

Raum-Zeitdynamik lokaler Anregungen in Halbleiterstrukturen

Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

dem
Fachbereich Physik
der Philipps-Universität Marburg
vorgelegt von

Steffen Kuckenburg
aus Görlitz

Marburg/Lahn 2001

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg
als Dissertation angenommen am 02.07.2001

Erstgutachter: Prof. Dr. P. Thomas
Zweitgutachter: Prof. Dr. U. Höfer
Tag der mündlichen Prüfung: 05.07.2001

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Beschreibung	4
2.1	Der Hamiltonoperator	4
2.1.1	Dipol - Dipol Wechselwirkung	5
2.1.2	Feldquantisierungen	6
2.1.3	Matrizelemente	8
2.1.3.1	Phononen	10
2.1.3.2	Photonen	11
2.1.3.3	Coulombwechselwirkung	12
2.1.3.4	Dipol-Dipol Terme	13
2.1.3.5	Unordnung	13
2.1.3.6	Symmetrien	15
2.2	Die Bewegungsgleichungen	16
2.2.1	Der Grenzfall niedriger Anregungsintensitäten	22
2.2.2	Problem der Ensemblemittelung	28
3	Anwendungen	34
3.1	Relevante Größen bei der Raum-Zeitdynamik	34
3.2	Systeme nichtwechselwirkender Teilchen	37
3.3	Elektronische Systeme	39
3.3.1	Frei-Teilchenpropagation	42
3.3.2	Coulombkorrelierte Zustände	43
3.3.2.1	Anregungen am Exziton	44
3.3.2.2	Anregungen oberhalb der Bandkante	47
3.3.2.3	Anregungen an der Bandkante	49
3.3.2.4	Das zweite Moment	52
3.3.2.5	Dynamik ungebundener Zustände	54
3.4	Exzitonische Systeme	56
3.4.1	Analytisch lösbare Modellsysteme	56
3.4.1.1	Zusammenhang räumlich homogener und inhomogener Lösung	56
3.4.1.2	Lösung der Fokker-Planckgleichung	62

3.4.1.3	Konstante Drift und Diffusionskoeffizienten	67
3.4.1.4	Exziton-Phononstreuung und Frei - Teilchenpropagation	69
3.4.1.5	Verhalten auf kurzen und langen Zeitskalen	70
3.4.2	Numerische Auswertung der Bewegungsgleichungen	71
3.4.2.1	Geordnete Systeme	72
3.4.2.2	Ungeordnete Systeme bei $T=0$	84
3.4.2.3	Ungeordnete Systeme und Phononen	97
4	Zusammenfassung	109
A	Modellparameter	112
B	Spezielle Funktionen	113
B.1	Transversale Deltafunktion	113
B.2	Die hypergeometrische Funktion	114
B.3	Exziton-Wellenfunktionen	114
C	Bewegungsgleichungen	116
C.1	Volle Korrelationen	116
C.2	Korrekturen	120
C.2.1	Faktorisierungen	120
C.2.2	Bewegungsgleichungen	122
C.2.3	Symmetrien in den Korrekturen	134

Kapitel 1

Einleitung

Halbleiter besitzen im heutigen Leben eine immense Bedeutung. Praktisch überall sind sie anzutreffen, sei es in Computern, Mobiltelefonen oder CD-Spielern, aber auch in Uhren und anderen alltäglichen Gegenständen, denen es auf den ersten Blick gar nicht anzusehen ist. Umso wichtiger ist es, zu verstehen, warum Halbleiter sich so verhalten, wie sie es eben tun. Dabei steht die Halbleiterphysik am Kreuzungspunkt zwischen praktischer Anwendung und Grundlagenforschung. Viele der Aspekte dieser speziellen Festkörper sind bisher nur unzureichend verstanden, insbesondere wenn es um Effekte geht, welche nicht durch Modelle der klassischen Physik erklärt werden können. Das soll jedoch nicht darüber hinwegtäuschen, daß in den letzten Jahren beachtliche Fortschritte verzeichnet werden konnten, sowohl auf theoretischer, wie auch experimenteller und anwendungstechnischer Seite. Dabei eröffnen neue epitaktische Herstellungsverfahren wie auch die sich ständig weiterentwickelnde Lasertechnik immer neue Möglichkeiten der Untersuchung von Halbleitern. Die Aufgabe der Theorie ist es nun, neu gefundene Phänomene zu beschreiben. Das dadurch erlangte tiefere Verständnis ablaufender Mechanismen resultiert wiederum in neuen Bauelementen und Fertigungstechnologien, so daß hier die enge Verbindung von Grundlagenforschung und aktueller Anwendung deutlich wird.

Viele der besonders nützlichen Eigenschaften verdanken Halbleiter einer „inneren“ Strukturierung, d.h einer räumlichen Kombination verschiedener Halbleitermaterialien. Dabei entstehen sogenannte Quantenfilme, eine Halbleiter Doppel-Heterostruktur, Quantendrähte, -punkte und andere, gegebenenfalls noch kompliziertere Anordnungen. Jede dieser Strukturen besitzt typische Eigenschaften, welche in einer Vielzahl von Abhandlungen untersucht werden. Aus allen möglichen interessanten Gesichtspunkten soll es in dieser Arbeit um den Aspekt der raumzeitlichen Dynamik optisch lokal angeregter Ladungsträger gehen (Abb. 1.1). Damit beinhaltet sie sowohl Elemente der Transporttheorie, wie auch der Optik. Allerdings wird die Situation dadurch wesentlich erschwert, da es sich um nichthomogene wie auch um Nichtgleichgewichtssysteme handelt.

Die drei wesentlichen in dieser Arbeit behandelten Hauptgebiete sind:

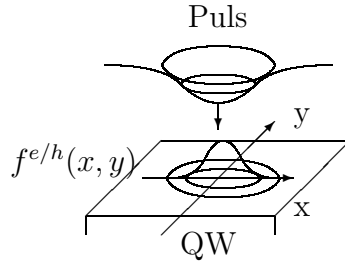


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der Anregung eines Halbleiter-Quantenfilmes durch ein räumlich fokussiertes Lichtfeld. Der Lichtpuls erzeugt Polarisation, welche in der Folge elektronische und exzitonische Dichte „produziert“. Polarisation, wie auch die Dichten unterliegen einer räumlichen Verbreiterung mit der Zeit.

1. Die theoretische Beschreibung eines Systems, welches sowohl der Coulombwechselwirkung, wie auch dem Einfluß von Gitterschwingungen (Phononen) und struktureller Unordnung unterliegt. Alle Wechselwirkungen werden vollständig quantisiert innerhalb einer mikroskopischen Theorie beschrieben, wobei erstmals sämtliche Anteile gleichzeitig bis zur 4-Operatorebene konsistent berücksichtigt werden. Enthalten sind in dieser Beschreibung ebenfalls nichtlineare Effekte des Lichtfeldes, wie auch Inter- und Intradbandanteile der Materie-Feldwechselwirkung.
2. Die Wellenpaketdynamik kohärenter Elektron- und Lochdichte unter Einfluß der Coulombwechselwirkung in zweidimensionalen Systemen unter Voraussetzung einer Anfangsverteilung. Dabei können die Grenzfälle resonanter Anregung am 1s-Exziton und Anregungen oberhalb der Bandkante weitestgehend analytisch behandelt werden.
3. Die Propagation exzitonischer Wellenpakete in Grenzfall niedriger Anregungsintensitäten bei voller Einbeziehung der optischen Anregungs-, Streu- und Zerfallsprozesse. Die stärkste Einschränkung in den Berechnungen liegt in der Beschränkung auf die 1s-Exzitonen. Das zugrunde gelegte Modell berücksichtigt jedoch sowohl typische GaAs-Parameter, wie auch die endliche Breite des Quantenfilmes und den dreidimensionalen Charakter der Phononen und Photonen. Aufgrund der Quantisierung des Lichtfeldes wird dabei die spontane Rekombination des Ladungsträger qualitativ richtig wiedergegeben. Damit ist dies mehr als nur eine reine Modellstudie.

