionen innerhalb des QW entwickelt

$$\begin{aligned}\psi_s(\vec{r}, t) &= \sum_{\vec{k}_{||}, \nu} a_{\vec{k}_{||}, \nu, s}(t) \varphi_{\vec{k}_{||}, \nu, s}(\vec{r}), \\ \varphi_{\vec{k}_{||}, \nu, s}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{A}} \xi_n(z) e^{i\vec{k}_{||}\vec{\rho}} u_{\lambda, 0}(\vec{r}),\end{aligned}\tag{2.1}$$

wobei der Index $\vec{k}_{||}$ den Wellenvektor in der Quantenfilmebene bezeichnet. Die Fläche des QW ist dabei mit A bezeichnet, während seine Dicke in den folgenden Formeln mit L bezeichnet ist. Der Vektor $\vec{\rho}$ ist ein zweidimensionaler Vektor, der senkrecht zur z -Richtung orientiert ist. Die Funktionen $\xi_n(z)$ und $u_{\lambda, 0}(\vec{r})$ stellen die Eigenfunktionen zur z -Koordinate des QW und den gitterperiodischen Bloch-Faktor dar, wobei bei letzterem nur der $k = 0$ Beitrag mitgenommen wird, da optische Übergänge in der Nähe des Γ -Punktes untersucht werden. Der Index ν steht für die Indices λ und n , wobei der Bandindex λ für unser Zweibandmodell über die Indexmenge $\{c, v\} = \{\text{Leitungs-, Valenzband}\}$ läuft, während der Subband-Index n die Energieniveaus des "Potentialtopfes" in z -Richtung nummeriert. Im Rahmen dieser Arbeit wird *grundsätzlich* nur das unterste Subband betrachtet, da die Energien der anderen Subbänder im Vergleich zu den auftretenden Energien groß sind.

Wenn man diese Entwicklung einsetzt und die Orthonormalitätsbedingungen der Bloch-Funktionen berücksichtigt, erhält man

$$H_0 = \sum_{\vec{k}_{||}, \nu, s} E_{\vec{k}_{||}, \nu, s} a_{\vec{k}_{||}, \nu, s}^\dagger a_{\vec{k}_{||}, \nu, s} \quad E_{\vec{k}_{||}, \nu, s} = \frac{\hbar^2 \vec{k}_{||}^2}{2m_\lambda}.\tag{2.2}$$

2.1.2 Hamiltonoperator der Coulomb-Wechselwirkung

Der Hamilton-Operator der Coulomb-Wechselwirkung schreibt sich in 2. Quantisierung

$$H_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \psi_s^\dagger(\vec{r}) \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{s'}(\vec{r}') \psi_s(\vec{r})$$

mit dem Coulomb-Potential

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Unter Verwendung der Entwicklung der Feldoperatoren wie in Gleichung (2.1) und der Fourier-Transformierten des Coulomb-Potentials

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} V_{\vec{q}},$$

$$V_{\vec{q}} = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2},$$

ergibt sich der Hamilton-Operator in folgenden Schritten: Zuerst werden die Entwicklungen der Feldoperatoren in den Hamilton-Operator H_{WW} eingesetzt. Dann nimmt man an, daß die e-Funktionen innerhalb einer Gitterzelle konstant sind und führt Volumenintegrale über Einheitszellen mit Bloch-Funktionen aus, die ein Kronecker-Delta im Band-Index ergeben. Danach führt man die Integrale über die e-Funktionen in $\vec{\rho}$ aus, die Delta-Funktionen bezüglich der Wellenzahlvektoren liefern, womit die Impulserhaltung schon in die Gleichungen eingebaut ist. Schließlich nimmt man eine Fourier-Rücktransformation bezüglich q_z vor. Damit erhält man

$$H_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \sum_{\lambda,\lambda',\nu_1,\nu_4} \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||}, \vec{q}_{||}} V_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4}(\vec{q}_{||})$$

$$a_{\vec{k}_{||},\nu_1,\lambda,s}^\dagger a_{\vec{k}'_{||},\nu_2,\lambda',s'}^\dagger a_{\vec{k}'_{||}+\vec{q}_{||},\nu_3,\lambda',s'} a_{\vec{k}_{||}-\vec{q}_{||},\nu_4,\lambda,s} \quad (2.3)$$

$$V_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4}(\vec{q}_{||}) = \frac{e^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{q_{||}} \int dz \int dz' \xi_{\nu_1}^*(z) \xi_{\nu_2}^*(z') e^{-q_{||}|z-z'|} \xi_{\nu_3}(z') \xi_{\nu_4}(z),$$

wobei $V_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4}(\vec{q}_{||})$ die QW-Coulomb-Matrixelemente sind. Für das in dieser Arbeit betrachtete unterste Subband ($\nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = \nu_4 = 1$) erhält man für einen "unendlich hohen" Potentialtopf in z-Richtung mit $\xi_\nu(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{\nu\pi z}{L})$

$$V_{1,1,1,1}(\vec{q}_{||}) = \frac{e^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{q_{||}} F_{q_{||}}$$

$$F_{q_{||}} = \frac{2}{q_{||}L} + \frac{q_{||}L}{(q_{||}L)^2 + 4\pi^2} + 2(e^{-q_{||}L} - 1) \left(\frac{1}{q_{||}L} - \frac{q_{||}L}{(q_{||}L)^2 + 4\pi^2} \right)^2, \quad (2.4)$$

d.h. das "normale" 2D-Coulomb-Matrixelement (siehe [2]) mit einer Korrektur durch einen Formfaktor. Dies stellt die Grundlage für die weiteren Betrachtungen dar.

2.2 Heisenberg-Bewegungsgleichungen für Feldoperatoren

In diesem Abschnitt steht die Quantenzahl k für den Satz $\{\vec{k}_{||}, s\}$, wobei s der Spin der Elektronen ist. Der Hamiltonoperator für wechselwirkungsfreie Elektronen im Valenz- und Leitungsband lautet nach Abschnitt 2.1

$$H_0 = \sum_k \left[E_k^c c_k^\dagger c_k + E_k^v v_k^\dagger v_k \right],$$

wobei die Bezeichnungen $a_{k,c} = c_k, a_{k,v} = v_k$ eingeführt wurden. Mit der weiteren Abkürzung $V_q = V_{1,1,1,1}(\vec{q}_{||})$ folgt für den Hamiltonoperator der Ladungsträger-Ladungsträger-Wechselwirkung

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} V_q \left[c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k'+q} c_{k-q} + v_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k'+q} v_{k-q} + 2c_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k-q} \right].$$

Der Gesamt-Hamiltonoperator ergibt sich als

$$H = H_0 + H_{WW}. \quad (2.5)$$

Die Heisenberg-Bewegungsgleichung für c_k ist

$$\frac{d}{dt} c_k = \frac{i}{\hbar} [H, c_k]. \quad (2.6)$$

Der Anteil von H_0 ergibt sich als

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_k|_0 &= \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{k'} \left(E_{k'}^c c_{k'}^\dagger c_{k'} + E_{k'}^v v_{k'}^\dagger v_{k'} \right), c_k \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} E_k^c c_k, \end{aligned}$$

während man für den Anteil von H_{WW}

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_k|_{WW} &= \frac{i}{\hbar} [H_{WW}, c_k] \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',k',q} V_q \left[\left(\frac{1}{2} c_{k''}^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k'+q} c_{k''-q} + c_{k''}^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k''-q} \right), c_k \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left(c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} - v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k-q} \right) \end{aligned}$$

erhält. Damit ergibt sich insgesamt

$$\frac{d}{dt}c_k = \frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left(c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} - v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k-q} \right) - \frac{i}{\hbar} E_k^c c_k. \quad (2.7)$$

Durch Adjungieren folgt die entsprechende Gleichung für c_k^\dagger :

$$\frac{d}{dt}c_k^\dagger = -\frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left(c_{k'-q}^\dagger c_{k+q}^\dagger c_{k'} - c_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} \right) + \frac{i}{\hbar} E_k^c c_k^\dagger. \quad (2.8)$$

Die Bewegungsgleichungen für v_k (v_k^\dagger) erhält man durch Vertauschen von c_k und v_k (c_k^\dagger und v_k^\dagger), da der Hamiltonian symmetrisch in c und v ist. Dies sieht man am Leitungsband-Leitungsband-, Valenzband-Valenzband-Wechselwirkungsterm und am freien Hamilton-Operator direkt, im Leitungsband-Valenzband-Wechselwirkungsterm hingegen durch Vertauschung von c_k^\dagger, v_k^\dagger und c_k, v_k und Indexumbenennung ($k \leftrightarrow k', q \rightarrow -q$). Entsprechend folgen

$$\frac{d}{dt}v_k = \frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left(v_{k'}^\dagger v_{k+q} v_{k'-q} - c_{k'}^\dagger c_{k'+q} v_{k-q} \right) - \frac{i}{\hbar} E_k^v v_k \quad (2.9)$$

und

$$\frac{d}{dt}v_k^\dagger = -\frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left(v_{k'-q}^\dagger v_{k+q}^\dagger v_{k'} - v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right) + \frac{i}{\hbar} E_k^v v_k^\dagger. \quad (2.10)$$

2.3 Dichtematrixformalismus

Um zu Aussagen für physikalisch meßbare Größen zu gelangen, werden in diesem Abschnitt Bewegungsgleichungen für die Elemente der Dichtematrix des 2-Band-Systems

$$\rho_k = \begin{pmatrix} \langle c_k^\dagger c_k \rangle & \langle c_k^\dagger v_k \rangle \\ \langle v_k^\dagger c_k \rangle & \langle v_k^\dagger v_k \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_k^c & \psi_k^* \\ \psi_k & f_k^v \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

formuliert. Dabei bezeichnen $f_k^{c,v}$ die Besetzung des Zustandes k im Leitungs- bzw. Valenzband und ψ_k die Übergangsamplitude zwischen den Bändern. Diese Größen bilden die Grundlage für die weitere Beschreibung. Zuerst sollen Bewegungsgleichungen für die Diagonalelemente der Dichtematrix, aus der sich Eigenschaften wie die Ladungsträgerdichte oder die mittlere kinetische

Energie der Ladungsträger bestimmen lassen, abgeleitet werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{df_k^c}{dt} &= \left\langle \frac{dc_k^\dagger}{dt} c_k \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger \frac{dc_k}{dt} \right\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left[\left\langle c_{k'-q}^\dagger c_{k+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle - \left\langle c_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \right] + \frac{i}{\hbar} E_k^c \left\langle c_k^\dagger c_k \right\rangle \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left[\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle - \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k-q} \right\rangle \right] - \frac{i}{\hbar} E_k^c \left\langle c_k^\dagger c_k \right\rangle \\
&= -\frac{2}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \operatorname{Im} \left[\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle - \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k-q} \right\rangle \right] \\
&= -\frac{2}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \operatorname{Im} \left[\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right].
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Ebenso wie für die Feldoperatoren folgt die Bewegungsgleichung für f_k^v durch vertauschen von c_k^\dagger, v_k^\dagger und c_k, v_k

$$\begin{aligned}
\frac{df_k^v}{dt} &= \left\langle \frac{dv_k^\dagger}{dt} v_k \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger \frac{dv_k}{dt} \right\rangle \\
&= -\frac{2}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \operatorname{Im} \left[\left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle - \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k'+q} v_{k-q} \right\rangle \right] \\
&= -\frac{2}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \operatorname{Im} \left[\left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger v_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right].
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Die Übergangsamplitude ψ bestimmt kohärente optische Eigenschaften des Systems (z.B die optisch induzierte makroskopische Polarisierung) und ist daher eine weitere wichtige Größe, deren Zeitentwicklung untersucht werden

soll. Für die Bewegungsgleichung ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{d\psi_k}{dt} &= \left\langle \frac{dv_k^\dagger}{dt} c_k \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger \frac{dc_k}{dt} \right\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar} [E_k^v - E_k^c] \psi_k \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left[\left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \right. \\
&\quad \left. - \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k'+q} c_{k-q} \right\rangle - \left\langle v_{k'-q}^\dagger v_{k+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \right] \\
&= \frac{i}{\hbar} [E_k^v - E_k^c] \psi_k \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{k',q} V_q \left[\left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \right]
\end{aligned} \tag{2.14}$$

2.4 Hartree-Fock-Näherung

Die Bewegungsgleichung für die Zweier-Erwartungswerte (z.B. $\langle c^\dagger c \rangle$) koppelt an einen Vierer-Erwartungswert (z.B. $\langle c^\dagger c^\dagger c c \rangle$), dessen Bewegungsgleichung wieder an einen Sechser-Erwartungswert koppelt. Um dieses Hierarchie-Problem zu lösen und das Gleichungssystem auf dieser Ebene abzuschließen, faktorisiert man den Vierer-Erwartungswert zu zwei Zweier-Erwartungswerten, wobei man immer Paare aus einem Erzeuger und einem Vernichter bildet. Diese Faktorisierung wird als Hartree-Fock-Faktorisierung bezeichnet. Für ein einkomponentiges Elektronengas im räumlich homogenen Fall entspricht das Ergebnis gerade der aus der Methode des selbstkonsistenten Potentials begründeten Hartree-Fock-Näherung (siehe [12]). Am Beispiel eines Terms erhält man

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= - \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} + \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} \\
&= f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}.
\end{aligned}$$

Im räumlich homogenen System hat der Hartree-Term nur einen $q=0$ -Beitrag. Der Beitrag dieses Terms zum Integral in der Bewegungsgleichung ist allerdings infinitesimal klein und daher zu vernachlässigen. Das Verschwinden des Hartree-Terms ist die Folge der Wechselwirkung der Elektronen mit dem positiven Ladungshintergrund der Ionen im Kristallgitter, wenn im Rahmen

des Jellium-Modells ([1]) zur Vereinfachung der Beschreibung des Elektronengases ein homogen ausgeschmierter Ladungshintergrund verwendet wird.

