

Einfluss von Polaron- und Memory- Effekten auf die Elektron-Phonon-Streuung in Halbleitern

Studienarbeit

von

Kolja Schuh

angefertigt am

Institut für Theoretische Physik

der Universität Bremen

2. Oktober 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Elektronische Streuprozesse durch Wechselwirkung mit LO-Phononen	5
2.1	Betrachtetes System	5
2.2	Bewegungsgleichungen	8
2.3	Faktorisierungsnäherung	10
2.4	Markov-Näherung	11
2.5	Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung	13
2.6	Memory-Effekte	14
2.7	Berücksichtigung von renormierten Energien	15
2.7.1	Bewegungsgleichung für retardierte Green-Funktionen	15
2.7.2	Spektralfunktionen	19
2.7.3	Besetzungskinetik	19
3	Relaxationsdynamik angeregter Ladungsträger	21
3.1	Markov-Näherung	21
3.2	Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung	23
3.3	Berücksichtigung von Memory-Effekten	25
3.4	Berücksichtigung von Polaron-Effekten	26
3.4.1	Green-Funktionen	26
3.4.2	Spektralfunktion	30
3.4.3	Besetzungskinetik	35
4	Zusammenfassung und Ausblick	38
A	Anhang	40
A.1	Polare Kopplung in Ionenkristallen	40
A.2	Exzitonsische Einheiten	42
A.3	Nummerische Methoden	42
A.4	Verwendete Parameter und Konstanten	43
B	Literaturverzeichnis	44

1 Einleitung

In dieser Studienarbeit soll die Elektron-Phonon-Streuung anhand verschiedener Modelle untersucht werden. Da das Relaxieren von Elektronen bei niedriger Anregungsdichte maßgeblich durch Elektron-Phonon-Streuung bewirkt wird, ist diese Problematik insbesondere dort interessant, wo eine Relaxation notwendig ist. Dies ist beispielsweise für optoelektronische Halbleiterbauelemente wie Laser der Fall, bei denen die Elektronen in der Umgebung des Γ -Punktes rekombinieren, aber abseits davon elektrisch gepumpt werden, so dass die Elektronen erst relaxieren müssen. Weil Galliumarsenid häufig für derartige Anwendungen genutzt wird, wird hier die Besetzungskinetik des Leitungsbandes des entsprechenden Volumenmaterials betrachtet.

Zum Studium der Besetzungskinetik wird auf Basis einer mikroskopischen Beschreibung die Relaxation einer vorgegebenen Nichtgleichgewichtsladungsträgerbesetzung betrachtet. Dazu wird zuerst im zweiten Kapitel das Modellsystem erläutert und der zugehörige Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung aufgestellt. Dabei wird für die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und Phononen die Fröhlich-Kopplung verwendet, da dies bei den betrachteten Temperaturen der dominierende Beitrag zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist. Zu diesem System werden verschiedene Modelle vorgestellt, wobei sowohl Bewegungsgleichungsmethoden, als auch die Methode der Green-Funktionen Anwendung finden.

Zunächst werden die daraus resultierenden Bewegungsgleichungen für die Ladungsträgerdynamik unter Verwendung einer Hartree-Fock-Faktorisierung und der Markov-Näherung gelöst (Boltzmann-Streuung). Auf diesem Niveau wird die Energieerhaltung bei der Streuung durch eine δ -Funktion beschrieben; diese wird dann, um die Lebensdauer der angeregten Zustände zu berücksichtigen, durch eine Lorentzfunktion ersetzt. In einem nächsten Schritt wird, um Memory-Effekte mitzunehmen, auf die Markov-Näherung verzichtet. Ferner werden Green-Funktionen und damit Spektralfunktionen für das System bestimmt, die die aufgrund der Elektron-Phonon-Wechselwirkung renormierten Energien beinhalten, so dass die Besetzungskinetik anstelle der freien Teilcheneigenschaften mit Polaroneneigenschaften berechnet werden kann.

Im dritten Kapitel werden die Ergebnisse, die aus diesen Modellen numerisch mit Hilfe von Computern gewonnen wurden, vorgestellt. Aufgrund der in Form einer δ -Funktion beschriebenen exakten Energieerhaltung in Markov-Näherung ohne Berücksichtigung der Lebensdauer werden die Elektronen in diesem Modell nur um exakt eine Phononenenergie gestreut, so dass sich bei vorgegebener gaußförmiger Anfangsverteilung zeitlich versetzt Peaks in Form der Anfangsverteilung im Abstand einer Phononenenergie bilden (Kaskaden). Dies bedeutet insbesondere, dass sich keine Fermiverteilung einstellt. Eine Abkehr von der exakten Energieerhaltung aufgrund von Lebensdauereffekten der renormierten Quasiteilchen kann in einfacher Näherung beschrieben werden, indem die δ -Funktion durch eine Lorentzfunktion ersetzt wird. Dann können die Elektronen auch um Energien in der Umgebung einer Phononenenergie gestreut werden. Deshalb ist davon auszugehen, dass sich eine Fermi-artige Verteilung einstellt und sich aber weiterhin für kurze Zeiten Kaskaden bilden, die sich zunehmend verbreitern, da die Streuungen weiterhin überwiegend nahe einer Phononenenergie stattfinden. Ohne Markov-Näherung bewirken die Memory-Effekte bei einer sich schnell ändernden Besetzung eine zusätzliche Aufweitung der Energieerhaltung, so dass sich die Kaskaden in diesen Fällen stärker

verbreitern.

Die Green-Funktionen liefern die im vorherigen Absatz "von Hand" durch die Lorentzfunktion eingebrachte begrenzte Lebensdauer der Zustände, wobei insbesondere eine lange Lebensdauer von Zuständen unterhalb einer Phononenenergie zu erwarten ist, die zu einer langsameren Streuung in diesem Bereich führt. Auch die Verwendung von renormierten Energien bewirken für das betrachtete System eine geringfügige Änderung der Streuung. Die Spektralfunktionen der Polaronen liefern dabei neben Vermischungen und Verbreiterungen der freien Energien auch Phononrepliken, die als neue Quasiteilchen interpretiert werden können. Darüber hinaus wird das Verhalten für verschiedene Temperaturen betrachtet, wobei eine höhere Temperatur im Wesentlichen ein schnelleres Verlaufen der Kaskaden verursacht.

Im Anhang wird genauer auf die Matrixelemente der Fröhlichkopplung und kurz auf die verwendeten numerischen Methoden und exzitonischen Einheiten eingegangen.

2 Elektronische Streuprozesse durch Wechselwirkung mit LO-Phononen

2.1 Betrachtetes System

Es soll die Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Leitungsband von dreidimensionalen Galliumarsenid (GaAs) untersucht werden. Kann durch die Beschränkung auf Prozesse in der Umgebung des Γ -Punktes eine parabolische Dispersion angesetzt werden. Damit beschränkt sich der Einfluss des Gitterperiodischen Potentials auf die Berücksichtigung einer effektive Masse μ . Die Wechselwirkung der Elektronen untereinander wird nicht betrachtet. Als dominierender Prozess für die Wechselwirkung der Elektronen mit Gitterschwingungen bei Temperaturen oberhalb von etwa $50K$ wird die polare Kopplung über LO-Phononen betrachtet (s. Kap. A.1). Für die LO-Phononen wird aufgrund der flachen Dispersion eine konstante Energie angenommen, was insbesondere für kleine Impulse eine gute Näherung darstellt. Ferner sollen sich die LO-Phononen im thermodynamischen Gleichgewicht mit einem großen Wärmereservoir befinden, so dass die Besetzung durch eine äußere Temperatur vorgegeben ist und nicht durch die Wechselwirkung mit den Elektronen verändert wird. Da die Elektron-Phonon-Wechselwirkung nur Elektronen mit gleichem Spin koppelt, werden nur Elektronen mit gleichem Spin berücksichtigt, weshalb dieser nicht explizit mitgeschrieben wird.

Im Folgenden wird die Besetzungswahrscheinlichkeit f_k der Elektronenzustände k betrachtet, wobei k ein Vektor des dreidimensionalen Impulsraumes ist. Die Besetzungsdynamik soll durch Lösung der zugehörigen Bewegungsgleichungen bestimmt werden. Dazu wird zuerst der Hamilton-Operator des Modellsystems in zweiter Quantisierung aufgestellt, um die daraus resultierenden Bewegungsgleichungen für f_k unter Verwendung einer Faktorisierungsnäherung und der Markov-Näherung zu lösen. Dies führt zu einer exakten Energieerhaltung, die durch eine *delta*-Funktion beschrieben wird. Diese wird dann, um die Lebensdauer der angeregten Zustände zu berücksichtigen, durch eine Lorentzfunktion ersetzt. Anschließend wird, um den Einfluss von Memory-Effekte zu untersuchen, auf die Markov-Näherung verzichtet. Darüber hinaus werden Green-Funktionen genutzt, um die Besetzungskinetik unter Berücksichtigung von Polaroneneigenschaften zu berechnen.

Hamilton-Operator

Der Hamilton-Operator dieses Systems ist die Summe der Hamilton-Operatoren der Elektronen H_e , der Phononen H_{pn} und der Elektron-Phonon-Wechselwirkung H_{e-pn} ,

$$H = H_e + H_{pn} + H_{e-pn} . \quad (1)$$

Dabei gilt für die Teiloperatoren in zweiter Quantisierung

$$H_e = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k , \quad (2)$$

$$H_{pn} = \sum_q \hbar \omega_{LO} \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right) , \quad (3)$$

$$H_{e-pn} = \sum_{k,q} M_q a_{k+q}^\dagger a_k \left(b_q + b_{-q}^\dagger \right) . \quad (4)$$

Elektronen

Der Hamilton-Operator der Elektronen ist

$$H_e = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k , \quad (5)$$

wobei a_k^\dagger Erzeugungs- und a_k Vernichtungsoperator für ein Elektron im Zustand k ist. Es gelten die Anti-Vertauschungsrelationen für Fermionen,

$$[a_k, a_{k'}^\dagger]_+ = \delta_{kk'} , \quad [a_k, a_{k'}]_+ = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger]_+ = 0 . \quad (6)$$

Dabei ist ϵ_k die freie Energie eines Elektrons im Zustand k mit der Dispersion

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (7)$$

mit μ effektive Masse der Elektronen und $a_k^\dagger a_k$ Besetzungsoperator für den Zustand k , dessen Eigenwerte die Besetzung des Zustandes wiedergeben, so dass $\epsilon_k a_k^\dagger a_k$ der Operator für die im Zustand k vorhandene freie Energie ist und diese über k summiert die freie Gesamtenergie liefert. Als Energie-Nullpunkt wurde die Energie der Leitungselektronen am *Gamma*-Punkt gewählt, da in den folgenden Betrachtungen nur Differenzen der elektronischen Energien auftauchen.

Phononen

Der Hamilton-Operator der Phononen ist

$$H_{pn} = \sum_q \hbar \omega_{LO} \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right) , \quad (8)$$

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

$$[b_q, b_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'} , \quad [b_q, b_{q'}] = [b_q^\dagger, b_{q'}^\dagger] = 0 . \quad (9)$$

Die Energie eines Phonons ist $\hbar\omega_{LO}$, die für alle Moden gleich ist, da nur LO-Phononen betrachtet werden, für die eine konstante Energie angenommen wird. Analog zu den Elektronen ist $b_q^\dagger b_q$ Besetzungsoperator für die Phononenmoden q und

$$N = \langle b_q^\dagger b_q \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_b T}} - 1} \quad (10)$$

die Besetzungswahrscheinlichkeit, die aufgrund der konstanten Energie der Phononen im thermodynamischen Gleichgewicht nicht von der Mode, sondern lediglich von der Temperatur T abhängt und der Bose-Einstein-Statistik folgt. k_b ist die Boltzmannkonstante.

Fröhlich-Kopplung

Der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator ist

$$H_{e-pn} = \sum_{k,q} M_q a_{k+q}^\dagger a_k (b_q + b_{-q}^\dagger) . \quad (11)$$

Jeder der beiden Summanden unter der Summe beschreibt eine elementare Wechselwirkung. So setzt sich $a_{k+q}^\dagger a_k b_q$ zusammen aus der Vernichtung eines Elektrons im Zustand k und eines Phonons in der Mode q , sowie der Erzeugung eines Elektrons im Zustand $k+q$, der Term beschreibt also die Streuung eines Elektrons vom Zustand k in den Zustand $k+q$ durch Absorption eines Phonons aus der Mode q . Dagegen liefert $a_{k+q}^\dagger a_k b_{-q}^\dagger$ die Streuung eines Elektrons vom Zustand k in den Zustand $k+q$ durch Emission eines Phonons in die Mode $-q$. Durch das Summieren über alle Ausgangszustände der Elektronen k und alle Phononenmoden q sind alle möglichen elementaren Wechselwirkungen dieser Art im Wechselwirkungs-Hamilton-Operator berücksichtigt.

Dabei ist M_q das Matrixelement der Wechselwirkung, das die Stärke der Kopplung von Elektronen mit LO-Phononen angibt. Dieses ist im Fröhlich-Modell

$$\begin{aligned} |M_q|^2 &= \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\hbar\omega_{LO}}{2V} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \\ &= 4\pi\alpha E_B^2 \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \frac{a_0^3}{(q \cdot a_0)^2} , \end{aligned} \quad (12)$$

wobei

$$M_q = M_{-q}^* \quad (13)$$

sein muss, weil H hermitesch ist, und

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left(\frac{m}{2\hbar\omega_{LO}} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \\ &= \sqrt{\frac{E_B}{\hbar\omega_{LO}}} \left(1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

die dimensionslose Fröhlich-Kopplungskonstante ist, die materialabhängig ist und experimentell bestimmt werden kann (zur Herleitung siehe Kap. A.1). In Störungsrechnung

für $T = 0$ entspricht $\alpha \cdot \hbar\omega_{LO}$ der Energieabsenkung der Elektronen durch die Wechselwirkung mit den LO-Phononen der Energie $\hbar\omega_{LO}$ [1]. Diese Energieabsenkung wird Polaronen-Shift genannt. Ferner liefert die Störungsrechnung für $T = 0$ eine durch die Wechselwirkung um $\alpha \cdot m/6$ erhöhte effektive Masse [1].

Der jeweils zweite Term in Gl. (12) und (14) ist in exzitonischen Einheiten angegeben, wobei E_B die exzitonische Grundzustandsenergie und a_0 der exzitonische Bohrradius ist. Diese exzitonischen Einheiten ermöglichen es, mit dimensionslosen Größen zu rechnen. Zu exzitonischen Einheiten siehe auch Kap. A.2. Ferner ist ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante des Vakuums, ϵ die statische Dielektrizitätskonstante von GaAs und ϵ_∞ die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante, e ist die Elementarladung.

2.2 Bewegungsgleichungen

Es gilt nun, für die Besetzungswahrscheinlichkeit $f_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$ eine Bewegungsgleichung aufzustellen:

$$\frac{d}{dt} f_k = \frac{d}{dt} \langle a_k^\dagger a_k \rangle = \left\langle \frac{da_k^\dagger}{dt} a_k \right\rangle + \left\langle a_k^\dagger \frac{da_k}{dt} \right\rangle . \quad (15)$$

Dabei gilt im Heisenberg-Bild gemäß Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$-i\hbar \frac{d}{dt} a(t) = [H, a(t)] \quad (16)$$

für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$-i\hbar \frac{d}{dt} a_k = -\epsilon_k a_k - \sum_q M_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{k-q} , \quad (17)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} a_k^\dagger = \epsilon_k a_k^\dagger - \sum_q M_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{k+q}^\dagger , \quad (18)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} b_q = -\hbar\omega_{LO} b_q - M_{-q} \sum_k a_{k-q}^\dagger a_k , \quad (19)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} b_q^\dagger = \hbar\omega_{LO} b_q^\dagger + M_q \sum_k a_{k+q}^\dagger a_k . \quad (20)$$

Somit folgt für die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Elektronenzustände k die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} f_k = \frac{i}{\hbar} \sum_q M_q \left[\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle + \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle - \langle b_{-q}^\dagger a_k^\dagger a_{k-q} \rangle - \langle b_q a_k^\dagger a_{k-q} \rangle \right] . \quad (21)$$

Mit $M_q = M_{-q}^*$ gilt

$$\sum_q M_q \langle b_{-q}^\dagger a_k^\dagger a_{k-q} \rangle = \sum_q M_q^* \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle^* , \quad (22)$$

$$\sum_q M_q \langle b_q a_k^\dagger a_{k-q} \rangle = \sum_q M_q^* \langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle^* , \quad (23)$$

so dass sich Gl. (21) zu

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k &= \frac{i}{\hbar} \left[\sum_q M_q \left(\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle + \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \right) - c.c. \right] \\ &= -\frac{2}{\hbar} \Im \sum_q M_q \left(\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle + \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \right) \end{aligned} \quad (24)$$

vereinfacht, wobei *c.c.* das komplex konjugierte des vorangegangenen Terms ist. In der Bewegungsgleichung für die Besetzung f_k entstehen Erwartungswerte von drei Operatoren, die Korrelationsfunktionen genannt werden, da diese die Wahrscheinlichkeit eines korrelierten Ereignisses mehrerer Teilchen beschreiben, wobei es sich hier um phononassistierte Besetzungen handelt. So beschreibt $\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle$ die Wahrscheinlichkeit, unter Absorption eines Phonons aus der Mode q ein Elektron im Zustand k zu vernichten und im Zustand $k+q$ zu erzeugen. Die Bewegungsgleichung beinhaltet, da eben nur die Wechselwirkung mit Phononen betrachtet wird, nur phononassistierte Übergangsamplituden und keine weiteren Korrelationsfunktionen.