Im Rahmen dieses Gebietes der Arbeit erfolgt auch der Versuch einer analytischen Beschreibung der Exziton-Phononstreuung. Dabei wird die zugehörige Fokker-Planckgleichung verschiedenen Näherungen unterzogen und es wird gezeigt, wie man mit einer speziellen Anfangsverteilung zu analytischen Resultaten gelangt.

Die Arbeit ist darüber hinaus auch im Zusammenhang aktueller Forschung zur Sekundäremission zu sehen[1]. Die im Theorieteil entwickelten Gleichungen enthalten so nicht nur den Zugang aufgrund phononenassistierter Generation von inkohärenter Exzitonendichte im Grenzfall niedriger Anregungsintensitäten[2, 3, 4], sondern auch die Emission aufgrund coulombkorrelierter Elektron-Lochpaare[5]. Durch die Berücksichtigung der Unordnung erhält man prinzipiell ebenfalls sämtliche Aspekte der Emission kohärenter und inkohärenter Anteile der Sekundäremission. Da im weiteren Verlauf der Arbeit sowohl eine Markovnäherung bezüglich der Unordnung durchgeführt sowie ensemblegemittelte Gleichungen gelöst werden, verliert man die Möglichkeit, die meisten der relevanten Aspekte weiterhin zu beschreiben.

Bisherige theoretische Arbeiten zur Wellenpaketdynamik haben bisher jeweils nur Phononen, nur Unordnung oder auch nur die Coulombwechselwirkung enthalten, aber noch nicht alle Wechselwirkungen gleichzeitig[6, 7, 8]. Weiterhin wurden ebenfalls oft phänomenologische Ratengleichungen benutzt, um die Wechselwirkungsprozesse zu beschreiben. So wurde die Dynamik der elektronischen Wellenpakete unter Einfluß von Phononen und Unordnung bereits von [8, 9] untersucht, so daß die hier angestellten Betrachtungen diese komplettieren. Auf experimenteller Seite sind diesbezüglich Arbeiten von [10, 11, 12] zu nennen, welche sich mit der räumlich aufgelösten Kurzzeitspektroskopie oder Pump- und Probeexperimenten mit herkömmlich fokussierten Pulsen oder anhand von Immersionslinsen beschäftigten. Kohärenter Transport in räumlich homogenen Systemen bei angelegten dc-Feldern wurde bereits von [13] vorhergesagt und experimentell anhand optisch induzierter Bloch-Oszillationen beobachtet[14, 15].

Die hier vorgestellten Rechnungen zur exzitonischen Wellenpaketpropagation bilden damit die konsequente Fortführung der Arbeiten zur elektronischen Raum-Zeitdynamik auf nächsthöherer Korrelationsebene. Dabei wurde nun auch die Dynamik der Anregungsprozesse explizit in den Rechnungen berücksichtigt, was aufgrund der komplizierten Generation der inkohärenten Exzitonendichte auch notwendig ist.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut:

- In Kapitel 2 erfolgt die theoretische Beschreibung. Es werden die Bewegungsgleichungen hergeleitet, notwendige Näherungen dargestellt und die Matrixelemente ausgewertet, so daß der Zusammenhang mit experimentellen Größen gegeben ist. Die Berechnung erfolgt dabei unter Annahme eines endlich breiten Quantenfilmes.
- Kapitel 3 enthält zunächst die Diskussion der für das Verständnis der raumzeitlichen Dynamik relevanten Größen. Anschließend werden Systeme nichtwechselwirkender Teilchen betrachtet, da in diesem Fall eine analytische Auswertung möglich ist und so prinzipielle Eigenschaften herausgearbeitet werden können. Im Anschluß daran erfolgt die Diskussion elektronischer und exzitonischer Wellenpaketpropagation.

Kapitel 2

Theoretische Beschreibung

In diesem Kapitel erfolgt die theoretische Beschreibung des zugrunde liegenden Modells. Ziel ist es, einen umfassenden Satz von Gleichungen, welcher die Wechselwirkungen des elektronischen Systems sowohl mit Phononen wie auch mit Photonen und Unordnung enthält, zu bestimmen.

2.1 Systembeschreibung – Der Hamiltonoperator

Dazu beginnen wir mit dem üblichen Hamiltonoperator[16]

$$\begin{aligned} H = & \int d^3r \quad \Psi^\dagger(\vec{r}) \left\{ \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + V(\vec{r}) + \frac{1}{2} e \Phi(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left[\left(\frac{\dot{\vec{A}}(\vec{r})}{c} \right)^2 + \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.1)$$

$\Psi^\dagger(\vec{r})$ und $\Psi(\vec{r})$ sind dabei die Zustands-Feldoperatoren, $\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)$ beschreibt den generalisierten Impuls eines Teilchens mit Masse m in einem elektromagnetischen Feld, das wiederum durch das skalare $\Phi(\vec{r})$ und das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$ charakterisiert wird. $V(\vec{r})$ ist ein äußeres Potential, welches hier durch strukturelle Unordnung gegeben ist. Der Ausdruck in der zweiten Zeile enthält die Energie des reinen elektromagnetischen Feldes. Bevor nun die übliche Entwicklung der Feldoperatoren in einer Basis erfolgt, wird zunächst eine kanonische Transformation angewendet.

2.1.1 Die kanonische Transformation – Dipol - Dipol Wechselwirkung

Ziel dieser Transformation ist es, die nichtlinearen Terme im Vektorpotential herauszutransformieren. Bei dieser Transformation wird der Hamiltonoperator von links und rechts mit einem unitären Operator \mathcal{T} multipliziert.

$$\tilde{H} = \mathcal{T}^\dagger H \mathcal{T} \quad (2.2)$$

Dieser Operator \mathcal{T} ist durch folgenden Ausdruck gegeben.

$$\mathcal{T} = e^S = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \Psi(\vec{r})\right) \quad (2.3)$$

Durch die Tatsache, daß \mathcal{T} nicht mit H vertauscht, ist die Berechnung nicht ganz trivial. Eine Möglichkeit dazu besteht darin, \mathcal{T} in eine Reihe zu entwickeln und den resultierenden Ausdruck auszuwerten.