2.5 Korrelationen

Um Korrelationen jenseits der Hartree-Fock-Näherung mit zu berücksichtigen, spaltet man den Hartree-Fock-Beitrag vom Vierer-Erwartungswert ab. Damit erhält man am Beispiel des obigen Terms

$$\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle = f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle$$

Die Bewegungsgleichung für die Korrelationsbeiträge lautet mit den Gleichungen (2.7)-(2.10)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= \left\langle \frac{dc_k^\dagger}{dt} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger \frac{dc_{k'}^\dagger}{dt} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\ &+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger \frac{dc_{k+q}}{dt} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} \frac{dc_{k'-q}}{dt} \right\rangle \\ &- \frac{d}{dt} f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q} \\ &= \frac{i}{\hbar} [E_k^c + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c] \left[f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right] \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k''}^\dagger c_{k'-q+q''} c_{k''-q''} \right\rangle \right. \\ &+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k''}^\dagger c_{k+q+q''} c_{k''-q''} c_{k'-q} \right\rangle \\ &- \left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''}^\dagger c_{k'+q''}^\dagger c_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\ &- \left. \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right] \\ &- \frac{d}{dt} f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}. \end{aligned}$$

Hierbei ist zu bemerken, daß sich der Term $\frac{i}{\hbar} \Delta E f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}$ mit den homogenen Beiträgen aus dem letzten Term $\frac{d}{dt} f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}$ weghebt. Die inhomogenen Beiträge dieses letzten Terms werden im folgenden vernachlässigt.

Um das Gleichungssystem auf dieser Ebene abzuschließen, muß man die hier auftretenden Sechser-Erwartungswerte faktorisieren. Dies geschieht, indem man in Produkte aus Zweier-Erwartungswerte faktorisiert. Dabei wird, um

zu einem geschlossenen Gleichungssystem in f_k^c, f_k^v und ψ_k zu gelangen, das keine Zeitintegrale mehr enthält, die Markov-Näherung angewendet, die im folgenden Abschnitt kurz besprochen werden soll. Wenn man das macht, erhält man die Streuterme in Zweiter Born'scher Näherung. Diese sind an dieser Stelle noch nicht explizit aufgeführt, da sie im weiteren im Elektron-Loch-Bild verwendet werden, das in Abschnitt 2.6 besprochen wird.

Da nur in Produkte aus Zweier-Erwartungswerten und nicht zusätzlich in Produkte aus Vierer- und Zweier-Erwartungswerten faktorisiert wird gibt es keine homogenen Beiträge zu der Bewegungsgleichung für den Vierer-Erwartungswert aus den Faktorisierungen. Dies bedeutet, daß die Energien nicht renormiert werden, so daß wir in einer Näherung arbeiten, bei der die Energien in den Streutermen freie Energien für Elektronen und Löcher sind. Die Rechnung inklusive der Durchführung der Faktorisierungen ist Inhalt des Anhangs.

2.5.1 Markov-Näherung

Für eine Differentialgleichung der Form

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}\Delta EA(t) + \frac{i}{\hbar}B(t),$$

die bei der Bewegungsgleichung für den Vierer-Erwartungswert auftritt, kann man eine formale Lösung in folgender Form angeben

$$A(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}\Delta E(t-t')} B(t').$$

Diesen Ausdruck nähert man dadurch an, daß man den Faktor $B(t')$ vor das Integral zieht, was der Annahme einer schwachen Zeitabhängigkeit dieses Ausdrucks entspricht und anschließend den Exponentialterm exakt ausintegriert. Man erhält dann unter Verwendung der Dirac-Identität $\frac{1}{E+i\epsilon} = P(\frac{1}{E}) - i\pi\delta(E)$

$$A(t) = \left(i\pi\delta(\Delta E) - P\left(\frac{1}{\Delta E}\right) \right) B(t). \quad (2.15)$$

Dabei ist mit $P(\frac{1}{E})$ das Hauptwertintegral bezeichnet, was deutlich macht, das die Dirac-Identität nur unter einem Integral definiert ist.

2.6 Übergang zum Elektron-Loch-Bild

Der Übergang zum Elektron-Loch-Bild geschieht durch folgende Ersetzungen:

- $f_k^c \rightarrow f_k^e$
- $f_k^v \rightarrow 1 - f_{-k}^h$
- $E_k^c \rightarrow E_k^e$ und $E_k^v \rightarrow -E_k^h$

Im Elektron-Loch-Bild lauten die Streuterme in 2. Born'scher Näherung

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t}|_{Scatt.} = -S_k^{DD} + S_k^{OD} \quad (2.16)$$

mit

$$\begin{aligned} S_k^{DD} &= \frac{1}{\hbar} \sum_{a,b} \frac{1}{A^2} \sum_{q,k''} g(E_k^a + E_{k''+q}^b - E_{k''}^b - E_{k+q}^a) [2W_q^2 - \delta_{a,b} W_q W_{k-k''}] \\ &\quad \psi_k [(1 - f_{k''+q}^b) f_{k''}^b f_{k+q}^a + f_{k''+q}^b (1 - f_{k''}^b) (1 - f_{k+q}^a) - \psi_{k''+q}^* \psi_{k''}] \\ S_k^{OD} &= \frac{1}{\hbar} \sum_{a,b} \frac{1}{A^2} \sum_{q,k''} g(-E_k^a - E_{k''+q}^b + E_{k''}^b + E_{k+q}^a) [2W_q^2 - \delta_{a,b} W_q W_{k-k''}] \\ &\quad \psi_{k+q} [(1 - f_k^a) (1 - f_{k''+q}^b) f_{k''}^b + f_k^a f_{k''+q}^b (1 - f_{k''}^b) - \psi_{k''+q}^* \psi_{k''}] \end{aligned}$$

und

$$\frac{\partial f_k^a}{\partial t}|_{Scatt.} = S_{a,k}^f + S_{a,k}^{DD} + S_{a,k}^{OD} \quad (2.17)$$

mit

$$\begin{aligned} S_{a,k}^f &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b \frac{1}{A^2} \sum_{q,k''} \delta(E_k^a + E_{k''+q}^b - E_{k''}^b - E_{k+q}^a) [2W_q^2 - \delta_{a,b} W_q W_{k-k''}] \\ &\quad [(1 - f_k^a) (1 - f_{k''+q}^b) f_{k''}^b f_{k+q}^a - f_k^a f_{k''+q}^b (1 - f_{k''}^b) (1 - f_{k+q}^a)] \\ S_{a,k}^{f,OD} &= \frac{2}{\hbar} \sum_b \frac{1}{A^2} \sum_{q,k''} g(E_k^a + E_{k''+q}^b - E_{k''}^b - E_{k+q}^a) [2W_q^2 - \delta_{a,b} W_q W_{k-k''}] \\ &\quad \text{Re} ([f_k^a - f_{k+q}^a] \psi_{k''+q} \psi_{k''}^*) \\ S_{a,k}^{f,DD} &= \frac{2}{\hbar} \sum_b \frac{1}{A^2} \sum_{q,k''} g(E_k^a + E_{k''+q}^b - E_{k''}^b - E_{k+q}^a) [2W_q^2 - \delta_{a,b} W_q W_{k-k''}] \\ &\quad \text{Re} ([f_{k''}^b - f_{k''+q}^b] \psi_k \psi_{k+q}^*), \end{aligned}$$

wobei die Funktion $g(\omega)$ durch

$$g(\omega) = \frac{i}{\omega + i\gamma} = \frac{\gamma}{\omega^2 + \gamma^2} + i \frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2} = \pi \delta_\gamma(\omega) + i \frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2}$$

definiert ist. Die Indices $\{a,b\}$ laufen über den Wertebereich $\{e,h\}$, also über Elektronen und Löcher.

In den Gleichungen für f_k und ψ_k hat man in allen Beiträgen den Term $\delta(\Delta E)$, der die Energieerhaltung sichert. Die Impulserhaltung ist, wie in Abschnitt 2.1.2 erwähnt, bereits ausintegriert. In allen Summanden treten Beiträge der direkten Coulomb-Wechselwirkung proportional zu $2W_q^2$, wobei die Summe über die z-Komponente des Spins durch den Faktor "2" bereits explizit berücksichtigt ist, sowie Austausch-Beiträge proportional zu $\delta_{a,b}W_qW_{k-k''}$, bei denen das Kronecker-Delta sicherstellt, daß nur Elektronen mit Elektronen und Löcher mit Löchern gekoppelt werden, auf. Die Namen "direkter Term" und "Austausch-Term" sind dabei Diagrammen aus der Technik der Green'schen Funktionen entliehen, in der man diese Terme mit dem GKB-Ansatz (Generalised Kadanoff-Baym Ansatz) in der Markov-Näherung erhält. Während in den abgeleiteten Gleichungen zunächst unabgeschirmte Coulomb-Matrixelemente auftraten, wurden diese hier bereits durch Matrixelemente des abgeschirmten Potentials W_q ersetzt. Eine Diskussion der Abschirmung folgt im nächsten Abschnitt.

Der Term $S_{a,k}^f$ der f -Gleichung hat die Struktur

$$S_{a,k}^f = (1 - f_k)S_k^{\text{in}} - f_k S_k^{\text{out}},$$

die dafür sorgt, daß nicht aus einem leeren Zustand hinaus oder in einen vollen Zustand hineingestreut werden kann. Die Ein- und Ausstreuraten $S_k^{\text{in}}, S_k^{\text{out}}$ beschreiben Zwei-Teilchen-Stöße der Ladungsträger. Die Terme $S^{f,DD}$ und $S^{f,OD}$ liefern zusätzliche Beiträge zur Besetzungsdynamik durch kohärente Interband-Übergänge über Hartree-Fock hinaus. Diese Beiträge des kohärenten Feldes zur Besetzungsdynamik sind z.B. wichtig für die nichtlineare Optik.

In der ψ -Gleichung hat der Term S_k^{DD} die Struktur

$$S_k^{DD} = \Gamma_k \psi_k - i\Delta_k \psi_k,$$

wobei Γ_k eine k-abhängige Dämpfung und Δ_k die zugehörige Energierenormierung liefert, wobei zu bemerken ist, daß Dämpfung und Renormierung *immer* zusammen auftreten. Dies erkennt man auch daran, daß sich die Dämpfung über $\Gamma_k = S_k^{\text{in}} + S_k^{\text{out}}$ bestimmt, während die Energierenormierung Δ_k die zugehörige Kramers-Kronig-Transformierte ist. Dieser Beitrag wird als diagonal in k bezeichnet, da keine Kopplung verschiedener k-Werte auftritt. Da unsere Basis jedoch nur diagonal in H_0 ist, treten auch Beiträge

auf, die f und ψ zu unterschiedlichen k -Werten koppeln und als nichtdiagonal in k bezeichnet werden. Diese sind von der Struktur

$$S^{OD} = - \sum_{k'} \Gamma_{kk'} \psi_{k'} - i \Delta_{kk'} \psi_{k'}.$$

Eine allgemeine Eigenschaft sowohl der Polarisations- als auch der Besetzungsdynamik ist, daß durch Streuprozesse weder Teilchen noch makroskopische Polarisation erzeugt werden, sondern nur *Umverteilungen* zwischen verschiedenen k -Zuständen stattfinden. Dies schreibt sich in mathematischer Form

$$\sum_k S_k = 0$$

und ist für die Terme (2.16) und (2.17) auch analytisch herleitbar. Damit dies in den numerischen Rechnungen auch erfüllt wird, werden die Terme im Programm nicht wie hier angegeben verwendet, sondern es wird eine Indexverschiebung $q \rightarrow q - k$, $k'' \rightarrow k'' + k$ durchgeführt, die sicherstellt, daß die Terme, die sich kompensieren sollen, auf gleiche Weise interpoliert werden. Beachtet man das nicht, erhält man einen relativen Fehler in der Dichte von $\approx 0.04/ps$, mit dieser Indexverschiebung einen Fehler von $\approx 2 \times 10^{-12}/ps$.

2.7 Abschirmung der Coulomb Wechselwirkung und Lindhard-Formel

Da man die Hierarchie der Bewegungsgleichungen irgendwann abbrechen muß, erhält man immer nur unabgeschirmte Coulomb-Potentiale in den Gleichungen. Da aus den Diagrammsummationen der Methode der Green'schen Funktionen bekannt ist, daß die Potentiale abgeschirmt werden, wird die Abschirmung in dieser Arbeit nachträglich ergänzt.