Für $\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle$ ergibt sich unter Verwendung von Gl. (16)-(20) wiederum

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle &= (\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k) \cdot \langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad + M_{-q} \sum_{k'} \langle a_{k'-q}^\dagger a_{k'} a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad + \sum_{q'} M_{q'} \langle b_{-q}^\dagger (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger) a_{k+q+q'}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad - \sum_{q'} M_{q'} \langle b_{-q}^\dagger (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger) a_{k+q}^\dagger a_{k-q'} \rangle , \end{aligned} \quad (25)$$

sowie für $\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle$ folgt

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle &= (-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k) \cdot \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad - M_q \sum_{k'} \langle a_{k'-q}^\dagger a_{k'} a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad + \sum_{q'} M_{q'} \langle b_q b_{-q'}^\dagger a_{k+q+q'}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad - \sum_{q'} M_{q'} \langle b_q b_{-q'}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_{k-q'} \rangle . \end{aligned} \quad (26)$$

Die Bewegungsgleichung für den Erwartungswert von zwei Operatoren $f_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$ liefert also Erwartungswerte von drei Operatoren, deren Bewegungsgleichungen Erwartungswerte von vier Operatoren beinhalten und so weiter. Dies verhindert, f_k durch Bestimmung der Erwartungswerte wieder auf sich zurückzuführen und so eine geschlossene Bewegungsgleichung für f_k zu erhalten, da dies die Berechnung von Erwartungswerten von beliebig vielen Operatoren erfordern würde; dieses Problem wird Hierarchieproblem genannt.

2.3 Faktorisierungsnäherung

Eine Möglichkeit mit dem Hierarchieproblem umzugehen ist, das Gleichungssystem auf dieser Ebene von vier Operatoren abzuschließen, indem man faktorisiert. Die Näherung besteht dabei darin, Erwartungswerte von vier Operatoren so in Produkte von Erwartungswerten von jeweils zwei Operatoren zu zerlegen, dass nur makroskopische Erwartungswerte, also Besetzungen, entstehen. Andere Kombinationen von Operatoren werden nicht berücksichtigt, weil deren Erwartungswerte klein gegenüber den Berücksichtigten sind. Dies bedeutet für die Erwartungswerte von vier elektronischen Operatoren

$$\langle a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_l a_{l'} \rangle \approx \langle a_k^\dagger a_{l'} \rangle \langle a_{k'}^\dagger a_l \rangle \delta_{kl'} \delta_{k'l} - \langle a_k^\dagger a_l \rangle \langle a_{k'}^\dagger a_{l'} \rangle \delta_{kl} \delta_{k'l'} . \quad (27)$$

Diese Näherung wird als Hartree-Fock-Faktorisierung bezeichnet. Für ein einkomponentiges Elektronengas bei räumlicher Homogenität entspricht dabei das Ergebnis der aus der Methode des selbstkonsistenten Potentials begründeten Hartree-Fock-Näherung (siehe [5]). Die Erwartungswerte von jeweils zwei elektronischen und phononischen Operatoren sollen ebenfalls so in Erwartungswerte mit zwei Operatoren faktorisiert werden, dass makroskopische Besetzungsfunktionen entstehen:

$$\langle b_q^\dagger b_{q'} a_k^\dagger a_{k'} \rangle \approx \langle b_q^\dagger b_{q'} \rangle \langle a_k^\dagger a_{k'} \rangle \delta_{qq'} \delta_{kk'} . \quad (28)$$

Damit vereinfachen sich Gl. (25) und (26) zu

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle &= (\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k) \cdot \langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad + M_{-q} [f_k(1 - f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q})] , \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle &= (-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k) \cdot \langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle \\ &\quad + M_{-q} [-f_k(1 - f_{k+q}) + (1 + N)(f_k - f_{k+q})] \end{aligned} \quad (30)$$

mit den formalen Lösungen

$$\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)(t-t')} M_{-q} [f_k(1 - f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q})]_{t'} , \quad (31)$$

$$\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)(t-t')} M_{-q} [-f_k(1 - f_{k+q}) + (1 + N)(f_k - f_{k+q})]_{t'} . \quad (32)$$

Dabei wird f zur Zeit t' durch $[f]_{t'}$ dargestellt. Durch die Faktorisierung der Erwartungswerte von vier Operatoren kann die Zeitentwicklung der für die Besetzungskinetik der Elektronen benötigten Erwartungswerte von jeweils drei Operatoren wieder durch verschiedene Besetzungen bestimmt werden, so dass das Hierarchieproblem abbricht und damit gelöst ist.

Die Korrelationsfunktionen und somit die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Elektronenzustände f_k hängen also im Allgemeinen explizit von der Entwicklung in der Vergangenheit und nicht nur vom Zustand zur aktuellen Zeit t ab, was als Memory-Effekt bezeichnet wird.

2.4 Markov-Näherung

Geht man davon aus, dass sich die Besetzungsfunktionen nur langsam in der Zeit ändern, kann man diese durch die aktuelle Besetzungsfunktion nähern. Diese Markov-Näherung bewirkt damit, dass die Zeitintegrale nicht mehr von der gesuchten Funktion f_k abhängig sind und sich die Lösungen zu

$$\left\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \left[f_k(1 - f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q}) \right]_t M_{-q} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)(t-t')}, \quad (33)$$

$$\left\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} \left[-f_k(1 - f_{k+q}) + (1 + N)(f_k - f_{k+q}) \right]_t M_{-q} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)(t-t')} \quad (34)$$

vereinfachen. Die verbleibenden Integrale lassen sich mit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}E(t-t')} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Theta(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}E\tau} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{1}{\omega - i\epsilon'} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega + \frac{E}{\hbar})\tau} \quad \epsilon' \rightarrow 0, \epsilon' > 0 \\ &= \frac{i}{E/\hbar + i\epsilon'} = \frac{i\hbar}{E + i\epsilon} \quad \epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0 \end{aligned} \quad (35)$$

bestimmen. Dabei wurde die Theta-Funktion in der Form

$$\Theta(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega\tau}}{\omega - i\epsilon'} \quad \epsilon' \rightarrow 0, \epsilon' > 0$$

verwendet. Die Gleichungen (33) und (34) vereinfachen sich damit zu

$$\left\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} [f_k(1 - f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q})]_t M_{-q} \frac{i\hbar}{\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\epsilon}, \quad (36)$$

$$\left\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t = \frac{i}{\hbar} [-f_k(1 - f_{k+q}) + (1 + N)(f_k - f_{k+q})]_t M_{-q} \frac{i\hbar}{-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\epsilon}, \quad (37)$$

wobei $\epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0$ gilt.

Dies in Gl. (24) eingesetzt liefert mit der Dirac-Identität $\frac{1}{E+i\epsilon} = P\frac{1}{E} - i\pi\delta(E)$ $\epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |M_q|^2 \left\{ [f_k(1 - f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q})] \delta(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_{LO}) \right. \\ &\quad \left. + [-f_k(1 - f_{k+q}) + (1 + N)(f_k - f_{k+q})] \delta(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_{LO}) \right\}, \end{aligned} \quad (38)$$

was nach einzelnen Prozessen aufgeschlüsselt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |M_q|^2 \left\{ -f_k(1 - f_{k+q})(1 + N)\delta(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_{LO}) \right. \\ &\quad - f_k(1 - f_{k+q})N\delta(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_{LO}) \\ &\quad + (1 - f_k)f_{k+q}(1 + N)\delta(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_{LO}) \\ &\quad \left. + (1 - f_k)f_{k+q}N\delta(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_{LO}) \right\} \end{aligned} \quad (39)$$

entspricht. Wie an den Vorzeichen zu erkennen ist, liefern die ersten beiden Terme die Ausstreuung aus dem Zustand k und der dritte und vierte Term die Einstreuung in den Zustand k . Der erste und dritte Term stellen die Emission eines Phonons dar, wobei die 1 im Faktor $(1 + N)$ die spontane und N die stimulierte Emission in die Phononenmode $\pm q$ wiedergibt. Dagegen stellen der zweite und vierte Term die Absorption eines Phonons aus der Mode $\pm q$ dar. Die Streuraten sind dem Pauli-Prinzip entsprechend, nach dem ein fermionischer Zustand maximal durch ein Fermion besetzt sein kann, jeweils proportional zur Besetzung f_k des Ausgangszustands und zur Nichtbesetzung $(1 - f_k)$ des Zielzustands. Während die δ -Funktionen die Energieerhaltung bei den jeweiligen Streuprozessen beschreiben, wird die Impulserhaltung über die Argumente der Besetzungsfunktionen sichergestellt.

Auswertung

Unter den betrachteten Bedingungen kann die Besetzung f_k als Funktion des Betrages von k betrachtet werden (soweit dies per Anfangsbedingung erfüllt ist). Im Folgenden bezeichnen $x = |k|a_0$ und $x' = |k'|a_0$ den Radialanteil der dimensionslosen Wellenzahlen in exzitonischen Einheiten. Mit der Dispersion (7), die in exzitonischen Einheiten

$$\frac{\epsilon_x}{E_B} = \frac{m}{\mu} x^2 \quad (40)$$

entspricht, wobei m die Elektronenmasse und μ die effektive Elektronenmasse ist, lassen sich die δ -Funktionen zu

$$\begin{aligned} E_B \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'} \pm \hbar\omega_{LO}) &= \delta\left(\frac{\epsilon_k}{E_B} - \frac{\epsilon_{k'}}{E_B} \pm \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B}\right) \\ &= \delta\left(\frac{m}{\mu} x^2 - \frac{m}{\mu} x'^2 \pm \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B}\right) \\ &= \frac{1}{2\frac{m}{\mu} x'_\pm} \delta(x' - x'_\pm) \end{aligned} \quad (41)$$

mit

$$x'_\pm = +\sqrt{x^2 \pm \frac{\mu}{m} \frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B}} \quad (42)$$

vereinfachen. x'_\pm beschreiben die Zustände, in die aus dem Zustand x und aus denen in den Zustand x entsprechend der δ -Funktionen also mit Energieerhaltung gestreut werden kann. Während es für jeden Zustand x ein x_+ gibt, das beiträgt, ist dies bei x_- nur für die Zustände, die mehr als eine Phonon-Energie oberhalb des Γ -Punktes liegen, der Fall, da es ansonsten keinen passenden Zustand gibt.

Um die δ -Funktionen auswerten zu können, muss die Summe in ein Integral umgeformt

werden. Mit Gl. (12) ergibt sich für eine kugelsymmetrische Besetzungsfunktion $g(k')$

$$\begin{aligned} \sum_{k'} |M_{k-k'}|^2 g(k') &= \frac{V}{8\pi^3} \int d^3k' |M_{k-k'}|^2 g(k') \\ &= \frac{\alpha}{\pi} E_B^2 \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx' g(x') \int_{-1}^1 dz \frac{1}{x^2 + x'^2 - 2xx'z} \\ &= \frac{\alpha}{\pi} E_B^2 \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx' g(x') \frac{x'}{x} \ln \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right|. \end{aligned} \quad (43)$$

Die zweite Umformung wurde nach [6] durchgeführt. Für die numerische Berechnung wird auch $x = 0$ benötigt, wobei sich analytisch

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{x'_\pm}{x} \ln \left| \frac{x+x'_\pm}{x-x'_\pm} \right| = 2 \quad (44)$$

ergibt.

Damit wird aus Gl. (38) durch Auswertung der δ -Funktionen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_x &= -\frac{E_B}{\hbar} \alpha \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \frac{\mu}{m} \\ &\quad * \left\{ \left[(1-f_x) f_{x'_+} (1+N) - f_x (1-f_{x'_+}) N \right] \frac{x'_+}{x} \ln \left| \frac{x+x'_+}{x-x'_+} \right| \right. \\ &\quad \left. + \left[(1-f_x) f_{x'_-} N - f_x (1-f_{x'_-}) (1+N) \right] \frac{x'_-}{x} \ln \left| \frac{x+x'_-}{x-x'_-} \right| \Theta(x'_-) \right\}, \end{aligned} \quad (45)$$

so dass die Summation über x' entfällt. Es sind lediglich Wechselwirkungen mit den elektronischen Zuständen möglich, die in jedem Einzelprozess die Energieerhaltung erlauben, also die Zustände, die genau eine Phononenenergie oberhalb oder genau eine Phononenenergie unterhalb des betrachteten Zustands x liegen. Dabei werden Zustände, die eine Phononenenergie oberhalb des betrachteten Zustands liegen, mit x'_+ und Zustände, die eine Phononenenergie unterhalb des betrachteten Zustands liegen, mit x'_- bezeichnet, wobei es nur Zustände x'_- gibt, sofern x bei mindestens einer Phononenenergie liegt.

2.5 Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung

Um zu berücksichtigen, dass die betrachteten Zustände nur eine endliche Lebensdauer haben, werden in einer ersten Näherung frühere Zeiten exponentiell geringer berücksichtigt; dazu kann in Gl. (33) und (34) der Faktor $e^{-\Gamma/\hbar(t-t')}$ phänomenologisch eingefügt werden, was zu einer Energieunschärfe führt,

$$\begin{aligned} \left\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t &= \frac{i}{\hbar} [f_k(1-f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q})]_t M_{-q} \\ &\quad * \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\Gamma)(t-t')}, \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \left\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t &= \frac{i}{\hbar} [-f_k(1-f_{k+q}) + (1+N)(f_k - f_{k+q})]_t M_{-q} \\ &\quad * \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\Gamma)(t-t')}. \end{aligned} \quad (47)$$

Mit

$$\Re \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\Gamma)(t-t')} = \Re \int_0^{\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\Gamma)\tau} = \frac{\hbar\Gamma}{E^2 + \Gamma^2} \quad (48)$$

ergibt sich für f_k zur numerischen Auswertung durch Einsetzen in die Bewegungsgleichung (24) mit Gl. (43)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_x = & -\frac{E_B^2}{\hbar^2} \frac{2\alpha}{\pi} \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} dx' \frac{x'}{x} \ln \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right| \\ & * \left\{ [(1-f_x)f_{x'}(1+N) - f_x(1-f_{x'})N] \frac{\hbar\Gamma}{(\epsilon_{x'} - \epsilon_x + \hbar\omega_{LO})^2 + \Gamma^2} \right. \\ & \left. + [(1-f_x)f_{x'}N - f_x(1-f_{x'})(1+N)] \frac{\hbar\Gamma}{(\epsilon_{x'} - \epsilon_x - \hbar\omega_{LO})^2 + \Gamma^2} \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Anders als ohne Lorentzverbreiterung (45) gibt es hier aufgrund der Energieunschärfe keine exakte Energieerhaltung für die Einzelprozesse; die Besetzung des betrachteten Zustands wechselwirkt nicht nur mit der Besetzung der Zustände, die eine Phononenenergie über bzw. unter dem betrachteten Zustand liegen, sondern mit allen Zuständen in deren energetischer Umgebung. Die Stärke der Wechselwirkung fällt dabei lorentzförmig mit zunehmendem energetischen Abstand von x'_+ und x'_- , also den Zuständen, in die ohne Lorentzverbreiterung gestreut werden kann.