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^S = H + [H, S] + \frac{1}{2!} [[H, S], S] + \frac{1}{3!} [[[H, S], S], S] + \dots \quad (2.4)$$

Prinzipiell würde man auf diese Weise wieder eine Reihe erhalten. Durch Anwendung der Coulomb - Eichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = 0$$

und der Dipolnäherung

$$\sum_i r_i \frac{\partial}{\partial r_k} A_i(\vec{r}) \ll A_k(\vec{r}) \quad (2.5)$$

ist es jedoch möglich, diese Reihe abzurechnen. Man erhält

$$\begin{aligned} [H, S] &= -i\hbar \frac{e}{mc} \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) \\ &\quad - \frac{e^2}{mc^2} \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) A^2(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \\ &\quad + \frac{e}{c} \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \vec{r} \cdot \dot{\vec{A}}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.6)$$

für die Beiträge aus der ersten und

$$\begin{aligned} [[H, S], S] &= \frac{e^2}{mc^2} \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) A^2(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \\ &\quad + 4\pi \int d^3r (\Psi^\dagger(\vec{r}) e \vec{r} \Psi(\vec{r}))_T^2 \end{aligned} \quad (2.7)$$

für die aus der zweiten Ordnung. Da im Rahmen der Dipolnäherung, Glg. (2.5),

$$[[[H, S], S], S] = 0 \quad (2.8)$$

gilt, verschwinden alle höheren Ordnungen in der Reihe und die beiden Terme in Glg. (2.6,2.7) sind mit den entsprechenden Vorfaktoren zu dem ursprünglichen Hamiltonoperator, Glg. (2.4), zu addieren. Der Index T in Glg. (2.7) kennzeichnet hierbei die entsprechende Transversalkomponente des Vektorpotentials, vgl. Anhang B.1.

$$\begin{aligned} \int d^3r (\Psi^\dagger(\vec{r})e\vec{r}\Psi(\vec{r}))_T^2 &= \sum_{ik} \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r})er_i\Psi(\vec{r}) \\ &\times \int d^3r' \Psi^\dagger(\vec{r}')er'_k\Psi(\vec{r}')\delta_{ik}^T(\vec{r}-\vec{r}') \end{aligned} \quad (2.9)$$

Damit erhält man den resultierenden Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \left\{ \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r}) + \frac{1}{2}e\Phi(\vec{r}) + e\vec{r} \cdot \frac{\dot{\vec{A}}(\vec{r})}{c} \right\} \Psi(\vec{r}) \\ &+ 2\pi \int d^3r (\Psi^\dagger(\vec{r})e\vec{r}\Psi(\vec{r}))_T^2 \\ &+ \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left[\left(\frac{\dot{\vec{A}}(\vec{r})}{c} \right)^2 + (\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}))^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Durch die Transformation sind also die nichtlinearen Terme des Vektorpotentials in eine Dipol - Dipol Wechselwirkung umformuliert worden. Die dazu verwendete Näherung, Glg. (2.5), ist nur dann sinnvoll, solange keine Nahfeldeffekte ins Spiel kommen, d.h. solange die Änderung des Vektorpotentials über der Einheitszelle nur gering ist. Andernfalls sind z.B. erst die zweiten Ableitungen des Vektorpotentials nach dem Ort zu vernachlässigen.¹

2.1.2 Feldquantisierungen

Der nächste Schritt besteht darin, den Hamiltonoperator so umzuschreiben, daß anstelle der Feldoperatoren Teilchenoperatoren auftreten. Dazu sind mehrere Schritte notwendig, welche an anderer Stelle ausführlich [16, 17, 18, 19] dargestellt und deshalb an dieser Stelle nur kurz skizziert werden. Zum einen wird das skalare Potential durch Feldoperatoren ausgedrückt. Die Auswertung führt zu drei prinzipiell verschiedenen Anteilen. Die Ursache dafür ist, daß man es nicht nur mit Elektronen, sondern auch mit den Ionenrümpfen zu tun hat. Die drei Anteile repräsentieren also die Ion-Ion, Elektron-Elektron und Ion-Elektron Wechselwirkung. Der rein elektronische Anteil wird einfach so stehengelassen und resultiert in dem bekannten Ausdruck für den Coulombanteil. Die ionische Wechselwirkung dagegen wird in eine Taylorreihe umgeschrieben und nach der zweiten

¹Man beachte, daß in diesem Fall die Auswertung der Matrixelemente (siehe Abschnitt 2.1.3) ebenfalls dementsprechen zu modifizieren ist.

Ordnung abgebrochen (harmonische Näherung). Eine Entwicklung nach ebenen Wellen liefert die sogenannten Phononen als Normalmoden. Dabei kann neben der expliziten Darstellung der Auslenkung $u_{\vec{R}_N\lambda}^\alpha$ der Ionenrümpfe am Ort \vec{R}_N , im Phononenzweig λ und räumlicher Komponente α ,

$$u_{\vec{R}_N\lambda}^\alpha = \sum_{\vec{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_N\omega_{\vec{k}\lambda}N_0}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_N} \left(b_{-\vec{k}\lambda}^\dagger(t)\xi_{-\vec{k}\lambda}^\alpha + b_{\vec{k}\lambda}(t)\xi_{\vec{k}\lambda}^\alpha \right), \quad (2.11)$$

auch die Dispersionsrelation $\omega_{\vec{k}\lambda}$ eines Phonons mit Mode k und Zweig λ

$$\omega_{\vec{k}\lambda}^2 \xi_{\vec{k}\lambda}^\alpha = \frac{1}{\sqrt{m_N}} \sum_{M\mu} \left(\frac{1}{\sqrt{m_N}} - \frac{1}{\sqrt{m_M}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_M - \vec{R}_N)} \right) \xi_{\vec{k}\lambda}^\mu \Phi_{NM}^{\mu\alpha} \quad (2.12)$$

angegeben werden.² $\xi_{\vec{k}\lambda}^\alpha$ kennzeichnet die Richtung der Polarisation des Phonons mit Mode \vec{k} im Zweig λ und m_N die Masse des Ions am Gitterplatz mit Index N . $b_{-\vec{k}\lambda}^\dagger(t)$ und $b_{\vec{k}\lambda}(t)$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des entsprechenden Phonons. Der gemischte Anteil, die Ion-Elektron Wechselwirkung, wird bis zur ersten Ordnung berücksichtigt und gibt die Kopplung des elektronischen an das phononische Subsystem an.

Das Strahlungsfeld wird nach Eigenmoden des Feldes im Vakuum entwickelt und man erhält:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}\sigma} \sqrt{\frac{2\hbar\pi c^2}{V\Omega_{\vec{k}\sigma}}} \vec{\xi}_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(a_{-\vec{k}\sigma}^\dagger + a_{\vec{k}\sigma} \right) \quad (2.14)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{A}(\vec{r}) = i \sum_{\vec{k}\sigma} \sqrt{\frac{2\hbar\pi c^2 \Omega_{\vec{k}\sigma}}{V}} \vec{\xi}_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(a_{-\vec{k}\sigma}^\dagger - a_{\vec{k}\sigma} \right). \quad (2.15)$$

$a_{\vec{k}\sigma}^\dagger$ und $a_{\vec{k}\sigma}$ kennzeichnen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für ein Photon in der Mode k und Polarisation σ . $\Omega_{\vec{k}\sigma}$ ist die Dispersionsrelation der Photonen und $\vec{\xi}_{\vec{k}\sigma}$ wiederum die Polarisationsrichtung.