Um die Lindhard-Formel abzuleiten, sind mehrere Wege möglich. Zum einen im Rahmen einer systematischen Vielteilchentheorie mit der Methode der Green'schen Funktionen (siehe [3]), zum anderen mit einer eher phänomenologischen Herangehensweise auf der Basis eines effektiven Einteilchen-Modells. Hier soll die zweite Herangehensweise, [2] folgend, grob erläutert werden, da sie aufgrund der Verwendung von Bewegungsgleichungsmethoden konzeptionell besser zu dieser Arbeit paßt. Im folgenden wird nur das Elektronen-Plasma untersucht (das Loch-Plasma kann genauso behandelt werden).

Ausgehend von einem effektiven Einteilchen-Hamilton-Operator

$$H_{eff} = \sum_k E_k c_k^\dagger c_k + A \sum_q W_q n_{s,-q} \quad n_{s,q} = \frac{1}{A} \sum_k c_{k-q}^\dagger c_k,$$

wobei W_q die Fourier-Transformation des abgeschirmten elektrostatischen Potentials ϕ_s ist, bildet man mit diesem effektiven Hamiltonian die Bewegungsgleichungen der Größe $c_{k-q}^\dagger c_k$. Berücksichtigt man bei der Erwartungswertbildung nur die Terme, die langsam zeitlich variieren (dies ist die eigentliche RPA-Näherung), so erhält man unter der weiteren Annahme, daß $\langle c_{k-q}^\dagger c_k \rangle$ eine Lösung der Form $e^{(\delta-i\omega)t}$ hat, für den Erwartungswert der Dichte

$$\langle n_{sq} \rangle = W_q \frac{f_{k-q} - f_k}{\hbar(\omega + i\delta) + E_{k-q} - E_k}.$$

Diese Dichte ist eine Quelle in der Poisson-Gleichung, die nach Fourier-Transformation, Einsetzen des Erwartungswertes der Fourier-Transformierten Dichte und Wiederholen der gesamten Ableitung für das Loch-Plasma die Lindhard-Formel für das abgeschirmte Coulomb-Potential

$$\begin{aligned} W_q &= \frac{V_q}{\varepsilon_q} \\ \varepsilon_q(\omega) &= 1 - V_q P_q \\ P_q(\omega) &= \frac{1}{A} \sum_{k,a} \frac{f_{k-q}^a - f_k^a}{\hbar(\omega + i\delta) + E_{k-q}^a - E_k^a} \end{aligned} \quad (2.18)$$

liefert, wobei $\varepsilon_q(\omega)$ die dielektrische Funktion ist. In den Rechnungen wird die Lindhard-Formel im statischen Limes $\omega + i\delta = 0$ verwendet. Die Begründung hierfür liegt einmal mehr in der Methode der Green'schen Funktionen. Die nackte Coulomb-Wechselwirkung ist instantan. Dies ist für die abgeschirmte Wechselwirkung im allgemeinen nicht mehr der Fall. Die hier gemachte Näherung besteht nun darin, auch die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung als instantan anzunehmen. Dies ist in sofern konsistent mit dem Rest der Arbeit, als daß auch in der übrigen Arbeit keine zweizeitigen Größen auftreten. Wenn man dieses bei der Fourier-Transformation berücksichtigt, erhält man gerade den $\omega + i\delta = 0$ -Beitrag der dielektrischen Funktion, also den statischen Limes. Durch diese Näherung vernachlässigt man die Plasmonen-Resonanzen, was aber für Halbleiter unter den hier untersuchten Bedingungen eine vernünftige Näherung darstellt.

2.8 Halbleiter-Bloch-Gleichungen

Im Rahmen dieser Arbeit soll neben der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen und Löcher auch deren Wechselwirkung mit einem klassischen Lichtfeld untersucht werden. Dies geschieht durch Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen (SBE), auf deren genaue Ableitung hier verzichtet werden soll

(siehe z.B. [1]). Der grundlegende Gedankengang ist folgender: Man berücksichtigt zusätzlich zu H_0 und H_{WW} noch den Dipol-Hamilton-Operator, für den im Elektron-Loch-Bild

$$H_D = \sum_k \left(E(t) e_k^\dagger h_{-k}^\dagger + h.c. \right),$$

gilt. Anschließend leitet man die Heisenberg-Bewegungsgleichungen wie in Abschnitt 2.2 ab. Werden die sich ergebenden Vierer-Erwartungswerte auf Hatre-Fock-Ebene faktorisiert und Terme die über Hartree-Fock hinausgehen zusammengefasst, erhält man die Halbleiter-Bloch-Gleichungen mit Korrelationsbeiträgen, die im Elektron-Loch-Bild

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_k}{dt} &= -i\omega_k \psi_k + i\Omega_k(1 - f_k^e - f_k^h) + \frac{\partial \psi_k}{\partial t}|_{Scatt.} \\ \frac{df_k^e}{dt} &= 2 \operatorname{Im}(\Omega_k^* \psi_k) + \frac{\partial f_k^e}{\partial t}|_{Scatt.} \\ \frac{df_k^h}{dt} &= 2 \operatorname{Im}(\Omega_k^* \psi_k) + \frac{\partial f_k^h}{\partial t}|_{Scatt.} \end{aligned} \quad (2.19)$$

lauten, wobei die mit $|_{Scatt.}$ bezeichneten Terme die über Hartree-Fock hinausgehenden Beiträge bezeichnen, für die hier die in Abschnitt 2.6 angegebenen Streuterme, d.h. Gleichungen (2.16) und (2.17), verwendet werden. In Gleichung (2.19) treten durch Hartree-Fock-Wechselwirkung renormierte Übergangs- und Rabi-Energien gemäß

$$\begin{aligned} \hbar\omega_k &= \hbar\omega'_k - \sum_{k' \neq k} V_{|k'-k|} (f_{k'}^e + f_{k'}^h) \\ \Omega_k &= d_k E(z, t) + \sum_{k' \neq k} V_{|k'-k|} \psi_{k'}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

auf. Die Halbleiter-Bloch-Gleichungen sind Generalisierungen der optischen Blochgleichungen, wobei die Renormierungen der Übergangs- und der Rabi-Energie durch die Coulomb-Wechselwirkung bewirkt werden. Zu beachten ist, daß sowohl Hartree-Fock-Terme (2.20) wie auch Korrelationsterme (2.16) und (2.17) zu diesen Renormierungen beitragen. Das abgeleitete Gleichungssystem erlaubt es nun, die Wechselwirkung von Halbleiter-Systemen mit einem *klassischen* Lichtfeld zu untersuchen. Die Effekte die sich durch die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes ergeben, sind nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Ein Problem bei der numerischen Berechnung stellt die Coulomb-Singularität dar, die jedoch analog zum Volumen-Material gehoben werden kann. Für eine Darstellung des Verfahrens für das Volumen-Material siehe z.B. [11].

Kapitel 3

Numerische Methoden

Unter Verwendung exzitonischer Einheiten

$$\frac{e^2}{\varepsilon_0} = 8\pi a_0 E_B \qquad E_B = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \qquad x = k \cdot a_0$$

werden alle Gleichungen in eine Form gebracht, in der als einzige Einheit die Zeiteinheit ps verbleibt. Dabei ist a_0 der exzitonische Bohr-Radius, E_B die 3D-Bindungsenergie des Exzitons und μ die effektive reduzierte Masse.

3.1 Materialparameter

Für die numerischen Rechnungen werden die Materialparameter eines GaAs-Quantenfilms benutzt. Diese sind in exzitonischen Einheiten

$$\frac{E_B}{\hbar} = 6.373 \frac{1}{ps}$$
$$\frac{E_B}{E_G} = 0.003$$

Dabei ist mit E_G die Bandlücke des untersuchten Halbleitermaterials bezeichnet. Desweiteren wird eine Dicke des Quantenfilms von $8nm$ angenommen.

3.2 Runge-Kutta-Verfahren

Das Runge-Kutta-Verfahren ist ein Verfahren zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen (im folgenden DGL) des Typs

$$\frac{d}{dt}f = g[f(t), t].$$

Dabei kann es sich bei f und g um Vektoren von Funktionen handeln, d.h. man kann mit diesem Verfahren ganze Systeme von DGL 1. Ordnung lösen. Dies schränkt die Anzahl der lösbaren Differentialgleichungssysteme insoweit nicht ein, da sich jede DGL n -ter Ordnung eindeutig auf ein System von DGL 1. Ordnung abbilden läßt.

Für die numerische Rechnung ist es erforderlich, die Zeitachse zu diskretisieren. Im folgenden sei die Schrittweite zwischen den Zeitschritten mit h bezeichnet.

Das Runge-Kutta-Schema lautet dann:

$$\begin{aligned}
 f_n &= f_{n-1} + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^5) \\
 \text{mit} \quad k_1 &= g[f_{n-1}, t_{n-1}] \\
 k_2 &= g\left[f_{n-1} + \frac{h}{2}k_1, t_{n-1} + \frac{h}{2}\right] \\
 k_3 &= g\left[f_{n-1} + \frac{h}{2}k_2, t_{n-1} + \frac{h}{2}\right] \\
 k_4 &= g[f_{n-1} + hk_3, t_{n-1} + h]
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Dabei ist $f_n = f(t_n)$

Dieses Verfahren ist von 4. Ordnung in h , d.h. der Fehler von der Ordnung $O(h^5)$ ist für kleine Schrittweiten h zu vernachlässigen. In den Rechnungen haben sich Schrittweiten von $1fs = 1 \cdot 10^{-3}ps$ als ausreichend erwiesen, um gute numerischer Stabilität zu erhalten.

3.3 GTS-Stützstellen

Zur Diskretisierung des k-Gitters wird ein modifiziertes Gauss-Tschebyscheff-Verfahren (siehe [14]) benutzt, das im folgenden als GTS bezeichnet wird. Diese GTS-Stützstellen haben gegenüber äquidistanten Stützstellen den Vorteil, das die Genauigkeit der Integration bei gleicher Stützstellenanzahl in fast allen Fällen erheblich höher ist, weswegen sie im folgenden kurz erläutert werden soll.

Dazu geht man von einem Integral des Typs

$$\int_0^{2\pi} f(x) dx$$

aus. Dieses schreibt sich nach einer Variablentransformation

$$x = \varphi - \sin \varphi, \quad \frac{dx}{d\varphi} = 1 - \cos \varphi$$

$$\int_0^{2\pi} f(x)dx = \int_0^{2\pi} (1 - \cos \varphi) f(\varphi - \sin \varphi) d\varphi = \sum_{j=1}^N f(x_j) \hat{w}_j, \quad (3.2)$$

wobei im letzten Schritt die φ -Integration durch Zerlegung des $[0, 2\pi]$ -Intervalls in $N+1$ Teile diskretisiert wurde. Damit erhält man

$$\begin{aligned} \varphi_j &= \frac{2\pi j}{N+1} \\ x_j &= \frac{2\pi j}{N+1} - \sin\left(\frac{2\pi j}{N+1}\right) \\ \hat{w}_j &= \frac{2\pi}{N+1} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N+1}\right)\right). \end{aligned}$$

Der nächste Schritt ist eine Transformation auf ein beliebiges Intervall $[a, b]$. Dazu nimmt man die Variablentransformation $y = a + \varphi \frac{b-a}{2\pi}$, $\frac{dy}{d\varphi} = \frac{b-a}{2\pi}$ vor. Damit schreibt sich Gleichung (3.2)

$$\int_0^{2\pi} (1 - \cos \varphi) f(\varphi - \sin \varphi) d\varphi = \frac{2\pi}{b-a} \int_a^b (1 - \cos \varphi(y)) f(\varphi(y) - \sin \varphi(y)) dy.$$

Interpretiert man nun $f(\varphi(y) - \sin \varphi(y))$ als Funktion $g(y)$, erhält man das Integrationschema

$$\begin{aligned} \int_a^b g(y) dy &= \sum_{j=1}^N g(y_j) w_j \\ y_j &= \left(\frac{j}{N+1} - \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi j}{N+1}\right) \right) (b-a) + a \\ w_j &= \frac{b-a}{N+1} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N+1}\right)\right). \end{aligned} \quad (3.3)$$

In dieser Arbeit werden die auftretenden k-Gitter mit einer Stützstellenzahl von $N = 64$ diskretisiert. Hiermit wurde eine extrem hohe Genauigkeit bei der Berechnung der Mehrfachintegrale erzielt. Die obere Grenze der Integration wird durch die Anregungssituation bestimmt. Für die angegebenen Beispiele erweist sich $k_{\max} = 20a_0^{-1}$ als ausreichend. Als Hilfreich hat es sich erwiesen, das Intervall $[0, k_{\max}]$ in Teilintervalle zu unterteilen, um eine bestmögliche Auflösung der Besetzungen zu erreichen. Für die auftretenden Winkel-Integrationen hat sich eine Stützstellenzahl von $N_W = 30$ auf dem Intervall $[0, \pi]$ als sinnvoll erwiesen.