2.6 Memory-Effekte

Verzichtet man auf die Markov-Näherung, muss man auf die formalen Lösungen der Korrelationsfunktionen (31) und (32) zurückgreifen. Berücksichtigt man die begrenzte Lebensdauer der Zustände analog zum vorherigen Kapitel, werden diese zu

$$\begin{aligned} \left\langle b_{-q}^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t = & \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\Gamma)(t-t')} \\ & * M_{-q} \left[f_k(1 - f_{k+q}) + N(f_k - f_{k+q}) \right]_{t'}, \end{aligned} \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \left\langle b_q a_{k+q}^\dagger a_k \right\rangle_t = & \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\Gamma)(t-t')} \\ & * M_{-q} \left[-f_k(1 - f_{k+q}) + (1+N)(f_k - f_{k+q}) \right]_{t'}. \end{aligned} \quad (51)$$

Setzt man diese in die Bewegungsgleichung für f_k (24) ein, erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k(t) = & \frac{2}{\hbar^2} \sum_q |M_q|^2 \Re \int_{-\infty}^t dt' \\ & * \left\{ [-f_k(t')(1 - f_{k+q}(t'))(1+N) + (1 - f_k(t'))f_{k+q}(t')N] e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_{LO} + i\Gamma)(t-t')} \right. \\ & \left. + [-f_k(t')(1 - f_{k+q}(t'))N + (1 - f_k(t'))f_{k+q}(t')(1+N)] e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_{LO} + i\Gamma)(t-t')} \right\} \end{aligned} \quad (52)$$

und zur numerischen Auswertung unter Verwendung von Gl. (43)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_x(t) = & \frac{2\alpha}{\pi} \frac{E_B^2}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx' f_{x'} \frac{x'}{x} \ln \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right| \Re \int_{-\infty}^t dt' \\ & * \left\{ [-f_x(t') (1 - f_{x'}(t')) (1 + N) + (1 - f_x(t')) f_{x'}(t') N] e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{x'} - \epsilon_x + \hbar\omega_{LO} + i\Gamma)(t-t')} \right. \\ & \left. + [-f_x(t') (1 - f_{x'}(t')) N + (1 - f_x(t')) f_{x'}(t') (1 + N)] e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{x'} - \epsilon_x - \hbar\omega_{LO} + i\Gamma)(t-t')} \right\}. \end{aligned} \quad (53)$$

Anders als bei der Rechnung mit Markov-Näherung kann das Zeitintegral nicht direkt analytisch ausgewertet werden, weil die Besetzungen hier Funktionen der Integrationsvariablen sind. Numerisch stellt diese Integration allerdings prinzipiell kein Problem dar, da lediglich alle Besetzungen zu allen Zeiten gespeichert werden müssen, um dieses Integral bestimmen zu können. Allerdings stellt dies einen erheblichen numerischen Mehraufwand dar und es muss für Zeiten vor dem Simulationsbeginn eine Besetzung vorgegeben werden.

2.7 Berücksichtigung von renormierten Energien

Um zunächst die aufgrund der Elektron-Phonon-Wechselwirkung renormierten Energien der Elektronen zu berechnen, bieten sich die retardierte Green-Funktion an. Diese ermöglicht es außerdem, die Besetzungskinetik mit den renormierten Polaronenenergien zu berechnen.

Die retardierte Green-Funktion ist für Elektronen definiert als

$$G_k^r(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \left\langle \left[a_k(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle. \quad (54)$$

Diese ist im Wesentlichen der Antikommutator des Erzeugungs- und Vernichtungsoperators zu unterschiedlichen Zeiten $t' < t$.

2.7.1 Bewegungsgleichung für retardierte Green-Funktionen

Für $t = t'$ gilt die bekannte Vertauschungsrelation

$$\left\langle \left[a_k(t), a_k^\dagger(t) \right]_+ \right\rangle = 1. \quad (55)$$

Zusammen mit der Heisenberg-Bewegungsgleichung (16) ergibt sich

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_k^r(t, t') &= \frac{\partial \Theta(t - t')}{\partial t} \left\langle \left[a_k(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle + \Theta(t - t') \left\langle \left[\frac{\partial a_k(t)}{\partial t}, a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \\ &= \delta(t - t') - \frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \left\langle \left[[a_k(t), H], a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle. \end{aligned} \quad (56)$$

Für freie Elektronen ohne Elektron-Phonon-Wechselwirkung gilt mit $H_e = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k$ und damit $[a_k, H_e] = \epsilon_k a_k$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k \right) G_k^r(t, t') = \delta(t - t') \quad (57)$$

und es ergibt sich für die freie retardierte Green-Funktion

$$G_k^r(t, t') = G_k^r(t - t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k (t - t')} . \quad (58)$$

Für das volle Problem mit Elektron-Phonon-Wechselwirkung gilt

$$[a_k, H] = \epsilon_k a_k + \sum_q M_q (b_q + b_{-q}^+) a_{k-q} ,$$

so dass

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k \right) G_k^r(t, t') = \delta(t - t') - \frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \sum_q M_q \left\langle \left(b_q(t) + b_{-q}^\dagger(t) \right) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \quad (59)$$

folgt. Der zusätzliche Term wird durch den Wechselwirkungs-Hamilton-Operator H_{e-pn} hervorgerufen; der Hamilton-Operator der Phononen trägt nicht bei, da $[a_k, H_{pn}] = 0$.

Wie in Kap. 2.2 treten wiederum Korrelationsfunktionen auf, deren Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\langle b_q(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle &= (\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k-q}) \left\langle b_q(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \\ &+ M_{-q} \sum_{k'} \left\langle a_{k'-q}^\dagger(t) a_{k'}(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \\ &+ \sum_{q'} M_{q'} \left\langle b_q(t) \left(b_{q'}(t) + b_{-q'}^\dagger(t) \right) \left[a_{k-q-q'}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle , \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\langle b_{-q}^\dagger(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle &= (-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k-q}) \left\langle b_{-q}^\dagger(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \\ &- M_{-q} \sum_{k'} \left\langle a_{k'-q}^\dagger(t) a_{k'}(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \\ &+ \sum_{q'} M_{q'} \left\langle b_{-q}^\dagger(t) \left(b_{q'}(t) + b_{-q'}^\dagger(t) \right) \left[a_{k-q-q'}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \end{aligned} \quad (61)$$

ebenfalls von Erwartungswerten von jeweils vier Operatoren abhängt.

Dieses Hierarchieproblem kann durch eine Faktorisierungs-Näherung vereinfacht werden, bei der so faktorisiert wird, dass nur Besetzungen und Green-Funktionen als Erwartungswerte entstehen. Dies erfolgt analog zu Kap. 2.3, wobei aufgrund der verschiedenen Zeitargumente hier auch Green-Funktionen auftreten.

Polaron-Näherung

Geht man davon aus, dass unabhängig von der Anwesenheit der übrigen Elektronen nur einzelne Elektronen mit den Phononen wechselwirken, was dem üblichen Polaronen-Bild

entspricht [1], kann man dies beschreiben, indem man die Elektronenbesetzung auf der rechten Seite von Gl. (60) und (61) auf Null setzt, $f_k = 0$, so dass in diesen Gleichungen jeweils der zweite Term verschwindet. Damit vereinfachen sich die Zeitentwicklungen der Korrelationsfunktionen nach Faktorisierung zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\langle b_q(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle = (\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k-q}) \left\langle b_q(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle + M_{-q}(1+N) \left\langle \left[a_k(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle, \quad (62)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\langle b_{-q}^\dagger(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle = (-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k-q}) \left\langle b_{-q}^\dagger(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle + M_{-q}N \left\langle \left[a_k(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \quad (63)$$

mit den formalen Lösungen

$$\left\langle b_q(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} M_{-q} \int_{t'}^t dt'' e^{-\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k-q})(t-t'')} (1+N) \left\langle \left[a_k(t''), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle, \quad (64)$$

$$\left\langle b_{-q}^\dagger(t) \left[a_{k-q}(t), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} M_{-q} \int_{t'}^t dt'' e^{-\frac{i}{\hbar}(-\hbar\omega_{LO} + \epsilon_{k-q})(t-t'')} N \left\langle \left[a_k(t''), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle, \quad (65)$$

so dass sich

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k \right) G_k^r(t, t') &= \delta(t - t') + \Theta(t - t') \int_{t'}^t dt'' \sum_q |M_q|^2 \\ &\quad * \left[(1+N)e^{-i\omega_{LO}(t-t'')} + Ne^{i\omega_{LO}(t-t'')} \right] \\ &\quad * \left(-\frac{i}{\hbar} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_{k-q}(t-t'')} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left\langle \left[a_k(t''), a_k^\dagger(t') \right]_+ \right\rangle \end{aligned} \quad (66)$$

ergibt.

Dyson-Gleichung

Das erhaltene Ergebnis, Gl. (66), kann etwas formaler als Dyson-Gleichung für G_k^r

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k \right) G_k^r(t, t') = \delta(t - t') + \int dt'' \Sigma_k^r(t, t'') G_k^r(t'', t') \quad (67)$$

formuliert werden, wobei

$$\Sigma_k^r(t, t'') = \Theta(t - t'') \sum_q |M_q|^2 \left[(1+N)e^{-i\omega_{LO}(t-t'')} + Ne^{i\omega_{LO}(t-t'')} \right] \left(-\frac{i}{\hbar} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_{k-q}(t-t'')} \quad (68)$$

Selbstenergie genannt wird.

Die Selbstenergie beinhaltet in der Faktorisierungsnäherung die freie retardierte Green-Funktion. Wenn man statt der Faktorisierungsnäherung z.B. eine diagrammatische Entwicklung [9] verwendet, enthält die Selbstenergie statt dessen die volle retardierte Green-Funktion,

$$\Sigma_k^r(t, t'') = \Theta(t - t'') \sum_q |M_q|^2 \left[(1 + N) e^{-i\omega_{LO}(t-t'')} + N e^{i\omega_{LO}(t-t'')} \right] G_{k-q}^r(t, t''). \quad (69)$$

Im Folgenden soll eine selbstkonsistente Lösung mit Hilfe von Gl. (69) betrachtet werden.

Auswertung

Da in der Dyson-Gleichung und Selbstenergie nur Zeitdifferenzen $\tau = t - t'$ vorkommen und nach Gl. (55) $G_k^r(t, t)$ unabhängig von t ist, gilt

$$G_k^r(t, t') = G_k^r(\tau). \quad (70)$$

Zur Vereinfachung der Rechnung und weil die Dyson-Gleichung (67) aufgrund der δ -Funktion zur numerischen Auswertung ungeeignet ist, wird nicht G_k^r , sondern die Renormierung der freien retardierten Greensfunktion \tilde{G}_k^r mit

$$G_k^r(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k \tau} \tilde{G}_k^r(\tau) \quad (71)$$

berechnet, wobei $-\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k \tau}$ die freie retardierte Green-Funktion ist. Dabei gilt

$$\tilde{G}_k^r(0) = 1 \quad (72)$$

und die Dyson-Gleichung für \tilde{G}_k^r ist

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{G}_k^r(\tau) = \int_0^\tau d\tau' \Sigma_k^r(\tau - \tau') \tilde{G}_k^r(\tau') e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_k (\tau - \tau')} \quad (73)$$

mit

$$\Sigma_k^r(\tau - \tau') = -\frac{i}{\hbar} \sum_q |M_q|^2 \left[(1 + N) e^{-i\omega_{LO}(\tau - \tau')} + N e^{i\omega_{LO}(\tau - \tau')} \right] \tilde{G}_{k-q}^r(\tau - \tau') e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k (\tau - \tau')}. \quad (74)$$

Die Lebensdauer der elektronischen Zustände als Folge der Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird hier automatisch berücksichtigt, nicht jedoch die der Phononen, welche durch anharmonische Beiträge zu den Gitterschwingungen entsteht. Letztere kann analog zur Lorentzverbreiterung (s. Kap. 2.5) durch eine zusätzliche Dämpfung Γ_{LO} hinzugefügt werden kann,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{G}_k^r(\tau) = \int_0^\tau d\tau' \Sigma_k^r(\tau - \tau') \tilde{G}_k^r(\tau') e^{\frac{i}{\hbar} (\epsilon_k + i\Gamma_{LO})(\tau - \tau')}. \quad (75)$$

Zur numerischen Auswertung wird Gl. (43) verwendet, so dass sich für die Dyson-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{G}_x^r(\tau) = \int_0^\tau d\tau' \Sigma_x^r(\tau - \tau') \tilde{G}_x^r(\tau') e^{\frac{i}{\hbar} (\epsilon_x + i\Gamma_{LO})(\tau - \tau')} \quad (76)$$

und für die Selbstenergie

$$\begin{aligned} \Sigma_x^r(\tau - \tau') = & -\frac{i}{\hbar} \frac{\alpha}{\pi} E_B^2 \left(\frac{\hbar \omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx' f_{x'} \frac{x'}{x} \ln \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right| \\ & * \left[(1+N) e^{-i\omega_{LO}(\tau-\tau')} + N e^{i\omega_{LO}(\tau-\tau')} \right] \tilde{G}_{x-x'}^r(\tau - \tau') e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_x(\tau-\tau')} \end{aligned} \quad (77)$$

ergibt.

2.7.2 Spektralfunktionen

Der Imaginärteil der Fouriertransformation der retardierten Green-Funktion liefert die sogenannte Spektralfunktion,

$$\hat{G}_k(\omega) = -2\Im FT(G_k^r(\tau)) . \quad (78)$$

Peaks dieser Spektralfunktion entsprechen Quasiteilchen des betrachteten Systems, wobei deren Position deren Energie ($\epsilon = \hbar\omega$) wiedergibt und die Breite als Energieunschärfe interpretiert werden kann, die umgekehrt proportional zur Lebensdauer dieses Zustands ist.

Für freie Elektronen folgt aus der freien retardierten Green-Funktion (58) mit der Dirac-Identität $\frac{1}{E+i\epsilon} = P\frac{1}{E} - i\pi\delta(E)$

$$\begin{aligned} \hat{G}_k(\omega) = & -2\Im \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_k + i\delta} \quad \delta \rightarrow 0, \delta > 0 \\ = & 2\pi\delta(\hbar\omega - \epsilon_k) . \end{aligned} \quad (79)$$

Die Spektralfunktion für freie Elektronen hat δ -Peaks an den freien Energien ϵ_k . Diese scharfe Energie entspricht der unendlichen Lebensdauer der freien elektronischen Zustände.

2.7.3 Besetzungskinetik

Um eine Bewegungsgleichung mit den Green-Funktionen für die Besetzungskinetik zu erhalten, kann die freie Green-Funktion (58) in die Bewegungsgleichung (52) eingesetzt werden. Man erhält

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k(t) = & 2 \sum_q |M_q|^2 \Re \int_{-\infty}^t dt' G_k^r(t-t') [G_{k+q}^r(t-t')]^* \\ & * \left\{ -f_k(t') [1 - f_{k+q}(t')] \left[N e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + (1+N) e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right] \right. \\ & \left. + [1 - f_k(t')] f_{k+q}(t') \left[(1+N) e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + N e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right] \right\} . \end{aligned} \quad (80)$$

Um die Polaroneneigenschaften mit zu berücksichtigen, muss jetzt lediglich die volle Green-Funktion statt der freien Green-Funktion verwendet werden. Dabei lässt sich G_k^r mit Gl. (71), (74) und (75) bestimmen.

Mit Gl. (43) folgt für die numerische Auswertung

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}f_x(t) = & \frac{2\alpha}{\pi} \frac{E_B^2}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{E_B} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx' f_{x'} \frac{x'}{x} \ln \left| \frac{x+x'}{x-x'} \right| \Re \int_{-\infty}^t dt' G_x^r(t-t') [G_{x'}^r(t-t')]^* \\
& * \left\{ -f_x(t') [1 - f_{x'}(t')] \left[N e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + (1+N) e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right] \right. \\
& \quad \left. + [1 - f_x(t')] f_{x'}(t') \left[(1+N) e^{-i\omega_{LO}(t-t')} + N e^{i\omega_{LO}(t-t')} \right] \right\} .
\end{aligned} \tag{81}$$

3 Relaxationsdynamik angeregter Ladungsträger

Es wird nun für die verschiedenen Modelle die zeitliche Entwicklung der elektronischen Besetzungen $f_k(t)$ numerisch bestimmt. Dabei wird dem System zur Anfangszeit $t = 0$ eine gaußförmige Besetzungsfunktion mit einer Teilchendichte von $n = 10^{17}/\text{cm}^3$ und einer Halbwertsbreite von $0,2/a_0$ vorgegeben. Für frühere Zeiten sei keine Besetzung vorhanden, das heißt die Besetzung wird sehr schnell eingeschaltet. Dies soll eine durch optische Anregung erzeugte Besetzung simulieren.

Angefangen wird mit der Markov-Näherung, die danach durch eine Lorenzverbreiterung ergänzt wird. In einem weiteren Schritt wird mit Memory-Effekt gerechnet. Zuletzt werden mittels Green-Funktionen die Polaroneigenschaften mit berücksichtigt.

Die verwendeten numerischen Methoden und die verwendeten Parameter sind in den Anhängen A.3 und A.4 angegeben.