Mit der in geordneten Kristallen sinnvollen Entwicklung nach Bloch-Wellenfunktionen [20] kann nun der Hamiltonoperator wie folgt formuliert werden:

$$\tilde{H} = \sum_{k\lambda} \epsilon_{k\lambda} c_{k\lambda}^\dagger c_{k\lambda} \quad (2.16)$$

$$+ \sum_{k\lambda} \hbar\Omega_{k\lambda} \left(a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.17)$$

2

$$\Phi_{NM}^{\mu\nu} := \frac{\partial^2}{\partial a_\mu \partial a_\nu} V_{ion-ion}(\vec{a}) \Big|_{\vec{a}=\vec{a}_N^0 - \vec{a}_M^0} \quad (2.13)$$

$$+ \sum_{k\lambda} \hbar\omega_{k\lambda} \left(b_{k\lambda}^\dagger b_{k\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.18)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{1234} W(1234) c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \quad (2.19)$$

$$+ \sum_{124} \Gamma(1224) c_1^\dagger c_4 \quad (2.20)$$

$$+ \sum_{12q\lambda} U_{12}(q\lambda) c_1^\dagger c_2 \quad (2.21)$$

$$+ \sum_{12q\lambda} D_{12}(q\lambda) \left(b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \right) c_1^\dagger c_2 \quad (2.22)$$

$$+ \sum_{12q\lambda} F_{12}(q\lambda) \left(a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \right) c_1^\dagger c_2. \quad (2.23)$$

Hierbei wurden folgende Notationen für die Matrixelemente der unterschiedlichen Wechselwirkungen eingeführt. $\epsilon_{k\lambda}$, $\hbar\Omega_{k\lambda}$ und $\hbar\omega_{k\lambda}$ sind die Freiteilchenenergien für die Elektronen im Band λ und mit Wellenzahl k sowie die Photon- und Phononenergie der Mode k und Polarisation bzw. Zweig λ . $W(1234) = -V(1234) - 2\Gamma(1324)$ ist das Coulombmatrixelement $V(1234)$, renormiert um den Betrag $2\Gamma(1324)$ der Dipol - Dipol Wechselwirkung, der aus dem nichtlinearen Anteil der Materie - Feld Kopplung herrührt. In III-V Halbleitern kann dieser Beitrag gewöhnlich vernachlässigt werden. $\Gamma(1224)c_1^\dagger c_4$ beschreibt Zusatzterme zu den Einteilchenenergien durch die Dipol - Dipol Wechselwirkung. $U_{12}(q\lambda)$, $D_{12}(q\lambda)$ und $F_{12}(q\lambda)$ sind die Matrixelemente, welche zu den Quantenfilmfluktuationen, der Elektron - Phonon und Elektron - Photon Wechselwirkung gehören.

2.1.3 Matrixelemente

Bis jetzt sind diese Matrixelemente nur sehr allgemein formuliert. In diesem Abschnitt wird zunächst die explizite Gestalt dieser Größen angegeben und anschließend wird eine quantenfilmangepasste Auswertung vornehmen. Dies ermöglicht es, die Matrixelemente mit experimentell zugänglichen Größen in Verbindung zu bringen. Als grundlegende Annahme wird von hier an Spiegelsymmetrie im Γ -Punkt der Brillouin - Zone vorausgesetzt.

Die konkrete Form der Matrixelemente ist gegeben durch:

$$V(1234) = \int d^3r d^3r' \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2^*(\vec{r}') \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_3(\vec{r}) \Psi_4(\vec{r}') \quad (2.24)$$

$$D_{12}(\vec{q}\lambda) = -i \int d^3r \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sum_s \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s \omega_{\vec{q}\lambda} s_0}} \vec{q} \cdot \vec{\xi}_{\vec{q}\lambda} \hat{V}_{\vec{q}} \quad (2.25)$$

$$F_{12}(\vec{q}\lambda) = i \int d^3r \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sqrt{\frac{2\hbar\pi\Omega_{\vec{q}\lambda}}{V}} e^{\vec{r}\cdot\vec{\xi}_{\vec{q}\lambda}} \quad (2.26)$$

$$\Gamma(1234) = 2\pi \sum_{kl} \int d^3r d^3r' \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r}) \Psi_3^*(\vec{r}') \Psi_4(\vec{r}') e^2 r_k r'_l \delta_{kl}^T(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.27)$$

Die Indizes 1,2,3,4 sind Sammelindizes für die elektronischen Quantenzahlen, d.h. für die Wellenzahlen, Bänder und Spins. Die bei der Coulombwechselwirkung auftretenden Konstanten e und ϵ kennzeichnen die Elementarladung und die dielektrische Konstante. In der Elektron - Phonon Wechselwirkung, Glg. (2.25), verbleibt die Summe s über die einzelnen Ionenrümpfe der Elementarzelle. Das Potential $\hat{V}_{\vec{q}}$ beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen mit den einzelnen Ionenrümpfen und ist definiert als:

$$\hat{V}_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{M_0}} \sum_M V_{ion-electron}(\vec{R}_M^0) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_M^0}.$$

Die Summe M läuft über alle Gitterplätze \vec{R}_M^0 bei Ruhelage der Ionen.

Im nächsten Schritt wird die Näherung der Einhüllendenfunktionen angewandt. Dabei sind die Wellenfunktionen in der Quantenfilmebene durch ebene Wellen $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ und den Blochfunktionen $u_\lambda(\vec{k}, \vec{r})$ gegeben.

$$\Psi_{k_{||}, k_z, \lambda}(\vec{r}) = f_\lambda(k_z, z) \cdot \frac{1}{A} e^{i\vec{k}_{||} \cdot \vec{r}_{||}} u_\lambda(\vec{k} \approx 0, \vec{r}) \quad (2.28)$$

Die nächste Näherung, welche vorgenommen wird, betrifft die Anzahl der Subbänder im Quantenfilm. Bei einem genügend schmalen Quantenfilm sind diese energetisch hinreichend weit voneinander getrennt und es ist ausreichend, sich auf das unterste Subband zu beschränken. Die Einhüllende ist dann bei Annahme unendlich hoher Barrieren durch

$$f_\lambda(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \cos\left(\frac{\pi z}{L_z}\right) \quad (2.29)$$

gegeben. Bei den folgenden Rechnungen kommt noch eine weitere Näherung zum Tragen. Es wird angenommen, daß nur die Blochfunktionen über einer Elementarzelle variieren und die restlichen Größen nahezu konstant sind. Diese Näherung ist konsistent mit der Dipolnäherung, Glg. (2.5). In diesem Fall können die Ortsintegrale, Glg. (2.24) - (2.27), in Summen über Elementarzellen

$$\int_V d^3r \rightarrow \sum_\Omega \int_\Omega d^3r \quad (2.30)$$

aufgespalten werden. Die Vollständigkeit und Orthogonalität der Blochfunktionen [20] erlaubt dann die Auswertung der Integrale über einer Elementarzelle. Anschließend wird die Summe über die Elementarzellen wieder in ein Integral umformuliert.