Kapitel 4

Ergebnisse

Die folgenden Untersuchungen werden für einen GaAs Quantenfilm durchgeführt. Für optische Anregungen in der Nähe der fundamentalen Bandlücke wird der Halbleiter als Zwei-Band-System (Elektronen und schwere Löcher) in Effektivmassennäherung betrachtet. Wir beschränken uns dabei auf den Einfluß von Coulomb-Korrelationen auf die Dynamik der optischen Anregung. Auf den betrachteten Zeit- und Energieskalen sind ebenfalls Beiträge der Elektron-Phonon-Wechselwirkung zu erwarten. Deren Einbeziehung würde allerdings den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist mit Bewegungsgleichungsmethoden in der Studienarbeit von Jan Seebeck untersucht worden [11].

4.1 Lineares Spektrum

In den Halbleiter-Bloch-Gleichungen können ψ und f in ihrer Abhängigkeit nach Potenzen von E klassifiziert werden. Die zeitliche Dynamik von ψ hat dabei Beiträge E, E^3, E^5, \dots , während die Zeitableitung von f durch Terme E^2, E^4, \dots bestimmt wird. Im linearen Fall, der experimentell durch ein schwaches optisches Feld realisiert werden kann, wird die Besetzungsdynamik vernachlässigt, so daß f durch die Anfangsbedingungen gegeben ist. Für die Wahl $f = 0$ ergeben sich keine Korrelationsbeiträge. Im Rahmen dieser Näherung, kann man die ψ -Gleichung fouriertransformieren und erhält nach einer Diskretisierung ein lineares Gleichungssystem für die Suszeptibilität $\chi(\omega) = \frac{P(\omega)}{E(\omega)}$. Der Imaginärteil von χ bestimmt das Absorptionsspektrum, während der Realteil die Änderung des Brechungsindex durch resonante optische Übergänge liefert. Da die Details dieser Rechnung in [11] ausführlich diskutiert sind, soll hier auf eine Darstellung verzichtet werden. Das sich ergebende Spektrum ist in Abb. 4.1 dargestellt, wobei die exzitonische Re-

sonanz gegenüber dem Volumenmaterial zu niedrigeren Energien verschoben ist, was einer Erhöhung der Bindungsenergie durch Dimensionsreduzierung entspricht. Es wurde in dieser Rechnung eine phänomenologische Dämpfung von $\gamma = 0,1E_B$ angenommen. Da auf der x-Achse die Verstimmung relativ zur Bandkante in Einheiten der 3D-exzitonischen Bindungsenergie $\varphi = \frac{\hbar\omega - E_G}{E_B}$ aufgetragen ist, liegt die exzitonische Resonanz des Volumenmaterials bei $\varphi = -1$, während sie für den hier betrachteten Quantenfilm bei ca. $\varphi = -2,4$ liegt. Schwach zu erkennen sind außerdem die exzitonische 2s-Resonanz bei $\varphi = -0,4$ und das Bandkantenkontinuum ab $\varphi = 0$.

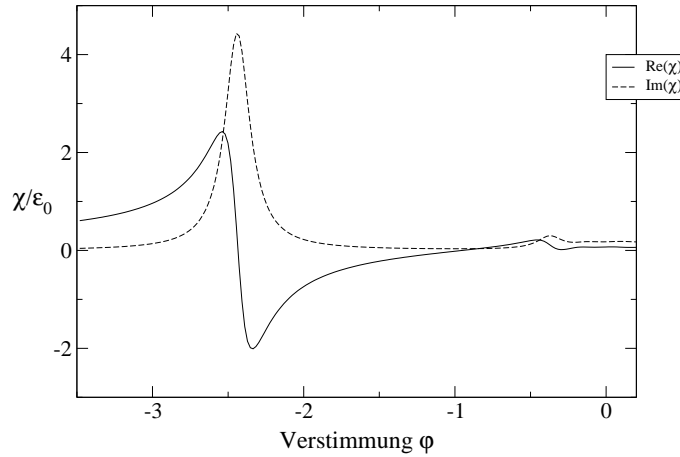


Abbildung 4.1: lineares Spektrum

4.2 Halbleiter-Bloch-Gleichungen in Hartree-Fock-Näherung

In diesen Rechnungen wird das System mit einem schwachen Puls, der energetisch bei der exzitonischen Resonanz des 2D-QW liegt, angeregt. Da das Feld schwach ist, folgt, daß nur Beiträge der Übergangsamplitude, die linear in E sind berücksichtigt werden müssen. Damit ergibt sich, wie bereits in Abschnitt 4.1 erwähnt, daß die Besetzungsdynamik vernachlässigbar ist und für die Wahl $f = 0$ die Korrelationsterme keine Beiträge liefern. Es wurden die Halbleiter-Bloch-Gleichungen in Hartree-Fock-Näherung

unter Verwendung des Runge-Kutta-Verfahrens als DGL in der Zeit gelöst. Da die Besetzungsdynamik vernachlässigbar ist, kann zu $P(t)$ eine Suszeptibilität über $P(t) = \int dt' \chi(t, t') E(t')$ eingeführt werden, wobei, wegen der Linearität in ψ , $\chi(t, t') = \chi(t - t')$ gilt. Da die Definition der Suszeptibilität für diesen Fall eine Faltung darstellt, ist es sinnvoll eine Fouriertransformation durchführen und man erhält nach dem Faltungssatz der Fourier-Theorie $P(\omega) = \chi(\omega) E(\omega)$. Dies bedeutet, daß aus den Lösungen des Differentialgleichungs-Systems durch anschließende Fourier-Transformation wieder die lineare optische Suszeptibilität gewonnen und mit der aus Abschnitt 4.1 verglichen werden kann. Parameter der Rechnung sind

- Verstimmung $\varphi = -2, 4$
- Länge des Pulses $\text{FWHM}_{\text{Puls}} = 100 \text{ fs}$ (FWHM: vollen Breite bei halbem Maximalwert)
- phänomenologische Dämpfung $\gamma = 0,1 E_B$
- Pulsstärke $dE = 0,001 E_B$.

Diese Parameter bestimmen die folgenden Kurven, wobei die phänomenologische Dämpfung über $\gamma = \frac{1}{T_2}$ einer T_2 -Zeit von 10 ps entspricht.

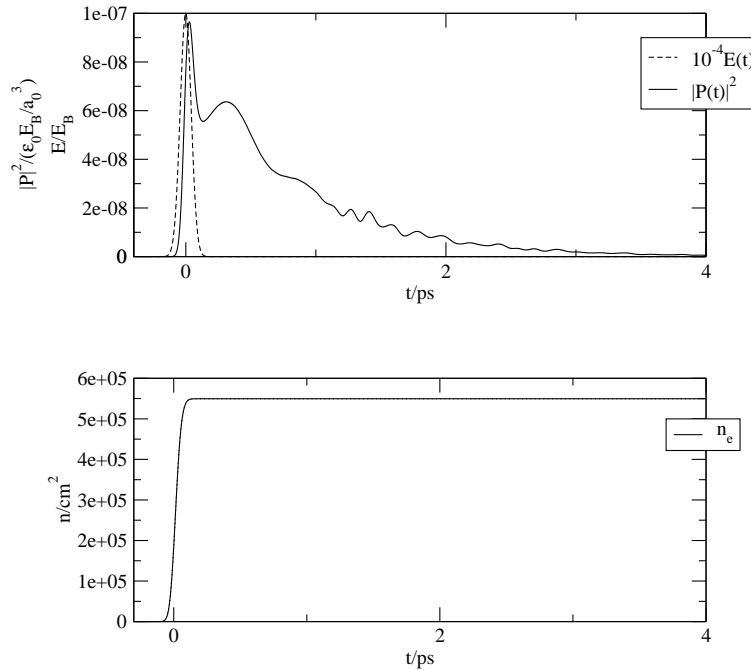


Abbildung 4.2: Lösung der SBE

Dabei sind $E(t)$ und $|P(t)|$ die elektrische Feldstärke und der Betrag der makroskopischen Polarisation, während n_e und n_h die Ladungsträgerdichten der Elektronen und Löcher sind. Die Polarisation ist die Größe, die wesentlich die optischen Eigenschaften des Systems bestimmt. Es ist in Abb. 4.2 gut zu erkennen, wie sie mit dem Puls ansteigt und nach Pulsende wieder abfällt, wobei dieses Abfallen durch die phänomenologische Dämpfung bestimmt wird. Der Peak bei ca. $0,5ps$ entsteht durch eine Schwebung der exzitonischen Resonanz mit dem Kontinuum an der Bandkante. Die übrigen Oszillationen entstehen durch schlechte numerische Auflösung hochenergetischer Kontinuumszustände, die im betrachteten Energiebereich der optischen Spektren sowie für die Korrelationen nur eine untergeordnete Rolle spielen. Die im System erzeugten Ladungsträgerdichten hängen im wesentlichen von Pulsstärke und -dauer ab, obwohl über die Polarisation auch die Dämpfung eingeht. Die im System erzeugte geringe Ladungsträgerdichte von ca. $5.5 \times 10^5/cm^2$, die Besetzungen $f_k^{e,h} \ll 1$ entspricht, ist dabei eine Rechtfertigung dafür, daß eine Fouriertransformation durchgeführt werden kann. Die Dichte bleibt nach Abklingen des Pulses konstant, da im Modell keine Rekombinationsmechanismen eingebaut sind, die auch erst auf anderen Zeitskalen von ca. $100ps$ zum tragen kommen würden.

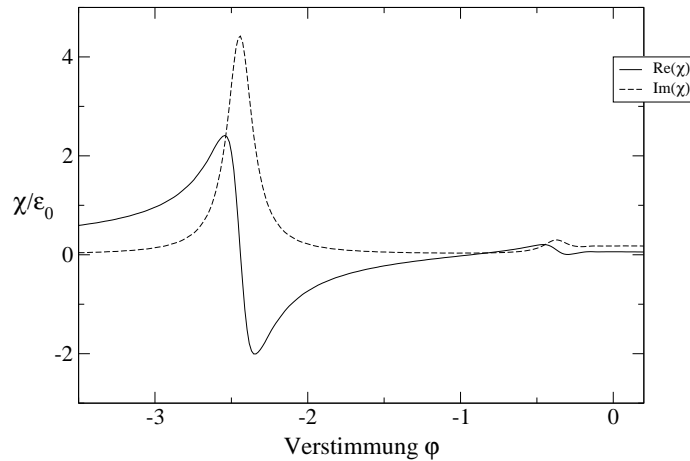


Abbildung 4.3: Spektrum aus SBE

In Abb. 4.3 ist schön zu sehen, daß die unterschiedlichen Methoden aus Abschnitt 4.1 und diesem Abschnitt das gleiche Spektrum liefern, wie dies für einen schwachen Puls der Fall sein muß.

4.3 Halbleiter-Bloch-Gleichungen mit Korrelationstermen

In diesem Abschnitt finden sich die Rechnungen der Halbleiter-Bloch-Gleichungen mit den Streutermen. Dabei werden zwei Fälle untersucht.

4.3.1 Lineare Antwort eines wechselwirkenden Elektron-Loch-Systems im Gleichgewicht auf ein schwaches Lichtfeld

Hier soll untersucht werden, wie sich die exzitonische Resonanz in einem vorgepumpten System, das sich bei verschiedenen Ladungsträgerdichten in einem thermodynamischen Gleichgewicht befindet, verändert. Dabei ist "Gleichgewicht" im folgenden so zu verstehen, daß Quasi-Gleichgewichtsverteilungen in den Bändern angenommen werden, die bis zum Einsetzen der Rekombination (die nicht im Modell enthalten ist) stationär sind.

Um die lineare Antwort zu untersuchen, wird das System, in dem als Anfangsbedingung Quasi-Fermi-Niveaus für Elektronen und Löcher eingestellt sind, mit einem schwachen Puls, der energetisch bei der exzitonischen Resonanz des 2D-QW liegt, angeregt, die SBE werden mit Streutermen als DGL in der Zeit gelöst und aus $P(t)$ und $E(t)$ wird durch Fourier-Transformation wieder die lineare optische Suszeptibilität berechnet (s.o.). Parameter der Rechnung sind:

- Verstimmung $\varphi = -2, 4$
- Länge des Pulses $\text{FWHM}_{\text{Puls}} = 100 fs$
- Pulsstärke $dE = 0,001 E_B$.