3.1 Markov-Näherung

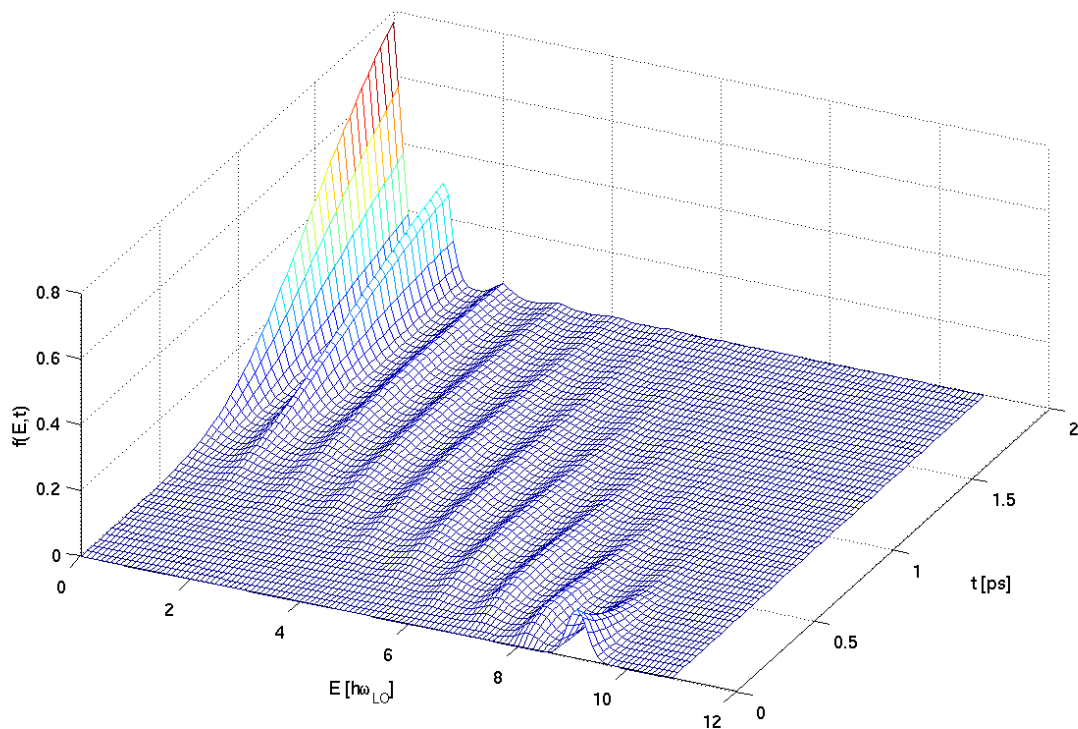


Abbildung 1: Zeitentwicklung der Besetzung in Markov-Näherung

Abb. (1) zeigt die zeitliche Entwicklung der Besetzung in einem GaAs Volumenmaterial in Markov-Näherung für eine gaußförmige Anfangsverteilung um $k \cdot a_0 = 10$; dazu wurde auf die Bewegungsgleichung in Markov-Näherung (41) das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung mit einer Schrittweite von 10fs und 1201 bezüglich der Energie äquidistanten k -Punkten angewendet. Die Temperatur der Phononen wurde auf 77K (Siede-

punkt von Stickstoff) eingestellt, was nach Bose-Einstein-Statistik (10) eine Besetzung der Phononenmoden von $4,4 \cdot 10^{-3}$ bedeutet.

Kaskaden

Bei der Streuung verlieren bzw. gewinnen die Elektronen jeweils eine Phononenenergie; sie werden also die Energie betreffend äquidistant gestreut. Da hier andere Streuungen nicht möglich sind, bildet sich eine um eine Phononenenergie verschobene Verteilung mit der Form der Anfangsverteilung. Während die Ausgangsverteilung abnimmt, nimmt die Neue in gleichem Maße zu (unter Berücksichtigung der wurzelförmigen Zustandsdichte). Von der neuen Verteilung werden wiederum Elektronen in eine um eine Phononenenergie niedrigere Verteilung gestreut und so weiter, so dass sich zu kleinen Energien hin verzögert zur Anfangsverteilung gleich geformte und um ein ganzzahliges Vielfaches der Phononenenergie verschobene Verteilungen bilden. Diese werden als Kaskaden bezeichnet, weil die Elektronen über mehrere Zwischenstufen in den Grundzustand relaxieren. Da die Ausgangsverteilung schmaler als eine Phononenenergie ist, sind die einzelnen Kaskaden deutlich voneinander getrennt.

Dabei werden die Elektronen bevorzugt zu niedrigeren Energien gestreut, was die Emission eines Phonons erfordert, als zu höheren Energien, was die Absorption eines Phonons erfordert. Dies entspricht Gl. (39), nach der die Absorption eines Phonons proportional zu N ist, wohingegen die Emission proportional zu $1 + N$ ist, weil Phononen auch spontan emittiert werden können. Da die Besetzung N der Phononenmoden hier bei $4,4 \cdot 10^{-3}$ liegt, ist die Emission um ein Vielfaches wahrscheinlicher als Absorption, so dass die Elektronen bevorzugt zu niedrigeren Energien gestreut werden. Eben dies bewirkt ja auch, dass im Gleichgewicht ein energetisch höherer Zustand immer eine geringere Besetzung aufweist. Dementsprechend wird nur sehr wenig in Zustände, die eine höhere Energie als die Anfangsverteilung aufweisen, gestreut, weshalb diese auch in den Abbildungen nicht dargestellt werden.

Endzustand

Dass Elektronen nur ein ganzzahliges Vielfaches der Phononenenergie abgeben können, bedeutet, dass entsprechend der δ -Funktionen in Gl. (39) nur elektronische Zustände, deren Energie sich um ein ganzzahliges Vielfaches der Phononenenergie unterscheidet, miteinander interagieren. Daher kann sich hier nur eine Fermiverteilung zwischen jeweils um ein ganzzahliges Vielfaches der Phononenenergie verschobene Zustände einstellen und keine Fermiverteilung über alle elektronischen Zustände.

Abb. (2) zeigt die aus der oben beschriebenen Verteilung resultierende Endverteilung. Bei einer Phononenenergie bildet sich eine Kante, da für alle höheren Energien noch Streuung in niederenergetische Zustände möglich ist, weshalb diese nur geringe Besetzungen aufweisen. Für alle niedrigeren Energien ist in diesem Modell - auch über Zwischenstationen - nur Streuung in höherenergetische Zustände möglich, weshalb diese Zustände eine von der Anfangsverteilung der um ein Vielfaches der Phononenenergie höherenergetischen Zustände abhängige Besetzung anstelle einer Fermiverteilung aufweisen. Wird eine energetisch schmalere Anfangsverteilung angesetzt, kann es dazu kommen, dass ei-

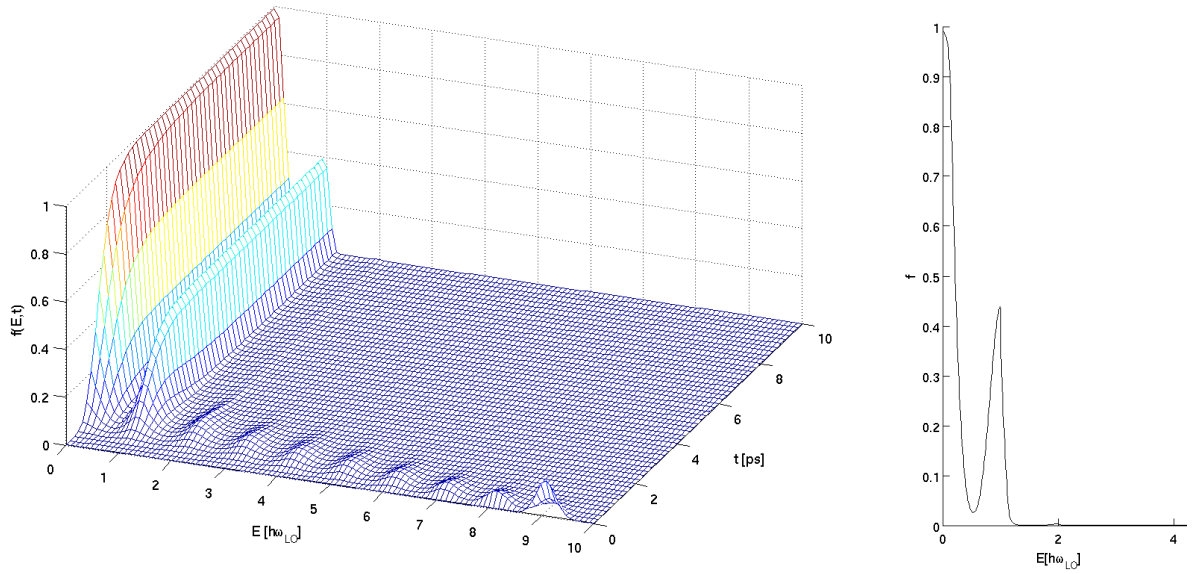


Abbildung 2: links: Zeitentwicklung der Besetzung in Markov-Näherung bis $10ps$, rechts: Besetzung zur Zeit $t = 10ps$

nige Energien keine deutlich von Null verschiedene Besetzung aufweisen.

Für dieses Modell wurde eine von den anderen Modellen abweichende Position der Anfangsbesetzung verwendet, weil mit dieser sowohl die Kaskaden, als auch das Verhalten für lange Zeiten deutlicher zu sehen ist.

3.2 Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung

Bis jetzt wurde nicht die begrenzte Lebensdauer der Zustände berücksichtigt, was entsprechend Gl. (49) zu einer Aufweitung der δ -Funktionen führt.

Abb. (3) zeigt die zeitliche Entwicklung von diesem System in Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung für eine gaußförmige Anfangsverteilung bei $k \cdot a_0 = 7$; dazu wurde auf die Bewegungsgleichung (49) das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung mit einer Schrittweite von $1fs$ und 171 bezüglich des Impulses äquidistanten k -Punkten angewendet. Auch wurde die Temperatur der Phononen auf $77K$ gewählt. Die begrenzte Lebensdauer wird mit $\Gamma/\hbar = 2/ps$ berücksichtigt, was grob den Ergebnissen aus der Rechnung mit Green-Funktionen für Energien oberhalb einer Phononenenergie entspricht (s. Kap. 3.4.1, sowie Abb. (6)). Für Abb. (4) gilt selbiges.

Auch in diesem Modell bilden sich wieder auf gleiche Art wie ohne Lorentzverbreiterung Kaskaden aus. In den ersten $2ps$ sind diese klar zu erkennen, wobei diese allerdings zunehmend zerlaufen, da die Elektronen jetzt auch um eine Energie, die nicht genau eine Phononenenergie ist, gestreut werden können. Dies ist schon an der Bewegungsgleichung (49) zu erkennen, die anders als ohne Lorentzverbreiterung keine δ -förmige, sondern eine lorentzförmige Wechselwirkung zwischen den einzelnen Zuständen aufweist. So werden auch Zustände, die nach exakter Energieerhaltung nicht besetzt würden, zunehmend besetzt. Dies wird insbesondere an der Besetzung für $k = 0$ deutlich, die stark zunimmt,

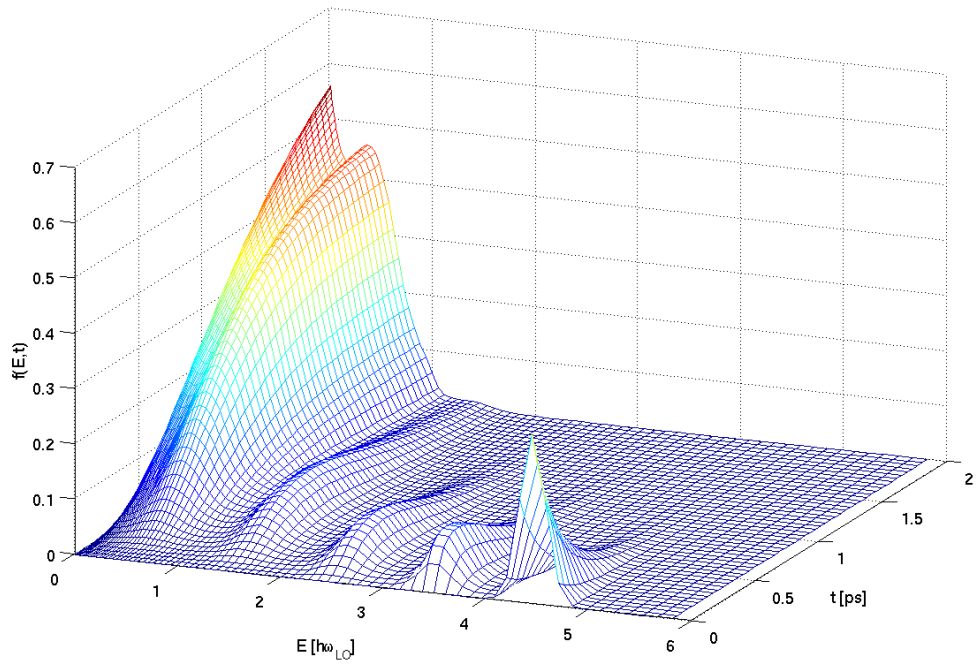


Abbildung 3: Zeitentwicklung der Besetzung in Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung

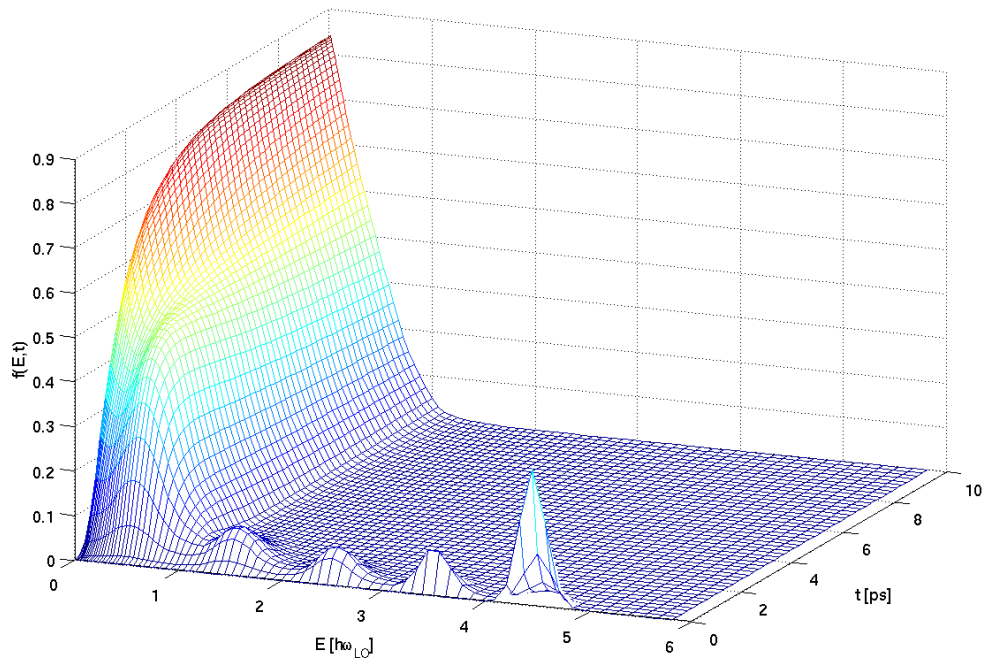


Abbildung 4: Zeitentwicklung der Besetzung in Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung bis 10ps

obwohl die Zustände mit genau einem Vielfachen der Phononenenergie in der Anfangsverteilung kaum besetzt sind.

So unterscheidet sich dieses Modell für längere Zeiten (ps) deutlich von dem ohne Lorentzverbreiterung; da hier die Besetzungen aller Zustände über Zwischenstufen aufgrund der nicht exakten Energieerhaltung miteinander interagieren, stellt sich anders als im Modell ohne Lorentzverbreiterung eine Fermi-artige Verteilung ein (s. Abb. (4)).

3.3 Berücksichtigung von Memory-Effekten

Zunächst sollen Gedächtniseffekte unter Berücksichtigung von Streuintegralen mit freien Energien einbezogen werden. Abb. (5) zeigt die entsprechende zeitliche Entwicklung ohne Markov-Näherung für eine gaußförmige Anfangsverteilung bei $k \cdot a_0 = 7$. Diese wurde numerisch berechnet; dazu wurde auf die Bewegungsgleichung (52) das Prädiktor-Korrektor-Verfahren dritter Ordnung mit einer Schrittweite von $1fs$ und 126 äquidistanten k -Punkten angewendet. Hier wurde die Temperatur der Phononen auf $77K$ eingestellt und die begrenzte Lebensdauer mit $\Gamma/\hbar = 2/ps$ berücksichtigt.