2.1.3.1 Phononen

Nach Anwendung der Näherung der Einhüllendenfunktionen, Glg. (2.28), und weiterer Auswertung des Phononmatrixelementes, Glg. (2.25), erhält man:

$$D_{12}(\vec{q}\lambda) = -i\delta_{k_1, k_2+q_{||}}^{\lambda_1 \lambda_2} \sum_s \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s s_0 \omega_{\vec{q}\lambda}}} \vec{q} \cdot \vec{\xi}_{\vec{q}\lambda} \hat{V}_{\vec{q}} f(q_z) \quad (2.31)$$

$$= \delta_{k_1, k_2+q_{||}}^{\lambda_1 \lambda_2} D_{\lambda_1}(\vec{q}\lambda), \quad (2.32)$$

wobei die einzige Modifikation im Vergleich zum strikt zweidimensionalen Fall in einem Formfaktor $f(q_z)$ besteht.

$$f(q_z) = \frac{\sin(\frac{q_z L_z}{2})}{\frac{q_z L_z}{2}} + \sin(\frac{q_z L_z}{2}) \left(\frac{\pi^2}{\frac{L_z q_z}{2}} - \frac{L_z q_z}{2} \right)^{-1} \quad (2.33)$$

Das Kronecker-Delta im Matrixelement sichert die Impulserhaltung. Indem die diskrete Verteilung der Atome in der Einheitszelle durch eine uniforme Massendichte ρ_m ersetzt wird

$$\sum_s \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s s_0 \omega_{\vec{q}\lambda}}} \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2V \rho_m \omega_{\vec{q}\lambda}}},$$

kann nun das Matrixelement mit experimentell zugänglichen Größen ausgedrückt werden. Im Folgenden werden zwei mögliche Arten der Wechselwirkung betrachtet: Die Deformationspotential- und die Fröhlichkopplung [16].

2.1.3.1.1 Longitudinal akustische Phononen Im langwelligen Grenzfall $q \approx 0$ betrachtet man als Näherung:

$$\hat{V}_{\vec{q}} \approx D_{c/v} = \text{const.}$$

Weiterhin drückt man die Phononenfrequenz ω_q durch die Schallgeschwindigkeit c_{LA} im Kristall aus.

$$\omega_q = q c_{LA} \quad (2.34)$$

Die Annahme der räumlichen Isotropie ist in den meisten Fällen in Bezug auf die Elektron - Phonon Wechselwirkung eine hinreichend gute Näherung. Damit gilt

$$\vec{q} \parallel \vec{\xi}_{\vec{q}, LA}$$

und man erhält für das Matrixelement:

$$|D_{c/v}(\vec{q}, LA)|^2 = \frac{\hbar D_{c/v}^2}{2V \rho_m c_{LA}} q f^2(q_z). \quad (2.35)$$

Kennzeichnend ist die lineare Abhängigkeit, welche in zweidimensionalen Systemen zu nichtkonvergierenden Summen im Hamiltonian führen kann. Die Betrachtung eines endlich breiten Quantenfilmes liefert jedoch den Formfaktor $f(q_z)$, welcher dieses Verhalten behebt. Anhand der Dispersionsrelation, Glg. (2.34), und der Form des Matrixelementes wird klar, daß longitudinal akustische Phononen große Energien bei großen Impulsen übertragen.

2.1.3.1.2 Optische Phononen Im Fall der Fröhlichkopplung ist die Phononfrequenz näherungsweise durch eine Konstante gegeben:

$$\omega_{\vec{q}} = \omega_{LO} \approx const. \quad (2.36)$$

Mit der dreidimensionalen Coulombanziehung zwischen Elektronen und Ionenrümpfen

$$\hat{V}_{\vec{q}} = \frac{U}{\epsilon_0 q^2}$$

kann das gesuchte Matrixelement als

$$|D_{c/v}(\vec{q}, LO)|^2 = \frac{\hbar U_{c/v}^2}{2V \rho_m \omega_{LO} \epsilon_0^2 q^2} f^2(q_z) \quad (2.37)$$

geschrieben werden. Die Konstante $U_{c/v}^2$ ist gegeben durch

$$U_{c/v}^2 = e^2 \rho_m \omega_{LO}^2 \epsilon_0 \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right),$$

wobei $\epsilon(0)$ und $\epsilon(\infty)$ die dielektrischen Konstanten im statischen ($\omega = 0$) und hochfrequenten ($\omega = \infty$) Grenzfall sind [16]. Das Matrixelement erhält damit die endgültige Form:

$$|D_{c/v}(\vec{q}, LO)|^2 = \frac{\hbar \omega_{LO}}{2V} \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) f^2(q_z). \quad (2.38)$$

In Gegensatz zum langwelligen Grenzfall bestehen hier selbst in streng zweidimensionalen Systemen keine Konvergenzprobleme ($|D_{c/v}(\vec{q}, LO)|^2 \sim q^{-2}$). Der Formfaktor $f(q_z)$ verstärkt nur die Tendenz starker Kopplung an kleine q . In Zusammenhang mit der Dispersionsrelation, Glg (2.36), sieht man, daß optische Phononen große Energien bei kleinen Impulsen übertragen.

2.1.3.2 Photonen

Das Elektron - Photon Matrixelement, Glg. (2.26), liefert beim Übergang zur Summe über Elementarzellen, Glg. (2.30), zwei physikalisch wohl unterscheidbare

Beiträge: die Interband- und Intrabandkopplung.

$$F_{12}(\vec{k}\sigma) = i\sqrt{\frac{2\hbar\pi\Omega_{\vec{k}\sigma}}{V}} \left[\vec{d}_{k_1k_2}^{\lambda_1\lambda_2} \cdot \vec{\xi}_{\vec{k}\sigma} \delta_{k_1, k_2+k_{||}} + \frac{e}{A} \int d^2R e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_{||}) \cdot \vec{R}} \vec{R} \cdot \vec{\xi}_{\vec{k}\sigma} \delta^{\lambda_1\lambda_2} \right] \cdot f(k_z) \quad (2.39)$$

$$= F(\vec{k}\sigma) \vec{\xi}_{\vec{k}\sigma} \cdot \left(\underbrace{\vec{d}_{k_1k_2}^{\lambda_1\lambda_2}}_{\text{inter-band}} - i e \delta^{\lambda_1\lambda_2} \underbrace{\vec{\nabla}_{k_{||}}}_{\text{intra-band}} \right) \delta_{k_1, k_2+k_{||}} \quad (2.40)$$

Beiden Anteilen ist gemein, daß wiederum das impulserhaltende Kronecker-Delta auftritt. Der Interbandanteil enthält den bekannten Ausdruck eines Produktes aus dem Dipolmatrixelementes

$$\vec{d}_{k_1k_2}^{\lambda_1\lambda_2} = e \int_{\Omega} d^3r u_{\lambda_1}^*(k_1, \vec{r}) \vec{r} u_{\lambda_2}(k_2, \vec{r}) \quad (2.41)$$

mit dem Polarisationsvektor des Lichtfeldes und Feldamplitude. Das Dipolmatrixelement ist für gleiche Bänder verschwindend klein, so daß dieser Anteil Übergänge zwischen verschiedenen Bändern beschreibt.