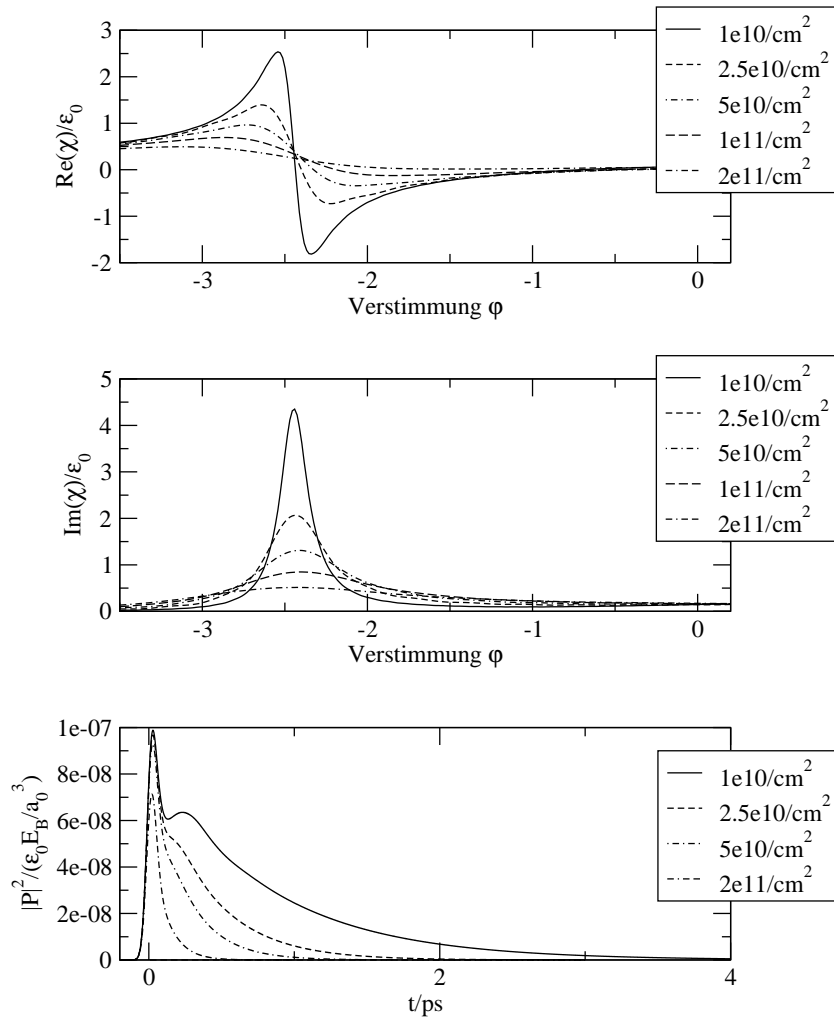


Abbildung 4.4: Real- und Imaginärteil der Suszeptibilität sowie Zeitentwicklung der Polarisation in exzitonischen Einheiten für verschiedenen Anregungsdichten

Man sieht in Abb. 4.4(a) und (b) deutlich, wie die exzitonische Resonanz mit zunehmender Ladungsträgerdichte aufgrund höherer Streuraten "ausgeschmiert", d.h., sie verbreitert sich und wird deutlich flacher. Die Polarisations fällt bei höheren Dichten, wie in Abb. 4.4(c) gezeigt, immer schneller ab. Auch dies auf die stärkere Streuung und die damit geringeren Kohärenzzeiten zurückzuführen. Der zusätzliche Peak bei ca. $0.5ps$ durch das "Beating" mit dem Bandkantenkontinuum verschwindet bei höheren Dichten, da die exzitonische Resonanz ausgeblichen ist und keine Schwebung mehr entstehen kann.

4.3.2 Korrelationen durch optisch generierte Ladungsträger

Hier wird der QW mit einem intensiven Lichtpuls angeregt. Dabei ist die Startbedingung ein "leeres" System, d.h. die Dichten der Elektronen und Löcher sind Null. Die Parameter des Pulses sind

- Verstimmung $\varphi = 25$
- Länge des Pulses $\text{FWHM}_{\text{Puls}} = 100fs$
- Pulsstärke $dE = 1,0E_B$.

In Abb. 4.5(a) ist der anregende Puls gezeigt, während Abbildung 4.5(b) das Betragsquadrat der Polarisation zeigt. Man sieht in Abb. 4.5(c) und (d), daß dieser Puls Ladungsträgerdichten der Elektronen und Löcher (n_e bzw. n_h) von ca. $2,3 \times 10^{11} \frac{1}{cm^2}$ erzeugt. Es ist dabei in Abb. 4.5(b) zu erkennen, daß der Abfall der Polarisation bei ungefähr gleicher erzeugter bzw. im System vorhandener Ladungsträgerdichte sehr viel schneller geht, als dies in Abb.4.4(c) der Fall ist. Dies kann zum einen darauf zurückzuführen sein, daß in Abschnitt 4.3.1 die Ladungsträger schon im (Quasi-) Gleichgewicht sind und daher die Streuraten, durch die die kohärente Polarisation zerfällt, geringer sind. Zum anderen werden in Gleichung (2.16) die zusätzlichen Terme proportional zu ψ^3 wichtig, die bei schwacher Anregung (im linearen Fall) vernachlässigbar sind.

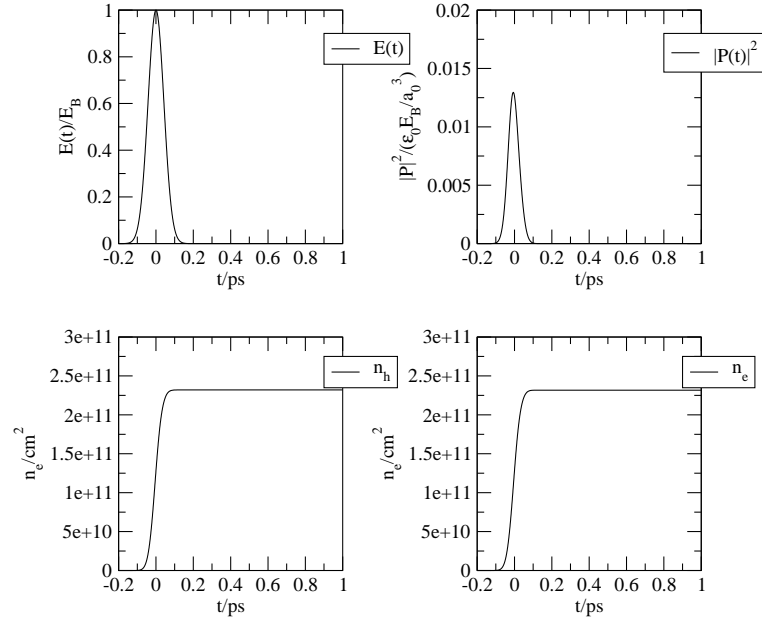


Abbildung 4.5: Zeitentwicklung SBE mit Streutermen

In den folgenden Bildern (Abbildung 4.6) erkennt man sowohl für Elektronen als auch für Löcher, wie die Verteilung an der Resonanz des anregenden optischen Feldes erzeugt wird und dann auf einer Zeitskala von ca. 1ps auf eine Fermi-Verteilung relaxiert, d.h. der anfängliche Nichtgleichgewichtszustand entwickelt sich aufgrund der Streuung ins (Quasi-)Gleichgewicht. Eine Fourier-Transformation ist nicht durchgeführt worden, da dies für ein starkes optisches Feld, bei dem die nichtlinearen Beiträge wichtig werden, nicht sinnvoll ist. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die Suszeptibilität im nichtlinearen Fall nicht mehr nur von der Zeitdifferenz abhängt und somit in der Definition der Suszeptibilität kein Faltungsintegral auftritt.

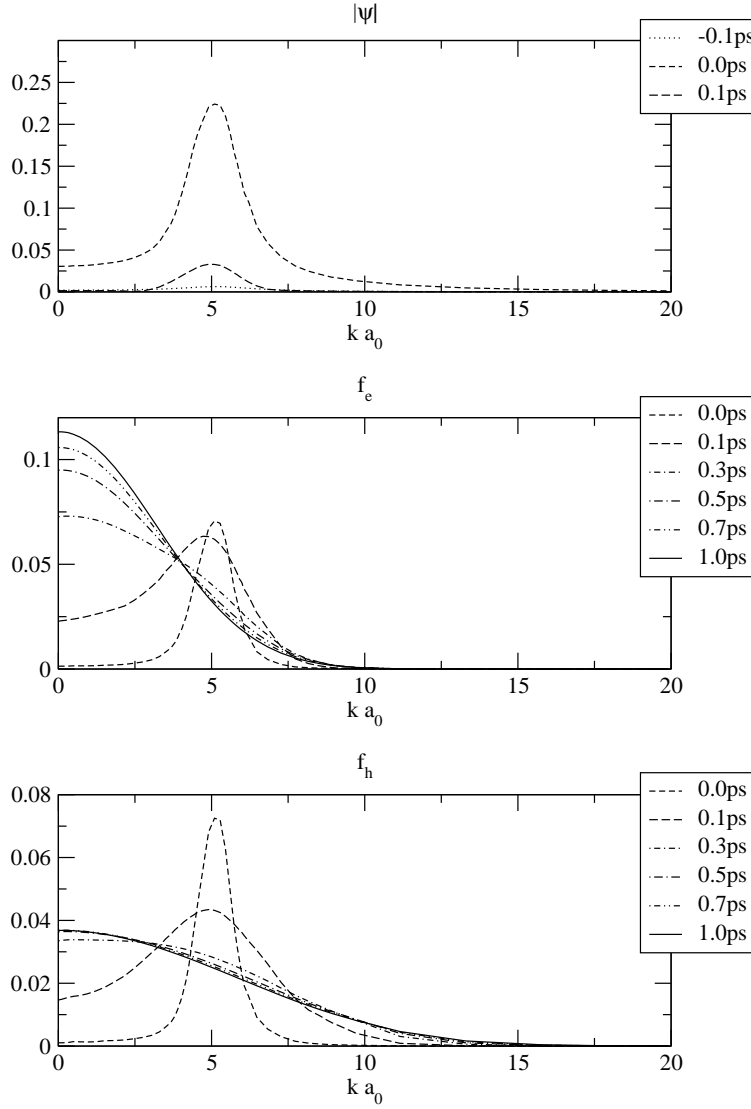


Abbildung 4.6: k-aufgelöste Lösung der SBE mit Streutermen

In diesen Bildern sind f_e und f_h die Besetzungszahlen der Elektronen und Löcher. ψ ist die Übergangsamplitude aus der sich die Polarisierung bestimmt.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wird die Dynamik optischer Anregungen von Halbleiter-Quantenfilmen beschrieben. Dabei werden Valenz- und Leitungsband in Effektivmassennäherung behandelt. Im Zusammenhang mit einer kohärenten Polarisation überführt das Lichtfeld Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband. Es wird die Dichtematrix für das Zweiband-System aufgestellt. Diese enthält auf der Diagonalen die Besetzung in den Bändern und auf der Nichtdiagonalen die Übergangsamplituden. In der Bloch-Basis, die für den Quantenfilm in Envelope-Näherung benutzt wird, entstehen gekoppelte Gleichungen, die auf Hartree-Fock-Ebene zu den Halbleiter-Bloch-Gleichungen führen. Hierbei fehlen sämtliche Korrelationsbeiträge, welche das Dephasieren der kohärenten Polarisation und die Streuung der Ladungsträger beschreiben.

Im Rahmen der Studienarbeit werden Korrelationen durch Coulomb-Wechselwirkung untersucht. Dabei werden die sich in 2. Ordnung im abgeschirmten Potential im Rahmen der Markov-Näherung ergebenden Terme, die in der Literatur teilweise vernachlässigt sind, vollständig behandelt. Die Behandlung von Korrelationstermen ist aktueller Forschungsgegenstand, da noch nicht alle diesbezüglichen Probleme gelöst sind. So werden auf kurzen Zeitskalen z.B. Gedächtniseffekte wichtig. Gedächtniseffekte sind allerdings ebenso wie Effekte der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in dieser Studienarbeit nicht thematisiert, da dies den Rahmen der Arbeit gesprengt hätte. Auch Rekombinationsmechanismen sind im Modell nicht enthalten, da sie auf den hier interessierenden Zeitskalen von bis zu $10ps$ keine Rolle spielen.

Untersucht wird das Dephasieren der kohärenten Polarisation bei verschiedenen Anregungsdichten. Dabei findet man, daß die Polarisation um so schneller zerfällt, je höher die im System vorhandene Ladungsträgerdichte ist. Mit dem schnelleren Zerfall der Polarisation ist u.a. das Ausbleichen der exzitonen Resonanz bei hohen Anregungsdichten verknüpft. Daher findet man, daß diese Resonanz um so stärker ausbleicht, je höher die im System vorhan-

dene Ladungsträgerdichte ist. Weiterhin wird die Relaxation optisch generierter Ladungsträger auf Quasi-Gleichgewichtsverteilungen der Elektronen und Löcher untersucht. Diese Relaxation findet, abhängig von der Anregungssituation, auf Zeitskalen von ca. $1ps$ statt.

Diese Ergebnisse sind auch in der Literatur bekannt (siehe z.B. [3]). Explizite Vergleiche mit den Originalarbeiten sind nicht durchgeführt worden, da in den Arbeiten [8, 9, 10] keine Fälle untersucht worden sind, die den hier studierten entsprechen.

Ein möglicher nächster Schritt besteht darin, ein System zu beschreiben, das aus an einen Quantenfilm gekoppelten Quantenpunkten besteht. Dies ist eine wichtige neue Technologie für Halbleiter-Laserdioden. Weiterhin ist es sinnvoll, die zukünftigen Rechnungen mit der Methode der Green'schen Funktionen durchzuführen, um z.B. Gedächtnis-Effekte mitzubeschreiben.