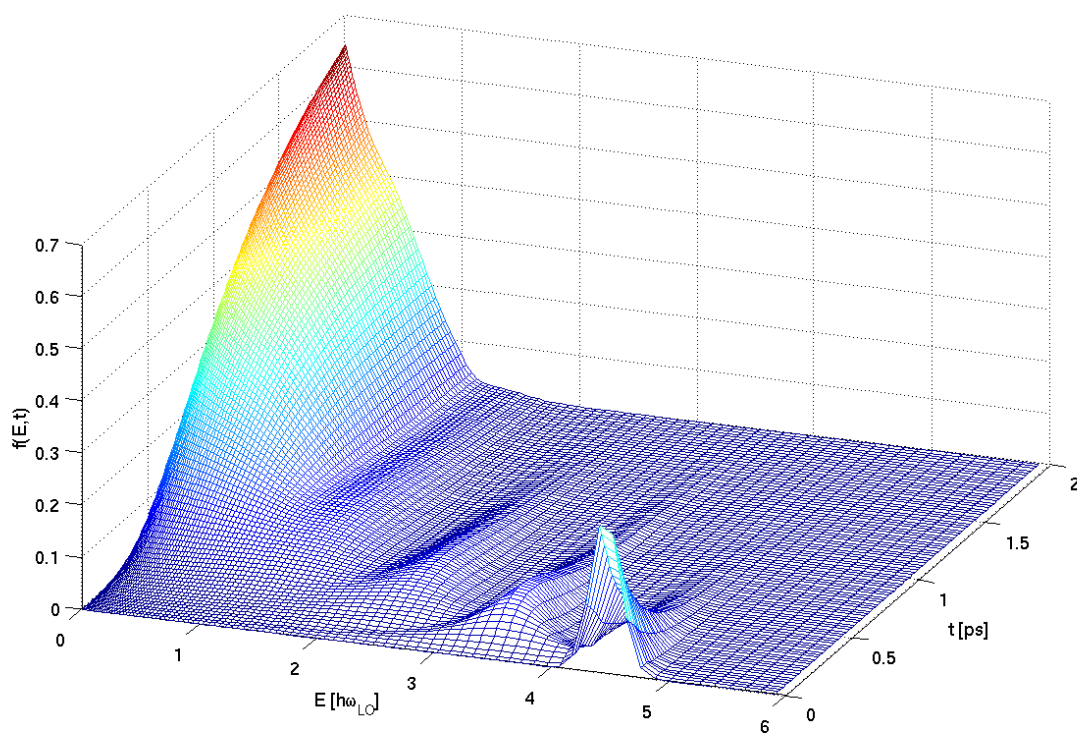


Abbildung 5: Zeitentwicklung der Besetzung mit Memory-Effekt

Auch hier bilden sich wieder deutlich Kaskaden heraus; allerdings sind diese am Anfang sehr breit, bevor sie schmäler werden; an der ersten Kaskade ist dies gut zu erkennen. Dies kann dadurch erklärt werden, dass die Stärke der Wechselwirkung in Gl. (52) über die oszillierende, gedämpfte e -Funktion bestimmt wird; wird über einen langen Zeitraum über diese bei sich wenig verändernder Besetzung integriert, bilden sich Peaks bei den

Zuständen, die eine Phononenenergie über bzw. unter dem betrachteten Zustand liegen; ändert sich allerdings die Besetzung, bildet sich dagegen eine breite Verteilung, so dass auch Streuung über einen größeren Bereich möglich ist. Dies gilt insbesondere für die Anfangsverteilung, da für $t < 0$ keine Besetzung angenommen wird und diese schnell abfällt, sich die Besetzung also schnell ändert.

Wie schon in Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung gezeigt, stellt sich auch hier ein Fermi-artiges Gleichgewicht ein. Während der Verlauf der Besetzung für lange Zeiten (mehrere ps) also weitgehend mit dem der Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung übereinstimmt, gibt es für kürzere Zeiten deutliche Unterschiede. So heben sich die Kaskaden hier deutlich schwächer voneinander ab als in Markov-Näherung, in der die Kaskaden über mehrere ps sichtbar sind, bevor sich eine Fermiverteilung einstellt (s. Abb. (4)). Dabei findet die Streuung in beiden Modellen bei einer ähnlichen Geschwindigkeit statt.

3.4 Berücksichtigung von Polaron-Effekten

3.4.1 Green-Funktionen

Zur Berechnung der retardierten Green-Funktionen wurde die Dyson-Gleichung (75) mit dem Prädiktor-Korrektor-Verfahren dritter Ordnung mit einer Schrittweite von $1fs$ und 126 äquidistanten k -Punkten numerisch gelöst. Die begrenzte Lebensdauer der Phononen wurde dabei mit $\Gamma/\hbar = 0, 2/ps$ berücksichtigt.

Abb. (6) zeigt die Renormierung der freien retardierten Green-Funktion $\tilde{G}_k^r(\tau)$ bei einer Temperatur von $77K$; aufgetragen ist der Betrag der komplexen Funktion. Es gilt $\tilde{G}_k^r(0) = 1$. Während die Green-Funktion für Energien oberhalb einer Phononenenergie schnell abfällt, bildet sich unterhalb einer Phononenenergie ein Plateau aus, das nur langsam abfällt.

Mit zunehmender Zeit fällt $|\tilde{G}_k^r(\tau)|$ entsprechend der möglichen Ausstreuung ab. Weil die Phononenbesetzung für höhere Temperaturen höher ist und somit auch die Streuung stärker ist, fallen die Green-Funktionen für hohe Temperaturen schneller ab als bei niedrigen Temperaturen (vgl. Abb. (7)). Dieser Abfall entspricht den zuvor phänomenologisch eingeführten Dämpfungen, um die begrenzte Lebensdauer der Zustände zu berücksichtigen.

Da unterhalb einer Phononenenergie nur Absorption, nicht jedoch Emission möglich ist, da es keine energetisch passenden Endzustände gibt, fallen die Green-Funktionen in diesem Bereich deutlich langsamer ab. Bei niedriger Temperatur bildet sich so ein Plateau, weil die zur Phononenbesetzung proportionale Absorption hier um ein Vielfaches schwächer ist als die Emission, die auch spontan stattfindet, allerdings für Energien unterhalb $\hbar\omega_{LO}$ nicht mehr möglich ist.

Abb. (7) zeigt $|\tilde{G}_k^r(\tau)|$ bei einer Temperatur von $300K$. Die Green-Funktion fällt bei $300K$ unterhalb einer Phononenenergie ebenfalls deutlich schwächer ab als oberhalb. Es bildet sich jedoch kein Plateau, da der Unterschied aufgrund der höheren Phononenbesetzung zwischen Absorption und Emission aufgrund der höheren Phononenbesetzung geringer

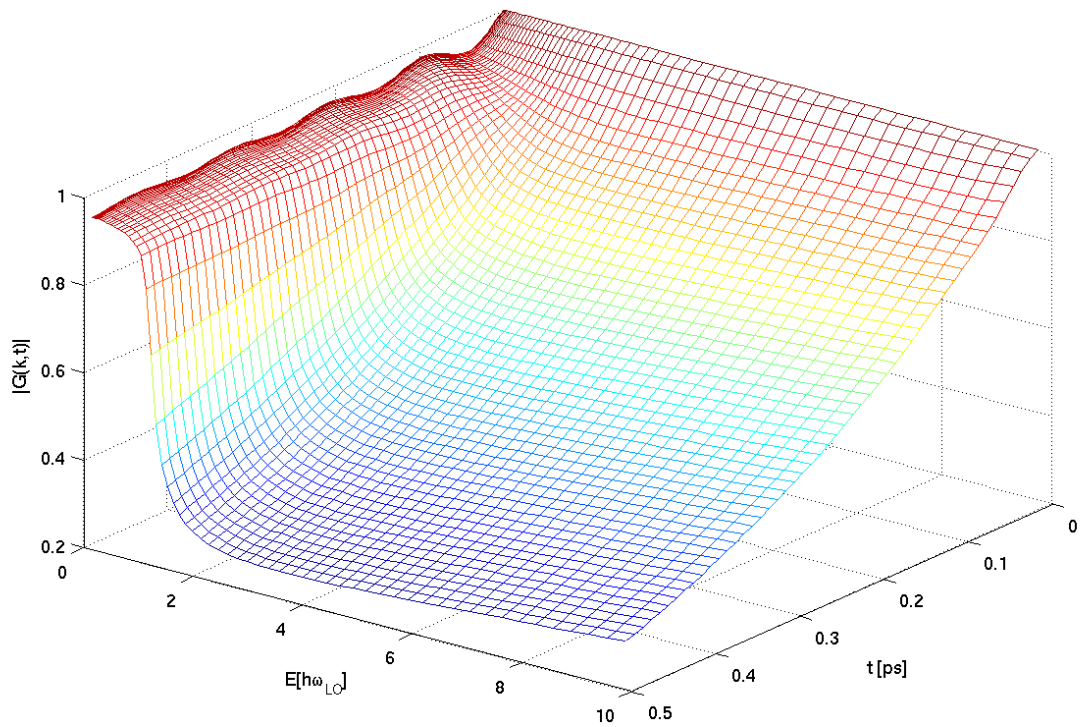


Abbildung 6: Betrag der Renormierung der freien retardierten Green-Funktion bei $77K$

ist.

Dem entsprechend verhalten sich auch die Green-Funktionen bei den anderen betrachteten Temperaturen; bei $10K$ (s. Abb. (8)) fällt die Green-Funktion noch etwas langsamer ab als bei $77K$ und es bildet sich ebenfalls ein Plateau, das entsprechend langsamer abfällt als bei $77K$. Bei $600K$ (s. Abb. (9)) fällt die Green-Funktion schneller ab als bei $300K$ und es bildet sich ebenfalls kein Plateau. Insbesondere auf den Plateaus sind Oszillationen mit einer Frequenz von ω_{LO} zu erkennen, die mit zunehmender Zeit immer schwächer werden.

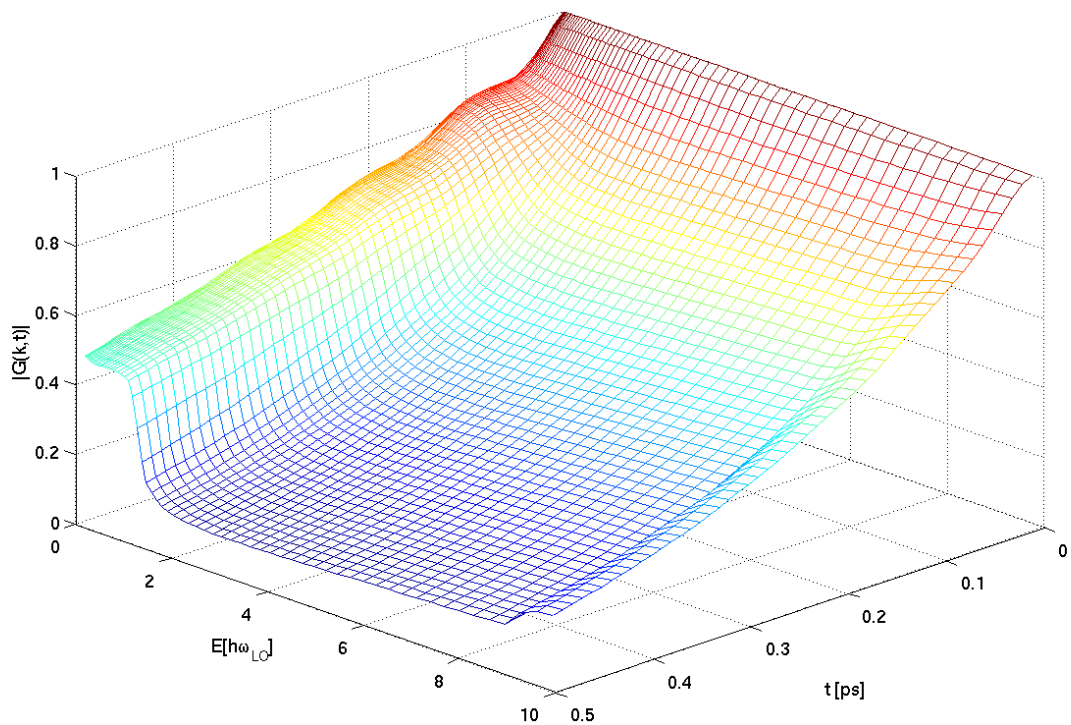


Abbildung 7: Betrag der Renormierung der freien retardierten Green-Funktion bei $300K$

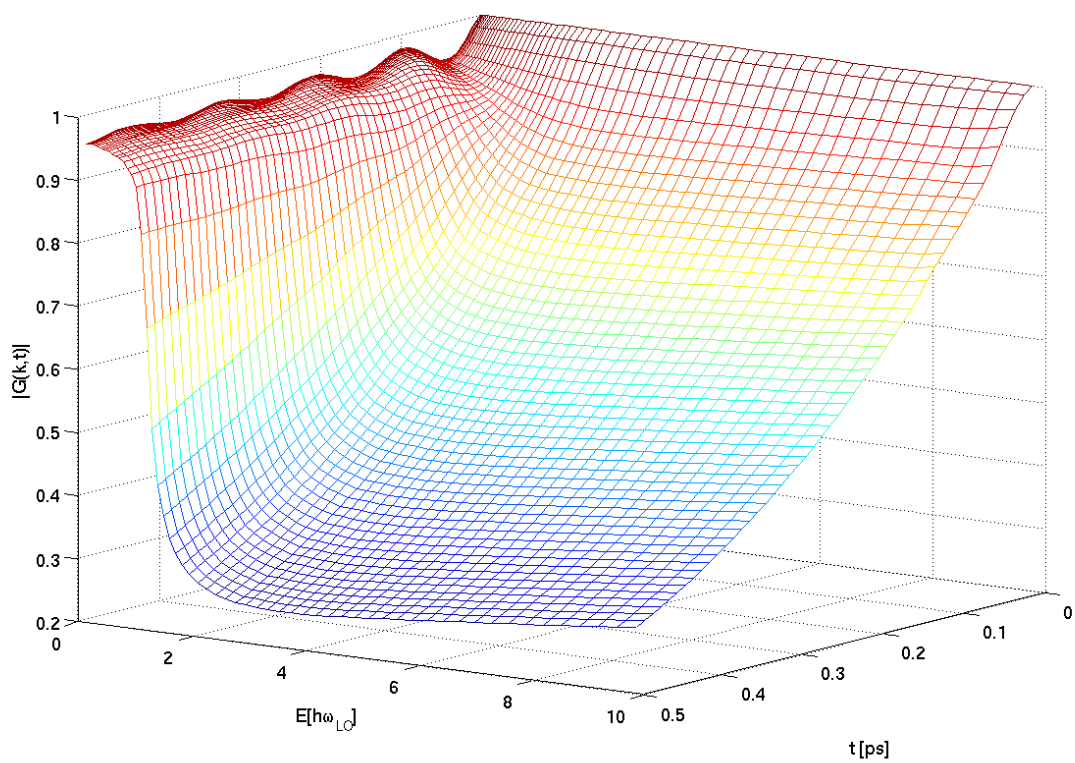


Abbildung 8: Betrag der Renormierung der freien retardierten Green-Funktion bei $10K$

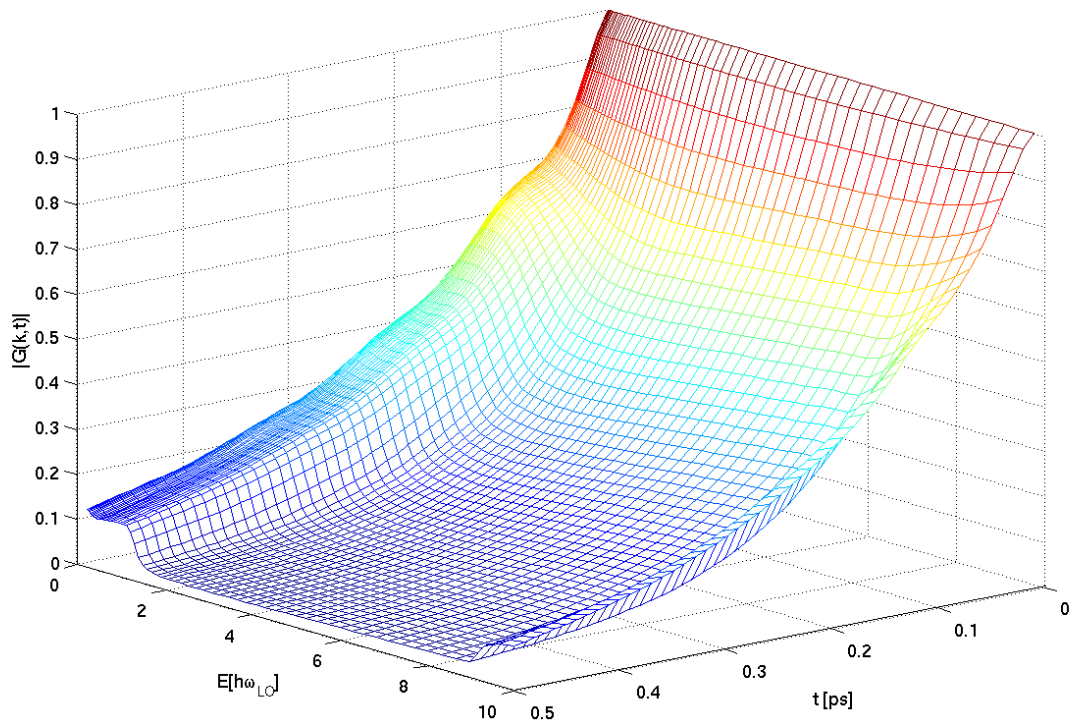


Abbildung 9: Betrag der Renormierung der freien retardierten Green-Funktion bei 600K

Nummerische Fehler

Für hohe Temperaturen ist bei den höchsten k -Werten ein deutlich verlangsamter Abfall zu erkennen (s. Abb. (7) und (9)). Dieser wird durch die Grenze der k -Werte verursacht: Weil Streuung in die höheren, nicht im numerischen Modell vorhandenen k -Zustände nicht möglich ist, können insbesondere aus den Zuständen knapp unterhalb der oberen k -Grenze Elektronen weniger gestreut werden als in einem nicht begrenzten System, so dass die Green-Funktionen für diese Zustände langsamer abfallen als sie sollten. Bei niedrigen Temperaturen spielt dies allerdings eine sehr geringe Rolle, da dies nur Streuung in energetisch höhere Zustände betrifft, so dass nur Absorption betroffen ist, die aufgrund der geringen Phononenanregung bei niedrigen Temperaturen sehr klein gegen die Emission ist, da diese auch spontan möglich ist.