Im Intrabandanteil zeigt das Kronecker-Delta in Bezug auf die Bänder, daß nur Übergänge innerhalb eines Bandes möglich sind. Die Stärke dieser Kopplung wird durch den Impulsgradienten bestimmt.³ Dieser Anteil kann formal als Produkt vom Intrabanddipol mit dem Polarisationsvektor des Lichtfeldes und der Feldamplitude aufgefaßt werden. Die Berücksichtigung der endlichen Dicke des Quantenfilmes resultiert wie bei den Phononen in dem Formfaktor $f(k_z)$, Glg. (2.33).

2.1.3.3 Coulombwechselwirkung

Das Coulombmatrixelement, Glg. (2.26), ergibt sich als

$$V(1234) = V(k_1 - k_3) \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \delta^{\lambda_1\lambda_3} \delta^{\lambda_2\lambda_4} \quad (2.42)$$

$$V(q) = \frac{2\pi e^2}{A\epsilon_0 q} F(q) \quad (2.43)$$

mit dem Formfaktor

$$F(q) = \frac{2}{L_z q} + \frac{L_z q}{(L_z q)^2 + 4\pi^2} - 2 \left(\frac{1}{L_z q} - \frac{L_z q}{(L_z q)^2 + 4\pi^2} \right)^2 \cdot (1 - e^{-L_z q}). \quad (2.44)$$

Wie bereits bei der Elektron - Phonon und Elektron - Photon Wechselwirkung wird auch hier durch das Kronecker-Delta die Impulserhaltung sichergestellt.

³Man beachte, daß der Gradient auf die Deltafunktion wirkt!

2.1.3.4 Dipol-Dipol Terme

Ähnlich wie bei der Elektron - Photon Wechselwirkung, vgl. Glg. (2.40), ergeben sich auch bei der Dipol - Dipol Wechselwirkung, Glg. (2.27), verschiedene Anteile.⁴

$$\begin{aligned} \Gamma(1234) &= 2\pi \sum_{l\sigma} \left[\delta_{k_1, k_2 - l_{||}} \vec{d}_{k_1 k_2}^{\lambda_1 \lambda_2} \cdot \vec{\xi}_{l\sigma} + ie \delta^{\lambda_1 \lambda_2} \vec{\xi}_{l\sigma} \cdot \vec{\nabla}_{l_{||}} \delta_{k_1, k_2 - l_{||}} \right] \\ &\times \left[\delta_{k_3, k_4 + l_{||}} \vec{d}_{k_3 k_4}^{\lambda_3 \lambda_4} \cdot \vec{\xi}_{l\sigma} - ie \delta^{\lambda_3 \lambda_4} \vec{\xi}_{l\sigma} \cdot \vec{\nabla}_{l_{||}} \delta_{k_3, k_4 + l_{||}} \right] |f(l_z)|^2 \quad (2.45) \end{aligned}$$

In Analogie kann man hier davon sprechen, daß zwei Dipole (zusammengesetzt aus Inter- und Intrabanddipol), skalar multipliziert mit dem Polarisationsvektor des impulsübertragenden Photons, miteinander multipliziert werden. Ist man nur an den Interbandübergängen interessiert, so vereinfacht sich Glg. (2.45) zu

$$\begin{aligned} \Gamma(1234) &= 2\pi \delta_{k_1 + k_3, k_2 + k_4} \\ &\times \sum_{l_z \sigma} \vec{d}_{k_1 k_2}^{\lambda_1 \lambda_2} \cdot \vec{\xi}_{k_2 - k_1, l_z \sigma} \vec{d}_{k_3 k_4}^{\lambda_3 \lambda_4} \cdot \vec{\xi}_{k_3 - k_4, l_z \sigma}. \quad (2.46) \end{aligned}$$

2.1.3.5 Unordnung

Das Modell für die Unordnung soll darin bestehen, daß die Ausdehnung des Quantenfilmes in z-Richtung in gewissen Grenzen um eine mittlere Kantenlänge L_z schwanken kann. Die Annahme unendlich hoher Barrieren für den Quantentopf führt jedoch zu einem Fehler in den Energien der Subbänder, deren energetischer Abstand damit größer ist als bei einer endlichen tiefen Struktur. Im Fall von GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As werden damit die zugehörigen Energiefluktuationen um ungefähr 30% unter Voraussetzung eines $L_z = 30nm$ breiten Quantenfilmes überschätzt[30].

Die zu den Quantenfilmfluktuationen zugehörige Korrelation im Ortsraum wird als gaußförmige angesetzt.

$$\langle \delta L_z(\vec{r}_{||}) \delta L_z(\vec{r}'_{||}) \rangle = \alpha^2 e^{-|\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||}|^2 / \beta^2}$$

Andererseits sind die Energien in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden durch

$$E_\lambda(\vec{r}_{||}) = \frac{\pi^2 \hbar^2 k_z^2}{2L_z^2(\vec{r}_{||}) \cdot m_\lambda}$$

gegeben. Die zu den Längenfluktuationen δL_z korrespondierenden Energieschwankungen lauten bei Beschränkung auf das unterste Subband $k_z = 1$

$$\delta E_\lambda(\vec{r}_{||}) = -\frac{\pi^2 \hbar^2 \delta L(\vec{r}_{||})}{L_z^3 \cdot m_\lambda}.$$

⁴Der Gradient in den Intrabandanteilen wirkt wiederum auf die Deltafunktion.

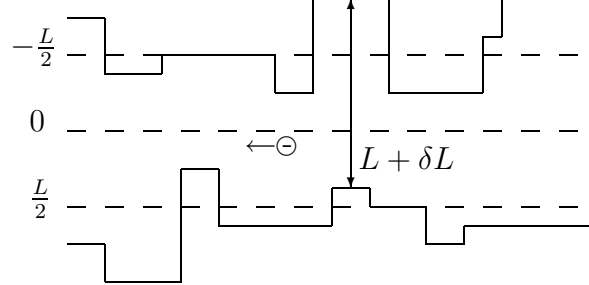


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Fluktuationen δL der Dicke eines Quantenfilms in Wachstumsrichtung. Die Dicke schwankt dabei um einen mittleren Wert L .

Der Index λ steht für die effektiven Massen in den unterschiedlichen Bändern in z -Richtung. Im Normalfall wird diese von der Masse in der Quantenfilmebene abweichen. Als Streupotential wird nun

$$U_{IFR}^\lambda(\vec{r}_{||}) = -\delta E_\lambda(\vec{r}_{||}) = \frac{\pi^2 \hbar^2 \delta L(\vec{r}_{||})}{L_z^3 \cdot m_\lambda} \quad (2.47)$$

eingeführt. Damit ist das Matrixelement $\langle 1 | U_{IFR}^\lambda(\vec{r}_{||}) | 2 \rangle$ zu bestimmen. Mit einer Mittelung über die Länge einer Elementarzelle und $U_{IFR}^\lambda(\vec{r}_{||}) = \sum_{\vec{q}_{||}} e^{i\vec{q}_{||} \cdot \vec{r}_{||}} U_{\vec{q}_{||}, \lambda}^{IFR}$ erhält man für das Matrixelement

$$\langle 1 | U_{IFR}^\lambda(\vec{r}_{||}) | 2 \rangle = \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}, \lambda}^{IFR} \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 + \vec{q}}^{\lambda_1 \lambda_2}$$

Mit dieser Mittelung geht die Annahme einher, daß die Dickschwankungen innerhalb einer Elementarzelle vernachlässigbar sind. Als Streuanteil im Hamiltonian ergibt sich so

$$H_{IFR} = \sum_{q_{||}, k_{||}, \lambda} U_{q_{||}, \lambda}^{IFR} c_{k_{||} + q_{||}, \lambda}^\dagger c_{k_{||}, \lambda}, \quad (2.48)$$

wobei

$$U_{q_{||}, \lambda}^{IFR} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L_z^3 \cdot m_\lambda} \int d^2 r e^{-i\vec{q}_{||} \cdot \vec{r}_{||}} \delta L(\vec{r}_{||}) \quad (2.49)$$

ist. Deutlich ist sofort die formale Analogie zum Elektron-Phonon Hamiltonian.