Kapitel 6

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich zunächst bei Herrn Prof. Dr. Jahnke für die gute Betreuung, das nette Arbeitsklima und die ständige Gesprächsbereitschaft bedanken. Weiterhin danke ich Torben Nielsen und Dr. Paul Gartner für viele interessante Diskussionen. Der gesamten Arbeitsgruppe Halbleiterphysik gilt mein Dank für die Atmosphäre, die viel dazu beitrug, entspannt und produktiv arbeiten zu können. Herrn Prof. Dr. Czycholl danke ich für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Schließlich möchte ich mich bei meinen Eltern und bei meinem Paten Klaus Wedehase für die andauernde materielle und ideelle Unterstützung meines Studiums bedanken, dem ich mich ohne diese Unterstützung nicht in diesem Maße hätte widmen können.

Anhang A

Streuterme in 2. Bornscher Näherung

Im folgenden soll die Berechnung der Streuterme in 2. Bornscher Näherung explizit durchgeführt werden. Um zu den Streutermen wie in Abschnitt 2.6 zu gelangen, geht man ins Elektron-Loch-Bild über, und fasst unter einige Indexumbenennungen die Terme zusammen

A.1 Bewegungsgleichung für f_k^c nach Gleichung (2.12)

A.1.1 Erster Term

$$\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle$$

Hartree-Fock-Faktorisierung:

$$\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \approx - \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} + \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} = f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}$$

Korrelationen:

$$\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle = f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= + \left\langle \frac{dc_k^\dagger}{dt} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger \frac{dc_{k'}^\dagger}{dt} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger \frac{dc_{k+q}}{dt} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} \frac{dc_{k'-q}}{dt} \right\rangle \\
&- \frac{d}{dt} (f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}) \\
&= \frac{i}{\hbar} [E_k^c + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c] \left[f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[- \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right. \\
&\quad + \left\langle c_{k-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\
&\quad - \left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''}^\dagger c_{k'+q''}^\dagger c_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\
&\quad + \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\
&\quad + \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q+q''}^\dagger c_{k''-q''} c_{k''} c_{k'-q} \right\rangle \\
&\quad - \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k+q-q''} c_{k'-q} \right\rangle \\
&\quad + \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k''-q+q''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \\
&\quad \left. - \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} c_{k'-q-q''} \right\rangle \right] \\
&- \frac{d}{dt} (f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q})
\end{aligned}$$

Faktorisierung

Die (q=0)-Terme werden vernachlässigt (siehe Abschnitt 2.4). Die Terme nach dem $\hat{=}$ entsprechen Ausführung der Summe $\sum_{k'',q''} V_{q''}$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= + \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&- \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k'',k+q''} \\
&+ \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&- \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',k'-q-k} \\
&+ \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',q} \\
&\hat{=}(V_q - V_{k'-k-q}) f_{k+q}^c f_{k'-q}^c (1 - f_{k'}^c) \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_{k-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= + \left\langle c_{k-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k} \\
&- \left\langle c_{k-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&+ \left\langle c_{k-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&- \left\langle c_{k-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \\
&- \left\langle c_{k-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''} c_{k'}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',-q} \\
&+ \left\langle c_{k-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''} c_{k'}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',k+q-k'} \\
&\hat{=} + V_{-q} f_{k+q}^c \psi_{k'-q} \psi_{k'}^* - V_{k+q-k'} f_{k'-q}^c \psi_{k+q} \psi_{k'}^* \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_{k'}^c \psi_{k''}^* \psi_k \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''}^\dagger c_{k'+q''}^\dagger c_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= - \left\langle c_k^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',-q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',k+q-k'} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&\hat{=} - (V_{-q} - V_{k+q-k'}) f_k^c f_{k+q}^c f_{k'-q}^c \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k'-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= - \left\langle c_k^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',k'-k-q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',q} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'-q''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'-q''}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&\hat{=} V_q f_{k'-q}^c \psi_k^* \psi_{k+q} - V_{k'-k-q} f_{k+q}^c \psi_k^* \psi_{k'-q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k''}^\dagger c_{k+q+q''} c_{k''-q''} c_{k'-q} \right\rangle &= - \left\langle c_k^\dagger c_{k+q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{k'',k'-q} \delta_{q'',-q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q'',k'-k-q} \delta_{k'',k'-q} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k+q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k+q+q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''-q'',k} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k+q+q''} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&\hat{=} - (V_{-q} - V_{k'-k-q}) f_k^c f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} c_{k+q-q''} c_{k'-q} \right\rangle &= - \left\langle c_k^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q-q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{k'',k'-q} \delta_{q'',k+q-k'} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k+q-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{k'',k'-q} \delta_{q'',q} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k+q-q''} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k'',k''+q''} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k+q-q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k+q-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q-q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&\hat{=} V_q f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k'-q} - V_{k+q-k'} \psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k'-q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k'',k''+q''}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k''}^\dagger c_{k'-q+q''} c_{k''-q''} \right\rangle &= + \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k'-q+q''} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k'-q+q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k',k''-q''} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k+q} c_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k+q} \delta_{q'',k-k'+q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q+q''} \right\rangle \left\langle c_{k+q} c_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k+q} \delta_{q'',q} \\
&\cong (V_q - V_{k+q-k'}) f_k^c f_{k'}^c (1 - f_{k+q}^c) \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} c_{k'-q-q''} \right\rangle &= + \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k'-q-q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k',k''+q''} \\
&- \left\langle c_k^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k'-q-q''} \right\rangle \delta_{k',k+q} \delta_{k,k''+q''} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k+q} \\
&- \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q-q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&- \left\langle c_k^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q-q''} \right\rangle \left\langle c_{k+q} v_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k+q} \delta_{q'',-q} \\
&+ \left\langle c_k^\dagger c_{k'-q-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k+q} v_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k+q} \delta_{q'',k'-k-q} \\
&\cong V_{-q} \psi_k^* f_k^c \psi_{k+q} - V_{k'-k-q} f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k+q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k,k''+q''}
\end{aligned}$$

Zusammenfassen der Terme

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} [E_k^c + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c] \left[f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left[-(V_q - V_{k'-k-q}) f_{k+q}^c f_{k'-q}^c (1 - f_{k'}^c) \right. \\
&\quad + V_{-q} f_{k+q}^c \psi_{k'-q} \psi_{k'}^* - V_{k+q-k'} f_{k'-q}^c \psi_{k+q} \psi_{k'}^* \\
&\quad + (V_{-q} - V_{k+q-k'}) f_k^c f_{k+q}^c f_{k'-q}^c \\
&\quad + V_q f_{k'-q}^c \psi_k^* \psi_{k+q} - V_{k'-k-q} f_{k+q}^c \psi_k^* \psi_{k'-q} \\
&\quad - (V_{-q} - V_{k'-k-q}) f_k^c f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
&\quad - V_q f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k'-q} + V_{k+q-k'} \psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k'-q} \\
&\quad + (V_q - V_{k+q-k'}) f_k^c f_{k'}^c (1 - f_{k+q}^c) \\
&\quad - V_{-q} \psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k+q} + V_{k'-k-q} f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k+q} \\
&\quad - \sum_{k'',q''} V_{q''} f_{k'}^c \psi_{k''}^* \psi_k \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \\
&\quad - \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&\quad + \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k',k''+q''} \\
&\quad \left. + \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k,k''+q''} \right] - \frac{d}{dt} f_k^c f_{k'}^c \delta_{k',k+q}
\end{aligned}$$

A.1.2 Zweiter Term

$$\left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle$$

Hartree-Fock-Faktorisierung:

$$\left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \approx - \left\langle c_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k'}^\dagger v_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} + \left\langle c_k^\dagger v_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} = \psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q}$$

Korrelationen:

$$\left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle = \psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle &= + \left\langle \frac{dc_k^\dagger}{dt} v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger \frac{dv_{k'}^\dagger}{dt} c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &+ \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger \frac{dc_{k+q}}{dt} v_{k'-q} \right\rangle + \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} \frac{dv_{k'-q}}{dt} \right\rangle \\ &- \frac{d}{dt} (\psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q}) \\ &= \frac{i}{\hbar} [E_k^c + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v] \left[\psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right] \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[- \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k+q''}^\dagger c_{k''} v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right. \\ &\quad + \left\langle c_{k-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle c_k^\dagger v_{k''-q''}^\dagger v_{k'+q''}^\dagger v_{k''} c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle c_k^\dagger v_{k'-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''-q''} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q-q''} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k''-q+q''}^\dagger v_{k''-q''} \right\rangle \\ &\quad \left. - \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k''+q''}^\dagger v_{k'-q-q''} \right\rangle \right] \\ &- \frac{d}{dt} (\psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q}) \end{aligned}$$

Faktorisierung

Geht analog zu Abschnitt A.1.1 da die Indices identisch sind.

Zusammenfassen der Terme

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} [E_k^c + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v] \left[\psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle c_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left[+ (V_q - V_{k'-k-q}) \psi_{k'-q}^* f_{k+q}^c \psi_{k'} \right. \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} f_{k',k+q}^c \delta_{k'',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- V_{-q} f_{k+q}^c f_{k'-q}^v (1 - f_{k'}^v) + V_{k+q-k'} \psi_{k'-q}^* \psi_{k+q} (1 - f_{k'}^v) \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \\
&+ (V_{-q} - V_{k+q-k'}) \psi_k^* \psi_{k+q} f_{k'-q}^v \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} f_{k',k+q}^v \delta_{k'',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ V_q f_k^c f_{k'-q}^v f_{k+q}^c - V_{k'-k-q} f_k^c \psi_{k+q} \psi_{k'-q}^* \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- (V_{-q} - V_{k'-k-q}) f_k^c \psi_{k'-q}^* \psi_{k'} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} f_{k'',k+q}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&- V_q f_k^c f_{k'}^v f_{k'-q}^v - V_{k+q-k'} f_{k'-q}^v \psi_k^* \psi_{k'} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* f_{k'}^v \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- (V_q - V_{k+q-k'}) \psi_k^* f_{k'}^v \psi_{k+q} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} f_{k'',k+q}^v \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&+ V_{-q} f_k^c f_{k'}^v (1 - f_{k+q}^c) - V_{k'-k-q} \psi_k^* \psi_{k'} (1 - f_{k+q}^c) \\
&\left. + \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \right] - \frac{d}{dt} (\psi_k^* \psi_{k'} \delta_{k',k+q})
\end{aligned}$$

A.1.3 Zusammenfassung

Man erhält unter Anwendung der Markov-Näherung (siehe Gleichung (2.15) in Abschnitt 2.5.1) unter Vernachlässigung der inhomogenen Beiträge des letzten Terms ($\frac{d}{dt}\dots$) und aller Terme, die noch Integrale enthalten (dies entspricht der RPA-Näherung)

$$\begin{aligned}
\frac{df_k^c}{dt}|_{\text{Scatt.}} = & \left(i\pi\delta\left(E_k^c + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c\right) - P\left(\frac{1}{E_k^c + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c}\right) \right) \\
& \left[-(V_q - V_{k'-k-q})f_{k+q}^c f_{k'-q}^c (1 - f_{k'}^c) \right. \\
& + V_{-q}f_{k+q}^c \psi_{k'-q}^* \psi_{k'}^* - V_{k+q-k'}f_{k'-q}^c \psi_{k+q} \psi_{k'}^* \\
& + (V_{-q} - V_{k+q-k'})f_k^c f_{k+q}^c f_{k'-q}^c \\
& + V_q f_{k'-q}^c \psi_k^* \psi_{k+q} - V_{k'-k-q}f_{k+q}^c \psi_k^* \psi_{k'-q} \\
& - (V_{-q} - V_{k'-k-q})f_k^c f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
& - V_q f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k'-q} + V_{k+q-k'}\psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k'-q} \\
& + (V_q - V_{k+q-k'})f_k^c f_{k'}^c (1 - f_{k+q}^c) \\
& \left. - V_{-q}\psi_k^* f_{k'}^c \psi_{k+q} + V_{k'-k-q}f_k^c \psi_{k'}^* \psi_{k+q} \right] \\
& + \left(i\pi\delta\left(E_k^c + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v\right) - P\left(\frac{1}{E_k^c + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v}\right) \right) \\
& \left[+(V_q - V_{k'-k-q})\psi_{k'-q}^* f_{k+q}^c \psi_{k'} \right. \\
& - V_{-q}f_{k+q}^c f_{k'-q}^v (1 - f_{k'}^v) + V_{k+q-k'}\psi_{k'-q}^* \psi_{k+q} (1 - f_{k'}^v) \\
& + (V_{-q} - V_{k+q-k'})\psi_k^* \psi_{k+q} f_{k'-q}^v \\
& + V_q f_k^c f_{k'-q}^v f_{k+q}^c - V_{k'-k-q}f_k^c \psi_{k+q} \psi_{k'-q}^* \\
& - (V_{-q} - V_{k'-k-q})f_k^c \psi_{k'-q}^* \psi_{k'} \\
& - V_q f_k^c f_{k'}^v f_{k'-q}^v - V_{k+q-k'}f_{k'-q}^v \psi_k^* \psi_{k'} \\
& - (V_q - V_{k+q-k'})\psi_k^* f_{k'}^v \psi_{k+q} \\
& \left. + V_{-q}f_k^c f_{k'}^v (1 - f_{k+q}^c) - V_{k'-k-q}\psi_k^* \psi_{k'} (1 - f_{k+q}^c) \right]
\end{aligned} \tag{A.1}$$

A.2 Bewegungsgleichung für ψ_k nach Gleichung (2.14)

A.2.1 Erster Term

$$\left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle$$

Hartree-Fock-Faktorisierung:

$$\left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \approx - \left\langle v_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} + \left\langle v_k^\dagger c_{k'-q} \right\rangle \left\langle c_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} = \psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q}$$

Korrelationen:

$$\left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle = \psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= + \left\langle \frac{dv_k^\dagger}{dt} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger \frac{dc_{k'}^\dagger}{dt} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\ &+ \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger \frac{dc_{k+q}}{dt} c_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} \frac{dc_{k'-q}}{dt} \right\rangle \\ &- \frac{d}{dt} (\psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q}) \\ &= \frac{i}{\hbar} [E_k^v + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c] \left[\psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right] \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right. \\ &\quad + \left\langle v_{k-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_k^\dagger c_{k''-q''}^\dagger c_{k'+q''}^\dagger c_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_k^\dagger c_{k'-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k+q} c_{k''-q''} c_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q} c_{k''-q''} c_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k''-q''}^\dagger c_{k'-q''} c_{k''-q''} \right\rangle \\ &\quad \left. - \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} c_{k'-q} c_{k''-q''} \right\rangle \right] \\ &- \frac{d}{dt} (\psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q}) \end{aligned}$$

Faktorisierung

Geht analog zu Abschnitt A.1.1 da die Indices identisch sind.