Weitere Fehler treten bei niedrigen Temperaturen (10K, 77K) ab ca. 1ps bei großen Energien auf (s. Abb. (10)). Diese pflanzen sich über mehrere ps zu kleineren Energien fort. Darunter fallen auch die Oszillationen auf den Plateaus für späte Zeiten. Bei höheren Temperaturen tritt dies nicht auf, weil die Green-Funktion aufgrund einer höheren Phononendichte stärker gedämpft ist.

Um Auswirkungen dieser Fehler auf die Besetzungskinetik zu minimieren, werden für lange Zeiten ($> 2ps$) die höchsten k -Werte nicht genutzt und die Green-Funktionen oberhalb einer Phononenenergie auf Null gesetzt.

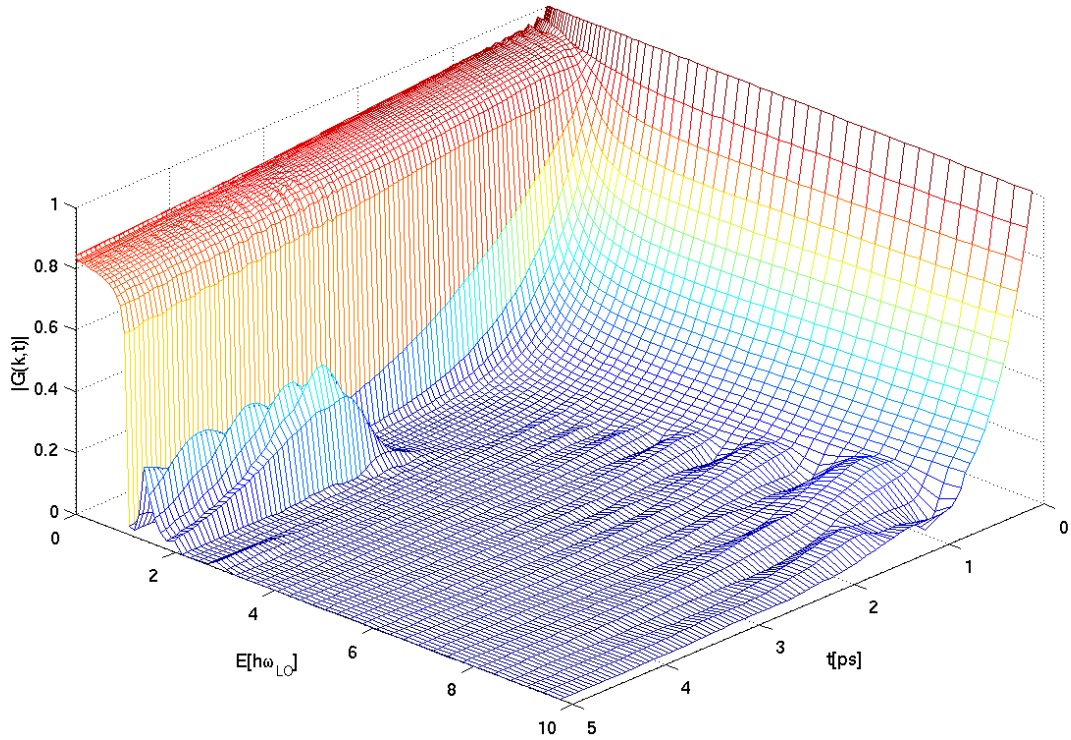


Abbildung 10: Betrag der Renormierung der freien retardierten Green-Funktion bei $77K$ bis $5ps$

3.4.2 Spektralfunktion

Die Spektralfunktionen werden durch Fouriertransformation nach Gl. (78) aus den retardierten Green-Funktionen gewonnen; da diese nicht für alle Zeiten berechnet werden können und für kleine Temperaturen unterhalb einer Phononenenergie nur sehr langsam abnehmen, ist es notwendig, die retardierten Green-Funktionen für niedrige Temperaturen ($0K$, $10K$, $77K$) für die Fouriertransformation zusätzlich zu dämpfen, um eine Glättung der Kurven zu erreichen. Allerdings führt dies auch zu einer Verbreiterung von Peaks.

Abb. (11) zeigt die Spektralfunktion für ein bezüglich der Phononen freies Elektron mit Dämpfung und $k = 0$ - alle Spektralfunktionen sind logarithmisch aufgetragen. Entsprechend der Dispersion freier Elektronen $\epsilon_k/E_B = m/\mu \cdot k^2$ hat die Spektralfunktion bei $\hbar\omega = 0$ einen ausgeprägten Peak, der eben für den elektronischen Zustand $k = 0$ mit $\epsilon_0 = 0$ steht. Aufgrund der Dämpfung kommt es hier nicht zu δ -Peaks (vgl. Gl. (79)), sondern zu einer breiteren Verteilung.

Polaronen

Die aus den Green-Funktionen mit Elektron-Phonon-Wechselwirkung bestimmten Spektralfunktionen weichen von dem Ergebnis für freie Teilchen ab; so weist die Spektral-

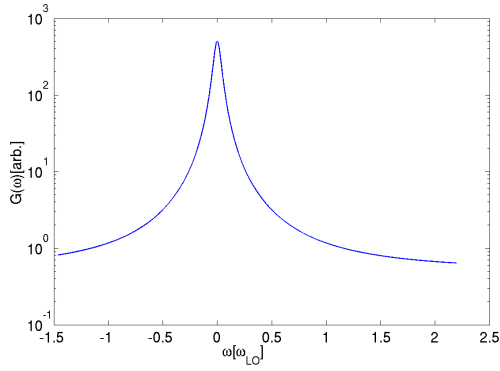


Abbildung 11: Spektralfunktion für freie Elektronen mit $k = 0$ und einer Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

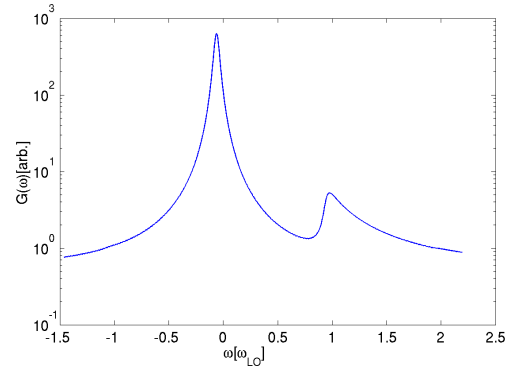


Abbildung 12: Spektralfunktion für Polaronen mit $k = 0$ bei $77K$ und einer künstlichen Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

funktion für $k = 0$ bei $77K$ (Abb. (12)) neben ihrem Hauptpeak bei $-0,062\hbar\omega_{LO}$ ($\hbar\omega_{LO} = 36meV$), der entsprechend zum freien Elektron als elektronischer Zustand interpretiert werden kann, einen weiteren deutlich kleineren Peak bei $0,97\hbar\omega_{LO}$ auf. Dieser Peak liegt etwas mehr als eine Phononenenergie oberhalb des elektronischen Zustandes und kann als Quasiteilchen aus einem Elektron plus einem Phonon interpretiert werden.

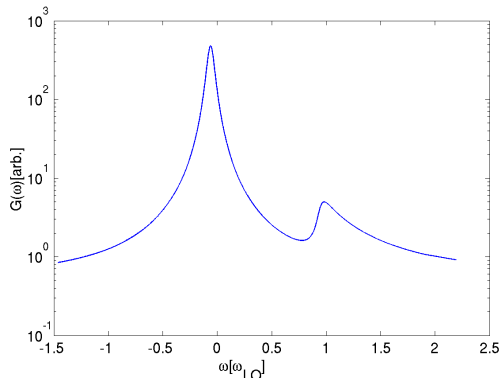


Abbildung 13: Spektralfunktion für Polaronen mit $k = 0$ bei $0K$ und einer künstlichen Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

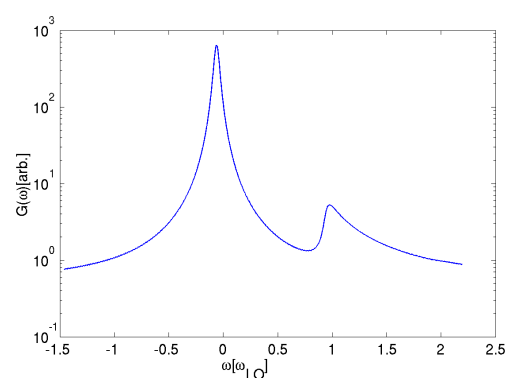


Abbildung 14: Spektralfunktion für Polaronen mit $k = 0$ bei $10K$ und einer künstlichen Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

Abb. (13) bis Abb. (16) zeigen weitere Spektralfunktionen für $k = 0$ bei verschiedenen Temperaturen. Bei hohen Temperaturen ($300K$, $600K$) gibt es nicht nur einen weiteren Peak oberhalb, sondern auch etwas weniger als eine Phononenenergie unterhalb der Elektronendispersion einen kleineren Peak. Dieser kann als ein Quasiteilchen aus einem Elektron minus einem Phonon interpretiert werden, also als ein Zustand, der gut ein Phonon absorbieren kann. Da die Absorption entgegen der Emission nicht spontan stattfindet, ist dieser Peak nur bei höheren Temperaturen und damit höherer Phononenbesetzung erkennbar.

Diese zusätzlichen Peaks ergeben sich dabei aus den Oszillationen der Green-Funktionen mit einer Frequenz von ω_{LO} .

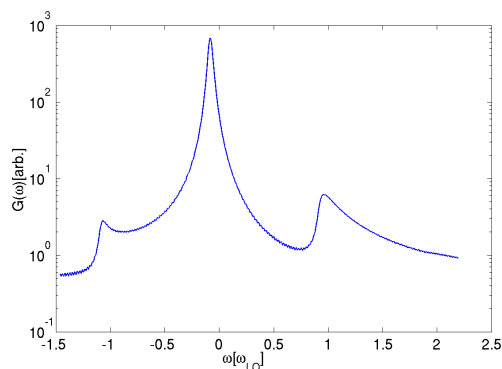


Abbildung 15: Spektralfunktion für Polaronen mit $k = 0$ bei $300K$

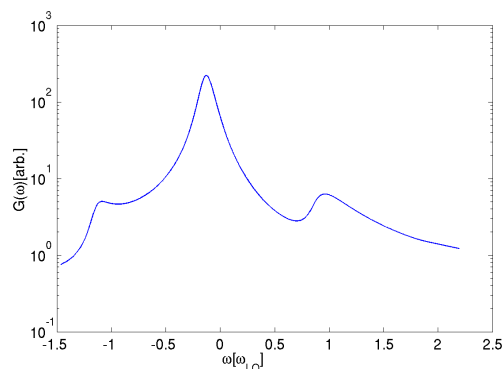


Abbildung 16: Spektralfunktion für Polaronen mit $k = 0$ bei $600K$

Polaronshift

Die Energieabsenkung der Elektronen gegenüber freien Elektronen - der Polaronshift - kommt durch die Wechselwirkung mit den Phononen als Gitterschwingungen zustande; dieser kann dadurch erklärt werden, dass ein Elektron in einem Ionengitter dieses durch seine Ladung polarisiert, wobei die Energie des Systems abgesenkt wird. Folgende Tabelle zeigt den Polaronshift für verschiedene Temperaturen.

T[K]	Polaronshift [$\hbar\omega_{LO}$]
0	-0,061
10	-0,061
77	-0,062
300	-0,082
600	-0,129

Für $T = 0$ ist der Polaronshift in Störungsrechnung $\alpha\hbar\omega_{LO} = 0,069\hbar\omega_{LO}$, was nur gering von dem hier bestimmten Wert abweicht, da hier ein kleines α vorliegt. Für höhere Temperaturen und damit größerer Phononenbesetzung nimmt der Polaronshift deutlich zu.

Betrachtet man die Spektralfunktionen bei $300K$ und $600K$, ergeben sich bei $600K$ deutlich breitere Peaks, was eine deutlich geringere Lebensdauer der Zustände bedeutet. (Für beide Spektralfunktionen wurden entgegen den anderen Spektralfunktionen die retardierten Green-Funktionen für die Fouriertransformation nicht zusätzlich gedämpft, weil diese ausreichend schnell abfallen.) Dies ergibt sich aus der höheren Phononenbesetzung und der damit stärkeren Streuung bei $600K$, was auch schon an den Green-Funktionen durch einen schnelleren Abfall sichtbar ist (s. Abb. (7) und (9)).

Dispersion und Effektive Masse

Abb. (17) zeigt die Spektralfunktion für freie Elektronen. Die Spektralfunktion ist für verschiedene k -Werte logarithmisch aufgetragen; der dabei entstehende Verlauf der Peaks

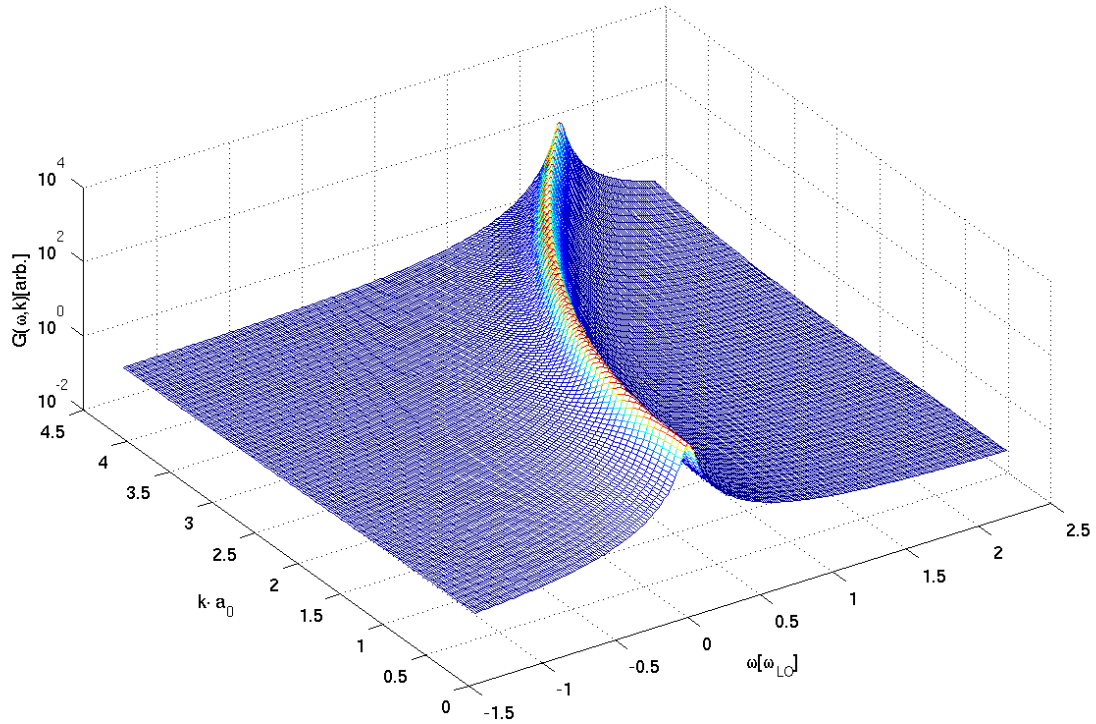


Abbildung 17: Spektralfunktion für freie Elektronen mit einer künstlichen Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

gibt die Dispersion der Elektronen an. Die Dispersion entspricht dabei der für freie Elektronen, $\epsilon_k/E_B = m/\mu \cdot k^2$.

Abb. (18) zeigt die aus der retardierten Green-Funktion bestimmte Spektralfunktion bei 77K. Der parabolische Verlauf der Dispersion - wie durch ϵ_k vorgegeben - bleibt erhalten; allerdings ergibt sich eine größere effektive Masse

$$\frac{\mu_p}{m} = 1,304$$

als für das Elektronenproblem ohne Elektron-Phonon-Wechselwirkung, bei dem eine Effektive Masse $\mu/m = 1,284$ vorgegeben wurde. Dies entspricht in etwa dem Ergebnis in Störungsrechnung, nach der die effektive Masse um $\alpha \cdot m/6$ zunimmt, was

$$\frac{\mu_{st}}{m} = 1,299$$

bedeutet.

Der in Abb. (12) zu sehende Peak einer Phononenenergie oberhalb der Elektronendispersion setzt sich hier über alle k -Werte fort, wobei der Abstand von etwa einer Phononenenergie zur Elektronendispersion bestehen bleibt und der Peak mit zunehmendem k breiter und somit flacher wird.