Die für die späteren Rechnungen wichtige Korrelation $\langle U_{\vec{q}_{||}, \lambda}^{IFR} U_{\vec{q}'_{||}, \lambda'}^{IFR} \rangle$ kann durch eine doppelte Fouriertransformation gewonnen werden. Ausgangspunkt ist dabei Gleichung (2.47).

$$\delta L(\vec{r}_{||}) = \frac{L_z^3 \cdot m_\lambda}{\pi^2 \hbar^2} U_{IFR}^\lambda(\vec{r}_{||})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \delta L(\vec{r}_{||}) \delta L(\vec{r}'_{||}) \rangle &= \gamma_\lambda \gamma_{\lambda'} \left\langle \sum_{\vec{q}_{||}, \vec{q}'_{||}} U_{\vec{q}_{||}, \lambda}^{IFR} U_{\vec{q}'_{||}, \lambda'}^{IFR} e^{i(\vec{q}_{||} \cdot \vec{r}_{||} + \vec{q}'_{||} \cdot \vec{r}'_{||})} \right\rangle \\ &= \alpha^2 e^{(\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||})^2 / \beta^2} \end{aligned}$$

mit

$$\gamma_\lambda = \frac{L^3 \cdot m_\lambda}{\pi^2 \hbar^2}$$

Die doppelte Fouriertransformation von

$$\frac{1}{A^2} \int d^2 r d^2 r' \alpha^2 e^{-(\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||})^2 / \beta^2} e^{-i(\vec{q}_{||} \cdot \vec{r}_{||} + \vec{q}'_{||} \cdot \vec{r}'_{||})} = \frac{\alpha^2 \beta^2 \pi}{A} e^{-q_{||}^2 \beta^2 / 4} \delta_{-\vec{q}_{||}, \vec{q}'_{||}}$$

muß dabei

$$\gamma_\lambda \gamma_{\lambda'} \left\langle U_{\vec{q}_{||}, \lambda}^{IFR} U_{\vec{q}'_{||}, \lambda'}^{IFR} \right\rangle$$

entsprechen. Man bekommt so für die gesuchte Korrelationsfunktion

$$\left\langle U_{\vec{q}_{||}, \lambda}^{IFR} U_{\vec{q}'_{||}, \lambda'}^{IFR} \right\rangle = \frac{\pi^5 \hbar^4}{L_z^6 \cdot m_\lambda m_{\lambda'}} \frac{\alpha^2 \beta^2}{A} e^{-q_{||}^2 \beta^2 / 4} \delta_{-\vec{q}_{||}, \vec{q}'_{||}}. \quad (2.50)$$

Im Folgenden wird definiert:

$$U_{12}(\vec{q}\lambda) := U(\vec{q}\lambda) \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 + \vec{q}}^{\lambda_1 \lambda_2} \delta^{\lambda \lambda_1} \quad (2.51)$$

2.1.3.6 Symmetrien

Nachdem die explizite Form der Matrixelemente bekannt ist, verbleibt nun als Aufgabe die Bestimmung der Symmetrieeigenschaften. Dies geschieht durch Betrachtung der konjugiert komplexen Größen in den Glg. (2.24)-(2.27) bzw. Glg. (2.32), (2.40), (2.43), (2.45) und (2.49).

$$\Gamma(1234) = \Gamma(3412) = \Gamma^*(4321) \quad (2.52)$$

$$V(1234) = V(2143) = V^*(4321) \quad (2.53)$$

$$D_{12}(\vec{q}\lambda) = D_{21}^*(-\vec{q}\lambda) \quad (2.54)$$

$$F_{12}(\vec{k}\sigma) = -F_{21}^*(-\vec{k}\sigma) \quad (2.55)$$

$$U_{12}(\vec{q}\lambda) = U_{21}^*(-\vec{q}\lambda) \quad (2.56)$$

$$D_\lambda(\vec{q}\lambda) = D_\lambda^*(-\vec{q}\lambda) \quad (2.57)$$

$$F(\vec{k}\sigma) = F(-\vec{k}\sigma) = -F^*(\vec{k}\sigma) \quad (2.58)$$

$$\overline{W}(1234) = W(1234) - W(2134) \quad (2.59)$$

$$W(1234) = W^*(4321) \quad (2.60)$$

$$\overline{W}(1234) = \overline{W}(2143) = -\overline{W}(2134) = -\overline{W}(1243) = \overline{W}^*(4321) \quad (2.61)$$

2.2 Die Bewegungsgleichungen – Hierarchieproblem und Korrelationsentwicklungen

Mit Kenntnis der Matrixelemente müssen nun die Bewegungsgleichungen der relevanten Größen aufgestellt werden. Dies geschieht mit Hilfe der Heisenberg Bewegungsgleichung

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{O} = [H, \mathcal{O}]. \quad (2.62)$$

Die anschließende Bildung der quantenmechanischen Erwartungswerte führt zu einem wohlbekannten Problem: Einer Hierarchie von gekoppelten Gleichungen!

$$\begin{aligned} c^\dagger c &\rightarrow c^\dagger c^\dagger c c \\ c^\dagger c^\dagger c c &\rightarrow c^\dagger c^\dagger c^\dagger c c c \\ c^\dagger c^\dagger c^\dagger c c c &\rightarrow c^\dagger c^\dagger c^\dagger c^\dagger c c c c \\ &\vdots \end{aligned}$$

Dabei taucht das Problem auf, daß die höheren Korrelationen dennoch sehr große Beiträge zu den Gleichungen liefern können. Aus diesem Grund geht man dazu über, die Korrelationen mittels folgender Vorschrift zu faktorisieren.

$$\begin{aligned} \langle \prod_s^u a_s^+ \prod_r^u a_r \rangle &= \sum_{m=0}^u \sum_{all} \kappa^P \prod^m \gamma(n, m) \Gamma_{u-m}(n', m') \\ \gamma_u(n, m) &= \langle a_{n_1}^+ \dots a_{m_u} \rangle \\ \Gamma_{u-m}(n, m) &= \langle a_{n'_1}^+ \dots a_{m'_u} \rangle^c \end{aligned}$$

Diese Faktorisierungsregel für rein elektronische Systeme[21] wird dazu auf verschiedene Teilchenarten erweitert (vgl. Anhang C.2.1). Sie kann mit dem erweiterten Dichteoperatorformalismus oder der Theorie der Green'schen Funktionen bewiesen werden. Die Faktorisierung ist äquivalent zu einer Clusterzerlegung mit anschließender Ordnung nach Selbstenergien. Der Index c kennzeichnet in dieser Notation die Korrekturen zu den faktorisierten Anteilen. κ^P steht für das Vorzeichen entsprechend einer geraden oder ungeraden Permutation der Operatoren a_{n_i}

Bei dieser Faktorisierung hofft man, daß die Beiträge der Korrekturen sukzessiv kleiner werden und man diese ab einer gewissen Ordnung nicht mehr berücksichtigen muß. Sichergestellt ist zunächst einmal, daß die zugehörigen Energienormierungen kleiner werden, wie schnell die dabei entstehende Summe jedoch konvergiert, ist völlig unklar.