Zusammenfassen der Terme

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} [E_k^v + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c] \left[\psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle v_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k'-q} \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left[(V_q - V_{k'-k-q}) \psi_{k+q} \psi_{k'-q} \psi_k^* \right. \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^c f_{k''}^v \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- V_{-q} \psi_{k+q} f_{k'-q}^c (1 - f_{k'}^c) + V_{k+q-k'} \psi_{k'-q} f_{k+q}^c (1 - f_{k'}^c) \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \\
&+ (V_{-q} - V_{k'-k-q}) \psi_k f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ V_q f_{k'-q}^c f_k^v \psi_{k+q} - V_{k'-k-q} f_{k+q}^c f_k^v \psi_{k'-q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- (V_{-q} - V_{k'-k-q}) \psi_k f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&- V_q \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k'-q} + V_{k+q-k'} f_k^v f_{k'}^c \psi_{k'-q} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&+ (V_q - V_{k+q-k'}) \psi_k f_{k'}^c (1 - f_{k+q}^c) \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^c f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- V_{-q} f_k^v f_{k'}^c \psi_{k+q} + V_{k'-k-q} \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k+q} \\
&\left. + \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \right] - \frac{d}{dt} (\psi_k f_{k'}^c \delta_{k',k+q})
\end{aligned}$$

A.2.2 Zweiter Term

$$\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle$$

Hartee-Fock-Faktorisierung:

$$\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \approx - \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k',k-q} + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q,0} = -\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q}$$

Korrelationen:

$$\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle = -\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q} + \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle &= + \left\langle \frac{dv_{k-q}^\dagger}{dt} c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger \frac{dc_{k'+q}^\dagger}{dt} c_{k'} c_k \right\rangle \\ &+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger \frac{dc_{k'}}{dt} c_k \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \frac{dc_k}{dt} \right\rangle \\ &+ \frac{d}{dt} (\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q}) \\ &= \frac{i}{\hbar} [E_{k-q}^v + E_{k'+q}^c - E_{k'}^c - E_k^c] \left[-\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q} + \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \right] \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k-q+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \right. \\ &\quad + \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''-q''}^\dagger c_{k'+q+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'} c_k \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'} c_k \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k''} c_{k'+q''} c_{k''-q''} c_k \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger v_{k''} v_{k''+q''} c_{k'-q''} c_k \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_{k''} c_{k+q''} c_{k''-q''} \right\rangle \\ &\quad \left. - \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} v_{k''} v_{k''+q''} c_{k-q''} \right\rangle \right] \\ &+ \frac{d}{dt} (\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q}) \end{aligned}$$

Faktorisierung

Die (q=0)-Terme werden vernachlässigt. Die Terme nach dem $\hat{=}$ entsprechen Ausführung der Summe $\sum_{k'',q''} V_{q''}$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k-q+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle &= + \left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k-q+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k-q+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ \left\langle v_{k''-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k-q+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''-q'',k} \\
&- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k-q+q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k-q+q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k''} c_{k'+q}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'+q} \delta_{q'',q} \\
&+ \left\langle v_{k''-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k-q+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k''} c_{k'+q}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'+q} \delta_{q'',k'-k+q} \\
&\hat{=} + (V_q - V_{k'-k+q}) \psi_k \psi_{k'} \psi_{k'+q}^* \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k'',k-q}^v \delta_{k'',k-q} \delta_{k''-q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle &= + \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k''+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{q'',0} \\
&+ \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&- \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k''+q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k} \\
&- \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''+q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''} c_{k'+q}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'+q} \delta_{q'',k-q-k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''} c_{k'+q}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'+q} \delta_{q'',-q} \\
&\hat{=} + V_{-q} \psi_k f_{k'}^c (1 - f_{k'+q}^c) - V_{k-q-k'} f_k^c \psi_{k'} (1 - f_{k'+q}^c) \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''-q''}^\dagger c_{k'+q+q''}^\dagger c_{k''} c_{k'} c_k \right\rangle &= - \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q+q''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k'',k-q} \delta_{q'',k-q-k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q+q''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{k'',k-q} \delta_{q'',-q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q+q''}^\dagger c_{k''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''-q'',k'} \\
&\hat{=} + (V_{-q} - V_{k-q-k'}) f_k^c f_{k'}^c \psi_{k-q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q-q''}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} c_{k'} c_k \right\rangle &= - \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{q'',q} \delta_{k'',k-q} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q-q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \delta_{q'',k'-k+q} \delta_{k'',k-q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q-q''}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q-q''}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k''+q''}^\dagger v_{k''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&\hat{=} - V_q \psi_k f_{k'}^c f_{k-q}^v + V_{k'+q-k} f_k^c \psi_{k'} f_{k-q}^v \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k''}^\dagger c_{k'+q''} c_{k''-q''} c_k \right\rangle &= - \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',k-q-k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'+q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'+q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k'+q''} \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k'+q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''-q'',k'} \\
&\equiv (V_q - V_{k-q-k'}) f_k^c f_{k'+q}^c \psi_{k-q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} c_{k'-q''} c_k \right\rangle &= - \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'-q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',-q} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',k'+q-k} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k'-q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k'-q''} \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'-q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&\equiv - V_{-q} f_{k-q}^v f_{k'+q}^c \psi_k + V_{k'+q-k} \psi_{k-q} \psi_{k'+q}^* \psi_k \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^v \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_{k''}^\dagger c_{k+q''} c_{k''-q''} \right\rangle &= + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k+q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{q,0} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k+q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''-q'',k} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k''}^\dagger c_{k+q''} \right\rangle \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'} c_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',-q} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'} c_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',k'+q-k} \\
&\hat{=} - (V_{-q} - V_{k'+q-k}) \psi_{k-q} f_{k'+q}^c (1 - f_{k'}^c) \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} c_{k-q''} \right\rangle &= + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \delta_{k'',k-q} \delta_{k''+q'',k} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{k''+q'',k} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q,0} \delta_{q'',0} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \left\langle v_{k''}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \delta_{q'',0} \delta_{k',k-q} \\
&- \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'} v_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k} \delta_{q'',k-q-k'} \\
&+ \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \left\langle c_{k'+q}^\dagger v_{k''+q''} \right\rangle \left\langle c_{k'} v_{k''}^\dagger \right\rangle \delta_{k'',k'} \delta_{q'',q} \\
&\hat{=} - V_q \psi_{k-q} \psi_{k'+q}^* \psi_{k'} + V_{k-q-k'} f_{k-q}^v f_{k'+q}^c \psi_{k'} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k}
\end{aligned}$$

Zusammenfassen der Terme

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} [E_{k-q}^v + E_{k'+q}^c - E_{k'}^c - E_k^c] \left[-\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q} + \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_k \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left[-(V_q - V_{k'-k+q}) \psi_k \psi_{k'} \psi_{k'+q}^* \right. \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^v \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ V_{-q} \psi_k f_{k'}^c (1 - f_{k'+q}^c) - V_{k-q-k'} f_k^c \psi_{k'} (1 - f_{k'+q}^c) \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- (V_{-q} - V_{k-q-k'}) f_k^c f_{k'}^c \psi_{k-q} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- V_q \psi_k f_{k'}^c f_{k-q}^v + V_{k'+q-k} f_k^c \psi_{k'} f_{k-q}^v \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k} \\
&+ (V_q - V_{k-q-k'}) f_k^c f_{k'+q}^c \psi_{k-q} \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ V_{-q} f_{k-q}^v f_{k'+q}^c \psi_k - V_{k'+q-k} \psi_{k-q} \psi_{k'+q}^* \psi_k \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^v \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- (V_{-q} - V_{k'+q-k}) \psi_{k-q} f_{k'+q}^c (1 - f_{k'}^c) \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k} \\
&+ V_q \psi_{k-q} \psi_{k'+q}^* \psi_{k'} - V_{k-q-k'} f_{k-q}^v f_{k'+q}^c \psi_{k'} \\
&\left. - \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k} \right] + \frac{d}{dt} (\psi_{k-q} f_k^c \delta_{k',k-q})
\end{aligned}$$

A.2.3 Dritter Term

$$\left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle$$

Hartee-Fock-Faktorisierung:

$$\left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \approx - \left\langle v_k^\dagger c_{k+q} \right\rangle \left\langle v_{k'}^\dagger v_{k'-q} \right\rangle \delta_{q,0} + \left\langle v_k^\dagger v_{k'-q} \right\rangle \left\langle v_{k'}^\dagger c_{k+q} \right\rangle \delta_{k',k+q} = f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q}$$

Korrelationen:

$$\left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle = f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle &= + \left\langle \frac{dv_k^\dagger}{dt} v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger \frac{dv_{k'}^\dagger}{dt} c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &+ \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger \frac{dc_{k+q}}{dt} v_{k'-q} \right\rangle + \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} \frac{dv_{k'-q}}{dt} \right\rangle \\ &- \frac{d}{dt} (f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q}) \\ &= \frac{i}{\hbar} [E_k^v + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v] \left[f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right] \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k+q''}^\dagger v_{k''} v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right. \\ &\quad + \left\langle v_{k-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_k^\dagger v_{k''-q''}^\dagger v_{k'+q''}^\dagger v_{k''} c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_k^\dagger v_{k''-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''-q''} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger v_{k''+q''}^\dagger c_{k+q-q''} v_{k'-q} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k''-q+q''}^\dagger v_{k''-q''} \right\rangle \\ &\quad \left. - \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} c_{k''+q''}^\dagger v_{k'-q-q''} \right\rangle \right] \\ &- \frac{d}{dt} (f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q}) \end{aligned}$$

Faktorisierung

Geht analog zu Abschnitt A.1.1 da die Indices identisch sind.