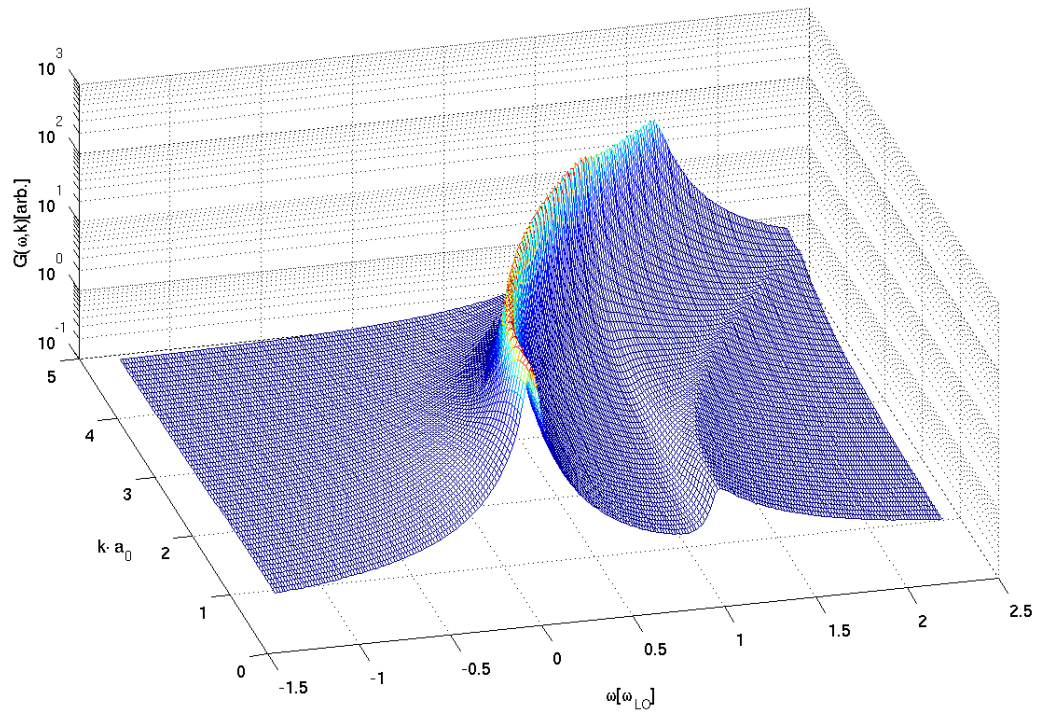


Abbildung 18: Spektralfunktion für Polaronen bei $77K$ mit einer künstlichen Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

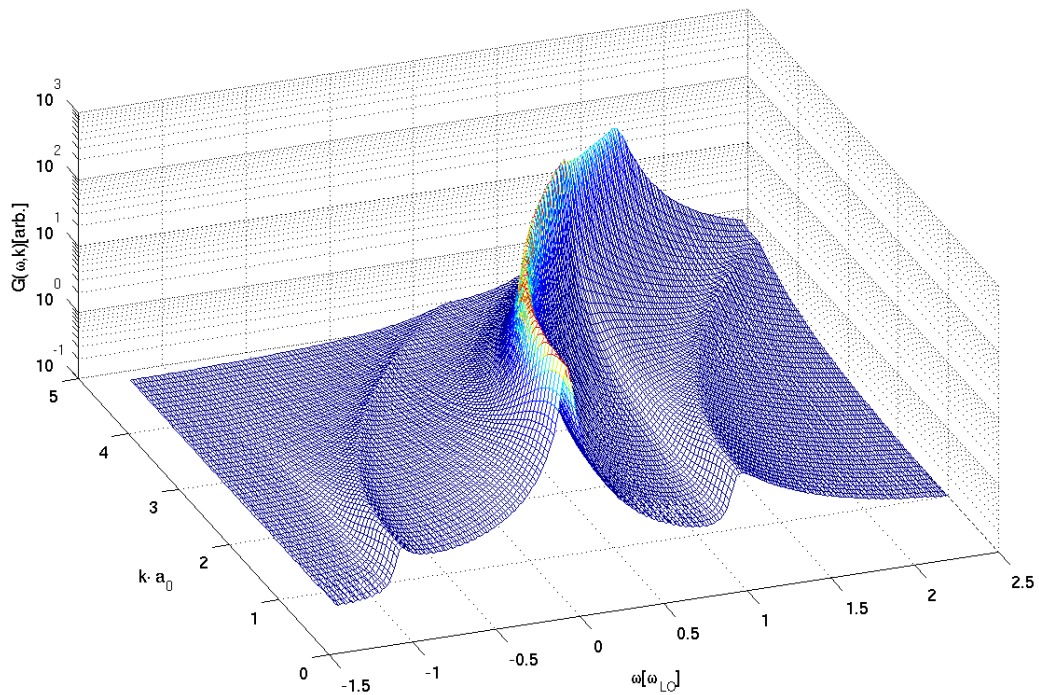


Abbildung 19: Spektralfunktion für Polaronen bei $300K$

Bei Energien oberhalb einer Phononenenergie ist der Hauptpeak verglichen mit niedrigeren Energien deutlich verbreitert, wobei der Übergang sprunghaft ist - aufgrund der logarithmischen Auftragung wirkt dies deutlich schwächer -, was eine kürzere Lebensdauer der Zustände bedeutet. Dies ergibt sich aus dem schnellen Abfallen der Green-Funktionen für Energien oberhalb der Phononenenergie, was aus der Möglichkeit Phononen zu emittieren folgt (s. Kap. 3.4.1).

Abb. (19) zeigt die Spektralfunktion bei $300K$. Anders als bei $77K$ gibt es, wie auch schon in Abb. (15) zu sehen, auch eine Phonon-Replik unterhalb der Elektronendispersion. Auch diese setzt sich über alle k -Werte fort, wobei der Abstand von etwa einer Phononenenergie bestehen bleibt und der Peak mit zunehmendem k aufgrund seiner Verbreiterung flacher wird.

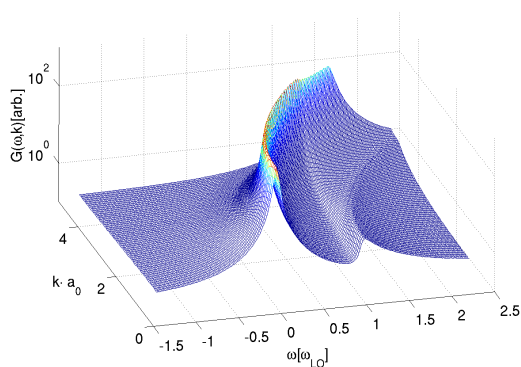


Abbildung 20: Spektralfunktion für Polaronen bei $10K$ mit einer künstlichen Dämpfung von $\Gamma/\hbar = 2/ps$

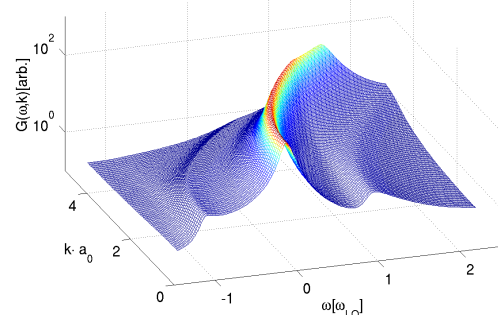


Abbildung 21: Spektralfunktion für Polaronen bei $600K$

Entsprechendes gilt für die Spektralfunktionen bei $10K$ und $600K$ (Abb. (20) und (21)).

3.4.3 Besetzungskinetik

Abb. (22) zeigt die Entwicklung der elektronischen Besetzung. Diese wurde wieder mit einer gaußförmigen Anfangsverteilung bei $k \cdot a_0 = 7$ mit der Bewegungsgleichung (81) unter Verwendung der zuvor bestimmten Green-Funktionen bestimmt, wobei notwendigerweise wie zur Berechnung der Green-Funktionen das Prädiktor-Korrektor-Verfahren dritter Ordnung mit gleicher Schrittweite und gleichem k -Raster angewendet wurde. In der Abbildung sind freie Energien angegeben.

Entsprechend den vorherigen Modellen bilden sich auch bei Berücksichtigung von Polaron-Effekten Kaskaden aus. Diese ähneln denen bei der Rechnung mit Memory-Effekten; allerdings sind diese aufgrund der Renormierung und der damit veränderten Energien der Zustände, entsprechend denen gestreut wird, minimal zu kleineren k -Werten verschoben. Ferner bildet sich ab etwa $1ps$ bei einer Phononenenergie eine Kante heraus. Diese entsteht dadurch, dass die Elektronen energetisch oberhalb dieser Kante in tiefere Zustände streuen können, nicht jedoch die unterhalb, was noch deutlicher anhand des Plateaus, das sich unterhalb einer Phononenenergie in der zugehörigen Green-Funktion (s. Abb. (6)) bildet, zu sehen ist. Dieses Verhalten ist zwar dem der Kante in

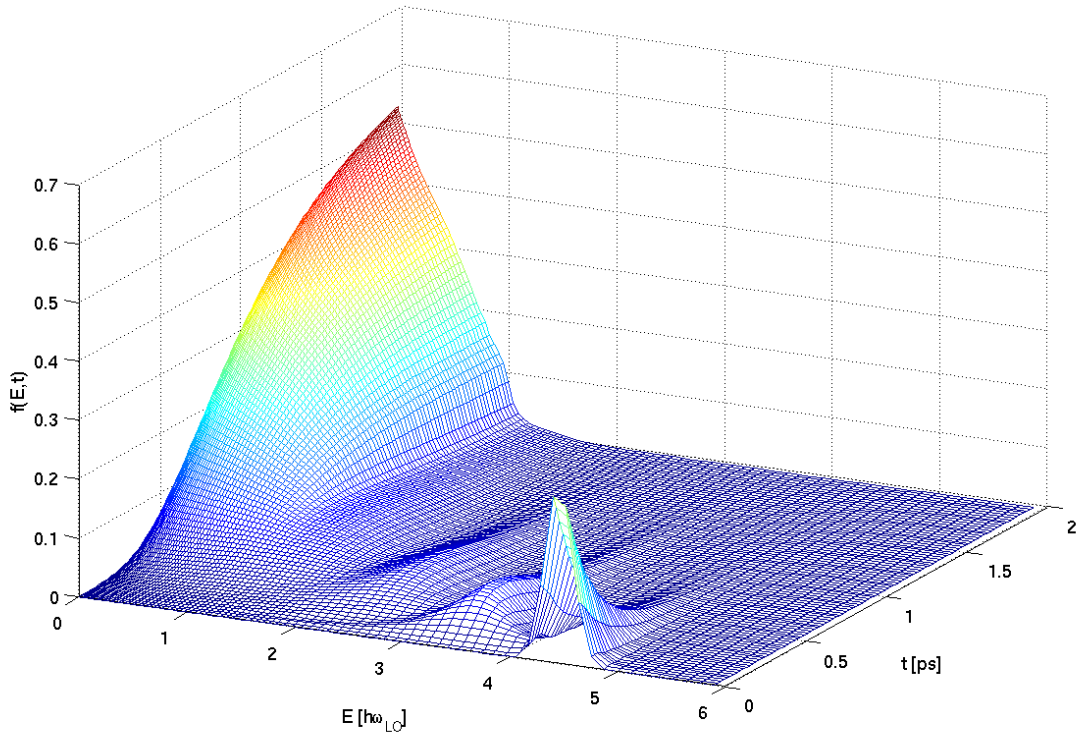


Abbildung 22: Besetzungskinetik mit Polaroneneigenschaften für 77K

Markov-Näherung ohne Lorentzverbreiterung ähnlich (s. Abb. (2)), doch können hier die Elektronen auch unterhalb der Kante indirekt in tiefere Zustände streuen. Dies ist allerdings aufgrund der notwendigen Absorption eines Phonons, um einen Zustand zu besetzen, aus dem in einen tieferen Zustand gestreut werden kann, gegenüber der einfachen Emission von Zuständen oberhalb der Kante deutlich verlangsamt ist. So ist diese Kante auch nur schwach ausgeprägt.

Auch stellt sich wieder eine Fermi-artige Verteilung mit der Gittertemperatur ein. Dabei gilt für das Gleichgewicht eines wechselwirkenden Systems die Kubo-Martin-Schwinger-Relation

$$f_k = i \int \frac{d\hbar\omega}{2\pi} F(\omega) \hat{G}_k(\omega), \quad (82)$$

wobei $F(\omega)$ Fouriertransformierte der Fermiverteilung ist [3]. Nach dieser ist die Gleichgewichtsbesetzung durch Fermiverteilung und Spektralfunktion bestimmt. Da die Spektralfunktionen im Wesentlichen aus einem Peak am Ort der renormierten Energie bestehen - die Phononrepliken sind 5 – 7 Größenordnungen kleiner -, stellt sich hier dennoch eine Fermi-artige Verteilung auf Grundlage der renormierten Energien ein.

Abb. (23) zeigt die Entwicklung für 300K mit ansonsten gleichen Parametern. Der Unterschied zu 77K besteht im Wesentlichen darin, dass die Verteilung deutlich stärker verschmiert; die Kaskaden sind dadurch deutlich flacher und breiter. Auch die bei 77K zu sehende Kante bei einer Phononenenergie ist deutlich schwächer, was der deutlich schwächeren Kante der Green-Funktion für 300K bei einer Phononenenergie entspricht.

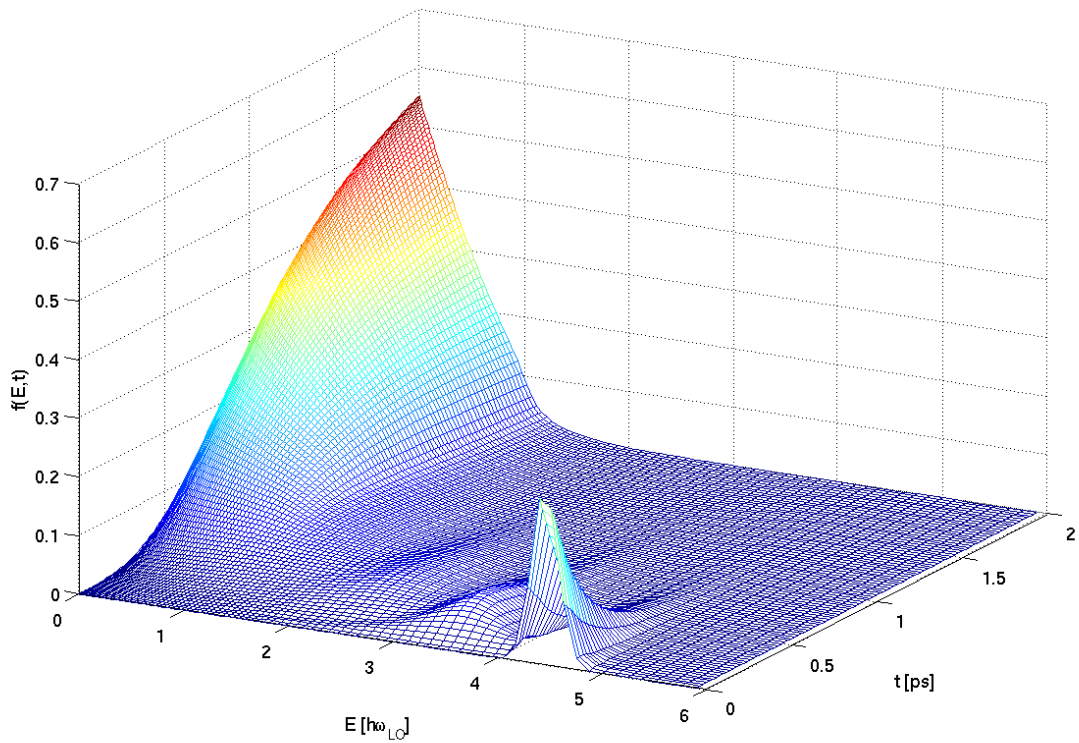


Abbildung 23: Besetzungskinetik mit Polaroneneigenschaften für $300K$

Die Geschwindigkeit der Relaxation wird dabei oberhalb einer Phononenenergie nur schwach von der Temperatur beeinflusst. Dies ist dadurch zu erklären, dass die Relaxation die Abgabe von Energie bedeutet, die hier nur über Emission von Phononen stattfindet, wobei der spontane Anteil der Emission temperaturunabhängig ist und der stimulierte Anteil zum Einen bei den betrachteten Temperaturen deutlich kleiner als der spontane ist und zum Anderen durch die Absorption, die in gleicher Weise von der Phononenanregung und damit Temperatur abhängt, kompensiert wird. Unterhalb einer Phononenenergie können die Elektronen allerdings nicht direkt in einen niederenergetischen Zustand streuen. Dies geschieht statt dessen über eine Zwischenzeitliche Anregung in einen höherenergetischen Zustand, aus dem das Elektron wieder in einen Niederenergetischen Zustand streut. Da dies die Absorption eines Phonons erfordert, nimmt die Geschwindigkeit dieses Prozesses mit zunehmender Temperatur stark zu.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Es wurde mit verschiedenen Modellen die Relaxation einer Ladungsträgerverteilung durch Elektron-Phonon-Streuung einer vorgegebenen Anregung im Leitungsband von Galliumarsenid untersucht.

Dabei wurden für die einzelnen Modelle verschiedene Näherungen gemacht, um das Problem zu vereinfachen. So wird für die Boltzmann-Streuung durch die Faktorisierungs-Näherung die Hierarchie der Bewegungsgleichungen abgebrochen und mit der Markov-Näherung der Memory-Effekt vermieden. Um dieses Modell zu verbessern, wird eine phänomenologische Dämpfung eingebaut, die die endliche Lebensdauer der Zustände beschreibt. Darüber hinaus erlaubt die Mitnahme des Memory-Effekts das Verhalten besonders für kurze Zeiten genauer zu beschreiben. Ferner ist bei der Rechnung mit Green-Funktionen eine phänomenologische Beschreibung der Dämpfung nicht mehr nötig und die Renormierungen aufgrund der Elektron-Phonon-Wechselwirkung werden konsistent berücksichtigt.

Allerdings bedeutet, diese Näherungen nicht zu machen, jeweils einen deutlich höheren numerischen Aufwand für die Berechnung. So führt der Memory-Effekt dazu, dass über die gesamte Vergangenheit integriert werden muss, wohingegen in Markov-Näherung lediglich die aktuelle Besetzung benötigt wird. Um die renormierten Polaroneneigenschaften zu erhalten, müssen, bevor die Besetzungskinetik bestimmt werden kann, Green-Funktionen berechnet werden, was zusätzlich mit einem ähnlichen Aufwand wie die Bestimmung der Besetzungskinetik verbunden ist. So benötigt die Berechnung der Besetzungskinetik für $5ps$ in Markov-Näherung mit einer Intel Pentium 4 CPU mit einer Taktung von $3,2GHz$ eine Rechenzeit von etwa einer Minute, wohingegen die Berechnung über eine Green-Funktion etwa zwei Tage in Anspruch nimmt, wobei der Aufwand in Markov-Näherung linear und ohne Markov-Näherung aufgrund der Zeitintegrationen quadratisch mit der Zeit wächst.

In allen betrachteten Modellen bilden sich mit Abstand einer Phononenenergie äquidistante Kaskaden. In Markov-Näherung ohne Lorentzverbreiterung bleibt aufgrund der exakten Energieerhaltung die Form der Kaskaden bestehen, so dass sich kein Fermi-artiges Gleichgewicht einstellt. Durch die Aufweitung der exakten Energierhaltung zu einer Lorentzfunktion können die Elektronen auch um nicht exakt eine Phononenenergie gestreut werden, weshalb sich eine Fermi-artige Verteilung einstellt, sich aber weiterhin für kurze Zeiten Kaskaden, die sich zunehmend verbreitern, bilden, da die Streuungen weiterhin überwiegend nahe einer Phononenenergie stattfindet. Durch Berücksichtigung von Memory-Effekten ergibt sich bei schnellen Änderungen der Besetzung eine stärkere Verbreiterung der Kaskaden.

Die Berücksichtigung von Polaron-Effekten mittels Green-Funktionen erlaubt es, mit den durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung renormierten Energien und Lebensdauern zu arbeiten. Die Green-Funktionen liefern die begrenzte Lebensdauer der Zustände, wobei eine lange Lebensdauer von Zuständen unterhalb einer Phononenenergie auftritt, da aus diesen Zuständen keine Phononen emittiert werden können, die zu der langsameren Streuung in diesem Bereich führt. So ist hier der Abfall der Besetzung unterhalb einer Phononenenergie deutlich verlangsamt. Die Green-Funktionen erlauben es, Spektralfunktionen der Polaronen zu berechnen, die Phonon-Repliken aufweisen, die als Quasiteil-

chen interpretiert werden können. Aus den Spektralfunktionen lassen sich die renormierten Dispersionen ablesen. Aufgrund der Wechselwirkung mit den Phononen ergibt sich eine Energieabsenkung, der Polaronshift und eine größere effektive Masse der Polaronen, was zu einer geringfügigen Verschiebung der Streuung führt.

Die Relaxation läuft in allen Modellen abhängig von der Anfangsverteilung auf einer Zeitskala von wenigen ps ab. Dabei ist die Geschwindigkeit in allen Modellen ähnlich. Zwar ist diese aufgrund des unterschiedlichen Verhaltens der Modelle nicht direkt vergleichbar; allerdings ist der Abfall der Anfangsverteilung kaum davon betroffen und für alle Modelle ähnlich schnell.

Für die Berechnung mit Green-Funktion wurde auch das Verhalten bei verschiedenen Temperaturen untersucht. Dabei beeinflusst die Temperatur die Geschwindigkeit der Relaxation nur schwach. Im Wesentlichen bewirkt eine höhere Temperatur lediglich ein stärkeres Verschmieren der Kaskaden. Unterhalb einer Phononenergie bewirkt eine höhere Temperatur allerdings eine schnellere Relaxation.

In der vorliegenden Studienarbeit wurde nur die Wechselwirkung von Elektronen mit Phononen betrachtet; es liegt nahe, auch weitere Wechselwirkungen - insbesondere die Elektron-Elektron-Streuung, die bei größeren Elektronendichten wichtig ist - mit zu berücksichtigen. Auch wurde nur das Leitungsband betrachtet und dabei das Valenzband vollkommen außer Acht gelassen. Dieses mit einzubauen, würde insbesondere erlauben, die optische Anregung von Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband zu beschreiben, anstatt eine Anfangsverteilung direkt vorzugeben. Hier wurde ein Volumenmaterial betrachtet; für viele Anwendungen sind allerdings niederdimensionale Strukturen interessanter. Durch Reduktion der Dimensionen, durch die sich insbesondere die Matrixelemente der Wechselwirkung ändern, können die hier behandelten Modelle auch auf solche Strukturen wie Quantenfilme angewendet werden. Auch können andere Materialsysteme wie II-VI-Legierungen oder Gruppe III-Nitride, die eine stärkere Kopplung aufweisen, betrachtet werden, indem die diesem Material entsprechenden Parameter verwendet werden. In solchen Systemen werden stärkere polaronische Effekte erwartet [12], so dass die diskutierten Verbesserungen der Boltzmannschen Streuterme dort noch wichtiger sein sollte.

A Anhang

A.1 Polare Kopplung in Ionenkristallen

Ist \mathbf{R}_j die Position eines Ions j im starren Gitter und \mathbf{r}_j die tatsächliche Position, gilt für die Auslenkung des Ions in einem Kristall $\mathbf{Q}_j = \mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j$. Diese können analog zum harmonischen Oszillator mittels Normalmodenentwicklung durch Erzeuger b_q^\dagger und Vernichter b_q dargestellt werden,

$$\mathbf{Q}_j = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) , \quad (83)$$

wobei $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ Einheitsvektor in Richtung der Schwingung \mathbf{q} ist.

Nähert man die Wechselwirkungsenergie linear, ergibt sich für kleine Auslenkungen als Abweichung vom starren Gitter

$$E_{e-ph}(\mathbf{r}) = - \sum_j \mathbf{Q}_j \cdot \nabla E_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) , \quad (84)$$

wobei $E_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ die durch das Ion j für ein Elektron am Ort \mathbf{r} hervorgebrachte Wechselwirkungsenergie ist. Für den Wechselwirkungshamiltonian gilt

$$H_{e-ph} = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) E_{e-ph}(\mathbf{r}) , \quad (85)$$

mit $\rho(\mathbf{r})$ Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen. Durch Fouriertransformation erhält man mit Gl. (83) und $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$

$$H_{e-ph} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) \quad (86)$$

mit

$$M_{\mathbf{q}} = i\mathbf{q} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}N}} E_{\mathbf{q}} \quad (87)$$

Matrizelement der Wechselwirkung, wobei $E_{\mathbf{q}}$ Fouriertransformierte von E_{e-ph} ist.

Da dieses Matrizelement das Skalarprodukt aus Wellenvektor \mathbf{q} der Phononen und Schwingungsrichtung $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ der Ionen beinhaltet, liefert es nur für Schwingungen in Ausbreitungsrichtung einen nicht verschwindenden Beitrag, so dass nur longitudinale Phononen zur Wechselwirkung beitragen. Ferner werden akustische Phononen aufgrund ihrer vergleichsweise geringen Energie um den Γ -Punkt vernachlässigt. Daher wird nur die Wechselwirkung mit LO-Phononen betrachtet.

Bestimmung der Matrizelemente

Die makroskopische Polarisation

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_j) = -E_{e-ph} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} \mathbf{Q}_j \quad (88)$$

am Ort des Ions j ist proportional zu dessen durch seine Auslenkung verursachtes Dipolfeld $e\mathbf{Q}_j$. Dabei ist e die Elementarladung. Die dielektrische Verschiebung ist als Fourierreihe dargestellt

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} (\epsilon_0 \mathbf{U}_{\mathbf{q}} + \mathbf{P}_{\mathbf{q}}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (89)$$

wobei $\mathbf{U}_{\mathbf{q}}$ Fouriertransformierte des elektrischen Feldes und $\mathbf{P}_{\mathbf{q}}$ Fouriertransformierte der Polarisation ist. Sind keine freien Ladungen vorhanden und damit $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, folgt

$$\mathbf{U}_{\mathbf{q}} = -\frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P}_{\mathbf{q}}. \quad (90)$$

Das elektrische Feld kann durch ein skalares Potential Φ mit $\mathbf{U} = -\nabla\Phi$ beschrieben werden, so dass sich Gl. (90) in

$$\Phi_{\mathbf{q}} = \frac{-i}{\epsilon_0 q^2} \mathbf{q} \mathbf{P}_{\mathbf{q}} \quad (91)$$

umformen lässt. Durch Einsetzen von Gl. (88) und (83) ergibt sich

$$\Phi(\mathbf{r}) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{LO}V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{eE_{\mathbf{q}}}{|\mathbf{q}|\epsilon_0} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger). \quad (92)$$

Dabei ist ρ die Massendichte und es wurde $mN = \rho V$ verwendet. Damit folgt für den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H_{e-ph} &= i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{LO}V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{eE_{\mathbf{q}}}{|\mathbf{q}|\epsilon_0} \sum_j e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) \\ &= \sum_{\mathbf{q}} \hbar \lambda_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger). \end{aligned} \quad (93)$$

Dies entspricht formal der Verschiebung eines verschobenen harmonischen Oszillators mit den Energie-Eigenwerten

$$E = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{LO} \left(n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hbar}{\omega_{LO}} |\lambda_{\mathbf{q}}|^2 = E_0 + E_R, \quad (94)$$

die sich aus einem Anteil E_0 eines harmonischen Oszillators und der Relaxationsenergie E_R durch die Verschiebung zusammensetzt [5]. Dabei beinhaltet die Relaxationsenergie

$$E_R = \frac{-e^2}{2V\omega_{LO}^2\rho\epsilon_0^2} \sum_{\mathbf{q},j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)} \frac{E_{\mathbf{q}}^2}{q^2} = \frac{1}{2} \sum_j V_R(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) \quad (95)$$

ein Coulomb-artiges, abgeschirmtes Potential. Es gilt

$$V_R(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|} \Gamma, \quad (96)$$

wobei $\Gamma = -\frac{E_{e-ph}^2}{\omega_{LO}^2 \rho \epsilon_0}$ die Abschirmung darstellt, die ebenfalls durch die statische Dielektrizitätskonstante ϵ und die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante ϵ_∞ beschrieben werden kann,

$$\Gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon}, \quad (97)$$

so dass sich für die Matrixelemente der Wechselwirkung durch Einsetzen in Gl. (93)

$$|M_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 \mathbf{q}^2} \frac{\hbar \omega_{LO}}{2V} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \quad (98)$$

ergibt.

A.2 Exzitonische Einheiten

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

$$\mathbf{x} = a_0 \cdot \mathbf{k} \quad (99)$$

und Energien als Vielfaches der exzitonischen Grundzustandsenergie E_B ,

$$E' = \frac{E}{E_B}. \quad (100)$$

Dabei gilt

$$E_B = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}, \quad (101)$$

sowie

$$a_0 E_B = \frac{4\pi \hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_\infty}{me^2}, \quad (102)$$

wobei ϵ_0 ist die Dielektrizitätskonstante des Vakuums, ϵ_∞ die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante, m die freie Elektronenmasse und e die Elementarladung ist.

A.3 Numerische Methoden

Zur Integration wird stets linear zwischen den Stützstellen interpoliert; dies wird Trapezverfahren genannt. Zur Lösung der Differentialgleichungen wird hier entweder das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung oder das Prädiktor-Korrektor-Verfahren dritter Ordnung verwendet. Das Runge-Kutta-Verfahren ist zwar prinzipiell genauer als das Prädiktor-Korrektor-Verfahren, doch erlaubt dieses entgegen dem Runge-Kutta-Verfahren Kenntnis der über die Differentialgleichungen zu bestimmenden Variablen zur aktuellen Zeit, was bei der Berechnung von Memory-Effekten notwendig ist, da diese Zeitintegrale beinhalten, die empfindlich von den Integrationsgrenzen abhängen. So wird für die Berechnungen in Markov-Näherung, die keine Memory-Effekte beinhalten, das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung verwendet, wohingegen für die restlichen Berechnungen, also die mit Memory-Effekten, das Prädiktor-Korrektor-Verfahren dritter Ordnung verwendet wird. Eine detaillierte Beschreibung der verwendeten Methoden ist beispielsweise in [4] zu finden.

A.4 Verwendete Parameter und Konstanten

Folgende Parameter und Konstanten wurden für die Berechnungen verwendet:

verwendete Parameter:

LO-Phononenenergie	$\hbar\omega_{LO}$	$36meV$
exzitonische Bindungsenergie	E_B	$4,2meV$
exzitonischer Bohrradius	a_0	$1,24 \cdot 10^{-6}cm$
Fröhlich-Kopplungskonstante	α	$0,069$
relative effektive Masse	μ/m	$1,284$
Elektronendichte	n	$10^{17}cm^{-3}$

verwendete Konstanten:

Boltzmannkonstante	k_b	$0,08617meV/K$
diracsche Konstante	\hbar	$0,658meV \cdot ps$
Pi	π	$3,1416$

Für die Numerik wurden folgende k -Raster in exzitonischen Einheiten verwendet:

-Für die Markov-Näherung ohne Lorentzverbreiterung wurde ein energetisch äquidistantes Raster mit 1201 Punkten im Abstand von $0,1E_B$ von 0 bis $120E_B$ verwendet.

-Für die Markov-Näherung mit Lorentzverbreiterung wurde ein bezüglich des Impulses äquidistantes Raster mit 171 Punkten im Abstand von $0,05a_0^{-1}$ von 0 bis $8,5a_0^{-1}$ verwendet.

-Für die Rechnung mit Memory-Effekt und Green-Funktionen wurde ein über zwei Bereiche bezüglich des Impulses äquidistantes Raster mit insgesamt 126 Punkten verwendet. Dabei sind die ersten 66 Punkte im Abstand von $0,0747a_0^{-1}$ von 0 bis $4,5738a_0^{-1}$ und die restlichen 60 Punkte im Abstand von $0,0918a_0^{-1}$ von $4,6656a_0^{-1}$ bis $10,449a_0^{-1}$ angeordnet.

B Literaturverzeichnis

- [1] G. Czycholl: *Theoretische Festkörperphysik*, 1. Auflage, Vieweg, 2000.
- [2] L. Banyai et al.: *Self-consistent RPA retarded polaron Green function for quantum kinetics*, Eur. Phys. J. B **1**, 209-213 (1998).
- [3] P. Gardner et al.: *Relaxation properties of the quantum kinetics of carrier-LO-phonon interaction in quantum wells and quantum dots*, Phys. Rev. B **73** 115307 (2006).
- [4] W. Press: *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1992.
- [5] H. Haken: *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 2. Auflage, Teubnerverlag, 1993.
- [6] I.N. Bronstein et al.: *Taschenbuch der Mathematik*, 6. Auflage, Harri Deutsch, 2005.
- [7] J. Seebeck: *Dichtematrix-Formulierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Halbleitern*, Studienarbeit, Universität Bremen, 2003.
- [8] M. Lorke: *Coulomb-Streuung in Halbleiter-Quantenfilmen*, Studienarbeit, Universität Bremen, 2003.
- [9] A.L. Fetter, J.D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, 1. Auflage, McGraw-Hill, 1971.
- [10] F. Jahnke: *Theoretische Festkörperphysik I*, Universität Bremen, Vorlesungsmitschrift, WS 2006/7.
- [11] F. Jahnke: *Theoretische Festkörperphysik II*, Universität Bremen, Vorlesungsmitschrift, SS 2007.
- [12] J. Seebeck: *Polarons in semiconductor quantum dots and their role in the quantum kinetics of carrier relaxation*, Phys. Rev. B **71**, 125327 (2005).