Zusammenfassen der Terme

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} [E_k^v + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v] \left[f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q} + \delta \left\langle v_k^\dagger v_{k'}^\dagger c_{k+q} v_{k'-q} \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left[-(V_q - V_{k'-k-q}) \psi_{k+q} f_{k'-q}^v (1 - f_{k'}^v) \right. \\
&\quad - \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v \psi_{k'} f_{k''}^v \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&\quad + V_{-q} \psi_{k+q} \psi_{k'-q}^* \psi_{k'} - V_{k+q-k'} f_{k'-q}^v f_{k+q}^c \psi_{k'} \\
&\quad - \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k^* \psi_{k'} \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \\
&\quad + (V_{-q} - V_{k+q-k'}) f_k^v \psi_{k+q} f_{k'-q}^v \\
&\quad - \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v \psi_{k'} f_{k''}^v \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&\quad + V_q \psi_k f_{k'-q}^v f_{k+q}^c - V_{k'-k-q} \psi_{k+q} \psi_k \psi_{k'-q}^* \\
&\quad - \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v f_{k'}^c \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&\quad - (V_{-q} - V_{k'-k-q}) \psi_k \psi_{k'} \psi_{k'-q}^* \\
&\quad + \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v \psi_{k'} f_{k''}^c \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&\quad - V_q \psi_k f_{k'}^v f_{k'-q}^v + V_{k+q-k'} f_k^v \psi_{k'} f_{k'-q}^v \\
&\quad + \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v f_{k'}^v \psi_{k''} \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&\quad - (V_q - V_{k+q-k'}) f_k^v f_{k'}^v \psi_{k+q} \\
&\quad + \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v \psi_{k'} f_{k''}^v \delta_{k',k+q} \delta_{k''-q'',k} \\
&\quad - V_{-q} \psi_k f_{k'}^v (1 - f_{k+q}^c) + V_{k'-k-q} f_k^v \psi_{k'} (1 - f_{k+q}^c) \\
&\quad \left. + \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k+q} \delta_{k''+q'',k} \right] - \frac{d}{dt} (f_k^v \psi_{k'} \delta_{k',k+q})
\end{aligned}$$

A.2.4 Vierter Term

$$\left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle$$

Hartee-Fock-Faktorisierung:

$$\left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \approx - \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'} \right\rangle \left\langle v_{k'+q}^\dagger c_k \right\rangle \delta_{k',k-q} + \left\langle v_{k-q}^\dagger c_k \right\rangle \left\langle v_{k'+q}^\dagger v_{k'} \right\rangle \delta_{q,0} = -\psi_k f_k^v \delta_{k',k-q}$$

Korrelationen:

$$\left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle = -\psi_k f_k^v \delta_{k',k-q} + \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle &= + \left\langle \frac{dv_{k-q}^\dagger}{dt} v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger \frac{dv_{k'+q}^\dagger}{dt} v_{k'} c_k \right\rangle \\ &+ \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger \frac{dv_{k'}}{dt} c_k \right\rangle + \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} \frac{dc_k}{dt} \right\rangle \\ &+ \frac{d}{dt} (\psi_k f_k^v \delta_{k',k-q}) \\ &= \frac{i}{\hbar} [E_{k-q}^v + E_{k'+q}^v - E_{k'}^v - E_k^c] \left[-\psi_k f_k^v \delta_{k',k-q} + \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \right] \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{k'',q''} V_{q''} \left[- \left\langle v_{k''-q''}^\dagger v_{k-q+q''}^\dagger v_{k'} v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \right. \\ &\quad + \left\langle v_{k-q-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k''-q''}^\dagger v_{k'+q+q''}^\dagger v_{k''} v_{k'} c_k \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q-q''}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger c_{k''} v_{k'} c_k \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k''} v_{k'+q''}^\dagger v_{k''-q''} c_k \right\rangle \\ &\quad - \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger c_{k''+q''}^\dagger v_{k'-q''} c_k \right\rangle \\ &\quad + \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_{k''+q''}^\dagger c_{k''-q''} \right\rangle \\ &\quad \left. - \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} v_{k''+q''}^\dagger c_{k-q''} \right\rangle \right] \\ &+ \frac{d}{dt} (\psi_k f_k^v \delta_{k',k-q}) \end{aligned}$$

Faktorisierung

Geht analog zu Abschnitt A.2.2 da die Indices identisch sind.

Zusammenfassen der Terme

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} [E_{k-q}^v + E_{k'+q}^v - E_{k'}^v - E_k^c] \left[-\psi_k f_{k'}^v \delta_{k',k-q} + \delta \left\langle v_{k-q}^\dagger v_{k'+q}^\dagger v_{k'} c_k \right\rangle \right] \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left[(V_q - V_{k'-k+q}) \psi_k f_{k'}^v (1 - f_{k'+q}^v) \right. \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^v f_{k''}^v \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&- V_{-q} \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k'+q} + V_{k-q-k'} f_k^c f_{k'}^v \psi_{k'+q} \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&- (V_{-q} - V_{k-q-k'}) f_{k-q}^v \psi_k f_{k'}^v \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^v f_{k''}^v \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- V_q \psi_{k-q} f_{k'}^v f_k^c + V_{k'-k-q} \psi_{k-q} \psi_k \psi_{k'}^* \\
&+ \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^c f_{k'}^v \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k} \\
&+ (V_q - V_{k-q-k'}) f_{k-q}^v f_{k'+q}^v \psi_k \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^v f_{k''}^v \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k'} \\
&+ V_{-q} \psi_{k-q} f_{k'+q}^v f_k^c - V_{k'+q-k} f_{k-q}^v \psi_{k'+q} f_k^c \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k \psi_{k'} \psi_{k''}^* \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k'} \\
&+ (V_{-q} - V_{k'+q-k}) \psi_{k-q} \psi_{k'+q} \psi_{k'}^* \\
&- \sum_{k'',q''} V_{q''} \psi_k f_{k'}^v f_{k''}^c \delta_{k',k-q} \delta_{k''-q'',k} \\
&- V_q \psi_{k-q} f_{k'+q}^v (1 - f_{k'}^v) + V_{k-q-k'} f_{k-q}^v \psi_{k'+q} (1 - f_{k'}^v) \\
&\left. - \sum_{k'',q''} V_{q''} f_k^v f_{k'}^v \psi_{k''} \delta_{k',k-q} \delta_{k''+q'',k} \right] + \frac{d}{dt} (\psi_k f_{k'}^v \delta_{k',k-q})
\end{aligned}$$

A.2.5 Zusammenfassung

Man erhält unter Anwendung der Markov-Näherung (siehe Gleichung (2.15) in Abschnitt 2.5.1) unter Vernachlässigung der inhomogenen Beiträge des letzten Terms ($\frac{d}{dt}\dots$) und aller Terme, die noch Integrale enthalten (dies entspricht der RPA-Näherung)

$$\begin{aligned}
\frac{d\psi_k}{dt}|_{\text{Scatt.}} = & \left(i\pi\delta\left(E_k^v + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c\right) - P\left(\frac{1}{E_k^v + E_{k'}^c - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^c}\right) \right) \\
& \left[\begin{aligned}
& +(V_q - V_{k'-k-q})\psi_{k+q}\psi_{k'-q}\psi_k^* \\
& - V_{-q}\psi_{k+q}f_{k'-q}^c(1 - f_{k'}^c) + V_{k+q-k'}\psi_{k'-q}f_{k+q}^c(1 - f_{k'}^c) \\
& + (V_{-q} - V_{k'-k-q})\psi_k f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
& + V_q f_{k'-q}^c f_k^v \psi_{k+q} - V_{k'-k-q} f_{k+q}^c f_k^v \psi_{k'-q} \\
& - (V_{-q} - V_{k'-k-q})\psi_k f_{k'}^c f_{k'-q}^c \\
& - V_q \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k'-q} + V_{k+q-k'} f_k^v f_{k'}^c \psi_{k'-q} \\
& + (V_q - V_{k+q-k'})\psi_k f_{k'}^c (1 - f_{k+q}^c) \\
& - V_{-q} f_k^v f_{k'}^c \psi_{k+q} + V_{k'-k-q} \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k+q}
\end{aligned} \right] \\
& + \left(i\pi\delta\left(E_{k-q}^v + E_{k'+q}^c - E_{k'}^c - E_k^c\right) - P\left(\frac{1}{E_{k-q}^v + E_{k'+q}^c - E_{k'}^c - E_k^c}\right) \right) \\
& \left[\begin{aligned}
& -(V_q - V_{k'-k+q})\psi_k \psi_{k'} \psi_{k'+q}^* \\
& + V_{-q} \psi_k f_{k'}^c (1 - f_{k'+q}^c) - V_{k-q-k'} f_k^c \psi_{k'} (1 - f_{k'+q}^c) \\
& - (V_{-q} - V_{k-q-k'}) f_k^c f_{k'}^c \psi_{k-q} \\
& - V_q \psi_k f_{k'}^c f_{k-q}^v + V_{k'+q-k} f_k^c \psi_{k'} f_{k-q}^v \\
& + (V_q - V_{k-q-k'}) f_k^c f_{k'+q}^c \psi_{k-q} \\
& + V_{-q} f_{k-q}^v f_{k'+q}^c \psi_k - V_{k'+q-k} \psi_{k-q} \psi_{k'+q}^* \psi_k \\
& - (V_{-q} - V_{k'+q-k}) \psi_{k-q} f_{k'+q}^c (1 - f_{k'}^c) \\
& + V_q \psi_{k-q} \psi_{k'+q}^* \psi_{k'} - V_{k-q-k'} f_{k-q}^v f_{k'+q}^c \psi_{k'}
\end{aligned} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(i\pi\delta \left(E_k^v + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v \right) - P \left(\frac{1}{E_k^v + E_{k'}^v - E_{k+q}^c - E_{k'-q}^v} \right) \right) \\
& \quad \left[- (V_q - V_{k'-k-q}) \psi_{k+q} f_{k'-q}^v (1 - f_{k'}^v) \right. \\
& \quad + V_{-q} \psi_{k+q} \psi_{k'-q}^* \psi_{k'} - V_{k+q-k'} f_{k'-q}^v f_{k+q}^c \psi_{k'} \\
& \quad + (V_{-q} - V_{k+q-k'}) f_k^v \psi_{k+q} f_{k'-q}^v \\
& \quad + V_q \psi_k f_{k'-q}^v f_{k+q}^c - V_{k'-k-q} \psi_{k+q} \psi_k \psi_{k'-q}^* \\
& \quad - (V_{-q} - V_{k'-k-q}) \psi_k \psi_{k'} \psi_{k'-q}^* \\
& \quad - V_q \psi_k f_{k'}^v f_{k'-q}^v + V_{k+q-k'} f_k^v \psi_{k'} f_{k'-q}^v \\
& \quad - (V_q - V_{k+q-k'}) f_k^v f_{k'}^v \psi_{k+q} \\
& \quad \left. - V_{-q} \psi_k f_{k'}^v (1 - f_{k+q}^c) + V_{k'-k-q} f_k^v \psi_{k'} (1 - f_{k+q}^c) \right] \\
& + \left(i\pi\delta \left(E_{k-q}^v + E_{k'+q}^v - E_{k'}^v - E_k^c \right) - P \left(\frac{1}{E_{k-q}^v + E_{k'+q}^v - E_{k'}^v - E_k^c} \right) \right) \\
& \quad \left[+ (V_q - V_{k'-k+q}) \psi_k f_{k'}^v (1 - f_{k'+q}^v) \right. \\
& \quad - V_{-q} \psi_k \psi_{k'}^* \psi_{k'+q} + V_{k-q-k'} f_k^c f_{k'}^v \psi_{k'+q} \\
& \quad - (V_{-q} - V_{k-q-k'}) f_{k-q}^v \psi_k f_{k'}^v \\
& \quad - V_q \psi_{k-q} f_{k'}^v f_k^c + V_{k'-k-q} \psi_{k-q} \psi_k \psi_{k'}^* \\
& \quad + (V_q - V_{k-q-k'}) f_{k-q}^v f_{k'+q}^v \psi_k \\
& \quad + V_{-q} \psi_{k-q} f_{k'+q}^v f_k^c - V_{k'+q-k} f_{k-q}^v \psi_{k'+q} f_k^c \\
& \quad + (V_{-q} - V_{k'+q-k}) \psi_{k-q} \psi_{k'+q} \psi_{k'}^* \\
& \quad \left. - V_q \psi_{k-q} f_{k'+q}^v (1 - f_{k'}^v) + V_{k-q-k'} f_{k-q}^v \psi_{k'+q} (1 - f_{k'}^v) \right]
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Literaturverzeichnis

- [1] H.Haug, S.W.Koch *Quantum Theory of the optical and electronical properties of Semiconductors*, 3. Auflage, World Scientific, 2001
- [2] W.W.Chow, S.W.Koch *Semiconductor Laser Fundamentals*, 1. Auflage, Springer Verlag, 1999
- [3] F.Jahnke *A Many-Body Theory for Laser Emission and Excitonic Effects in Semiconductor Microcavities*, Habilitationsschrift, Universität Marburg, 1996
- [4] W.Schäfer, M. Wegener *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*, 1. Auflage, Springer-Verlag, 2002
- [5] S.Haas *Kohärente und inkohärente Prozesse in der Halbleiteroptik*, Diplomarbeit, Universität Marburg, 1994
- [6] S.Haas *Theorie intensitätsabhängiger Propagationseffekte in Mehrfach-Quantenfilm-Strukturen*, Dissertation, Universität Marburg, 1998
- [7] T. Kuhn *Ladungsträgerdynamik in Halbleitersystemen fern vom Gleichgewicht: Elektronisches Rauschen und kohärente Prozesse*, Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, 1994
- [8] R.Binder et.al. *Carrier-carrier scattering and optical dephasing in highly excited semiconductors*, Physical Review B **45**; 1107 (1992)
- [9] T.Woltnerink et.al. *Role of exchange interaction in Coulomb quantum kinetics*, Physical Review B **67**; 115311 (2003)
- [10] M.Lindberg and S.W.Koch *Effective Bloch equations for semiconductors*, Physical Review B **38**; 3342 (1988)
- [11] J.Seebeck *Dichtematrix-Formulierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Halbleitern*, Studienarbeit, Universität Bremen, 2003

- [12] H.Haken *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 2. Auflage, Teubner-Verlag, 1993
- [13] A.L.Fetter, J.D. Walecka *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, 1. Auflage, Verlag McGraw-Hill, 1971
- [14] I.N.Bronstein, K.A.Semendjajew *Taschenbuch der Mathematik*, 25. Auflage, Teubner-Verlag, 1991