Anschließend werden die Bewegungsgleichungen für die Korrekturen mit Hilfe der Bewegungsgleichungen der vollen Korrelationen und der faktorisierten Anteile bestimmt. Für die Faktorisierung

$$\langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle = \langle \mathcal{A} \rangle \langle \mathcal{B} \rangle + \langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle^c$$

würde dies dem Auflösen nach $\frac{d}{dt} \langle \mathcal{AB} \rangle^c$ gemäß

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{AB} \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \mathcal{A} \rangle \right) \langle \mathcal{B} \rangle + \langle \mathcal{A} \rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \mathcal{B} \rangle \right) + \frac{d}{dt} \langle \mathcal{AB} \rangle^c \quad (2.63)$$

entsprechen.

Bevor jedoch die Gleichungen für die Korrekturen betrachtet werden, müssen zunächst einmal notwendige Verknüpfungen und Rechenregeln eingeführt werden. Verwendung finden die Tensor- (\odot) und die gewöhnliche Matrixmultiplikation⁵ (\cdot) als dessen Grenzfall, die wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned} A_{(2)} \odot B_{(4)} &= \sum_k A_1^k B_{k2}^{34} + A_2^k B_{k1}^{43} \\ B_{(4)} \odot A_{(2)} &= \sum_k B_{21}^{4k} A_k^3 + B_{12}^{3k} A_k^4 \end{aligned} \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} B_{(4)}^+ &= (B^*)_{43}^{21} \\ A \cdot B &= (A \cdot B)_{12} = \sum_k A_{1k} B_{k2} \end{aligned} \quad (2.65)$$

$$A^+ = A_{12}^+ = A_{21}^* \quad (2.66)$$

Damit gilt

$$(A_{(2)} \odot B_{(4)})^+ = B_{(4)}^+ \odot A_{(2)}^+ \quad (2.67)$$

$$(A \cdot B)^+ = B^+ \cdot A^+ \quad (2.68)$$

Um Zweideutigkeiten zu vermeiden, werden dort, wo es nötig ist, die Tensoren zweiter bzw. vierter Stufe⁶ mit einem Index $_{((2)/(4))}$ gekennzeichnet. Weiterhin wird ein Analogon zum Kronecker- δ benötigt, welches über den „Delta-Tensor“ $\delta_{(2)}$ bzw. $\delta_{(4)}$ einführt wird. Dieser Tensor reduziert sich bei Anwendung von Glg. (2.64) auf die bekannten Kronecker- δ gemäß:

$$\begin{aligned} \delta_{(2)} \odot B_{(4)} &= \sum_k \delta_{1,k} B_{k2}^{34} + \delta_{2,k} B_{k1}^{43} \\ A_{(2)} \odot \delta_{(4)} &= \sum_k A_1^k \delta_{k,4} \delta_{2,3} + A_2^k \delta_{k,3} \delta_{1,4} \end{aligned} \quad (2.69)$$

⁵Die Notationen für die Matrizen σ_{12} ist dabei äquivalent zu σ_1^2 . Die Kombination aus hoch- und tiefgestelltem Index soll nur die bei Tensoren übliche Kombination von kontra- und kovarianten Vektoren verdeutlichen, als welche die einzelnen Operatoren aufgefaßt werden können. Im Folgenden werden insbesondere bei 2-Operator Termen beide Schreibweisen gleichermaßen benutzt.

⁶Im strengen Sinne sind die elektronischen Korrelationen und damit auch die zugehörigen Korrekturen sehr viel höherer Ordnung (zwei- bzw. dreidimensionale Impulse, Band- und Spinindizes), welche sich in dieser Darstellung allerdings auf eine niedrigere Stufe vereinfachen lassen.

Mit diesen Rechenvorschriften⁷ erhält man die folgenden Gleichungen für die Korrekturen der elektronischen Korrelationen $\sigma_1^2 = \langle c_1^\dagger c_2 \rangle$ und $\sigma_{12}^{34} = \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{(2)} = \omega \cdot \sigma_{(2)} - \sigma_{(2)} \cdot \omega + X - X^+ \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{(4)}^c &= \omega \odot \sigma_{(4)}^c - \sigma_{(4)}^c \odot \omega + \sigma_{(2)} \odot \Omega - \Omega^+ \odot \sigma_{(2)} \\ &- \frac{1}{2} (\delta_{(2)} \odot \Omega - \Omega^+ \odot \delta_{(2)}) + W - W^+. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Man erkennt, daß beide Korrelationen mit der gleichen generalisierten Energie

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \epsilon_1 \delta_{12} + \sum_{q\lambda} U_{21}(q\lambda) \\ &+ \sum_{56} \bar{W}(5216) \sigma_{52} + \sum_6 \Gamma(2661) \\ &+ \sum_{q\lambda} D_{21}(q\lambda) \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \\ &+ \sum_{q\nu} F_{21}(q\nu) \langle a_{-q\nu}^\dagger - a_{q\nu} \rangle \end{aligned} \quad (2.72)$$

in der komplexen Ebene rotieren. Diese generalisierte Energie enthält dabei sowohl reelle (Energienormierungen der Einteilchenenergien ϵ_k) wie auch imaginäre Anteile (Lebensdauer der Quasiteilchen). Dabei modifiziert das lokale Unordnungspotential bzw. dessen Fouriertransformierte $\sum_{q\lambda} U_{21}(q\lambda)$ und die Dipol-Dipol Wechselwirkung $\sum_6 \Gamma(2661)$ direkt die Energien der Einteilchenzustände. Der Anteil der Coulombwechselwirkung $\sum_{56} \bar{W}(5216) \sigma_{52}$ ist dagegen dichteabhängig und wird mit zunehmender Dichte immer wichtiger. Letztendlich kommen noch Beiträge aus den Feldern der Gitterschwingungen $\langle b_{q\lambda} \rangle$ und des Lichtfeldes $\langle a_{q\nu} \rangle$ hinzu. Alle Anteile in der generalisierten Energie stammen aus den faktorisierten Anteilen in den Bewegungsgleichungen und sind daher bereits aus den Halbleiter-Blochgleichungen bekannt.

Die kohärenten Phononen $\langle b_\alpha \rangle$ und Photonen $\langle a_\alpha \rangle$ entwickeln sich gemäß

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_\alpha \rangle = -\hbar \omega_\alpha \langle b_\alpha \rangle - \sum_{12} D_{12}(\alpha) \sigma_{12} \quad (2.73)$$

und

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_\alpha \rangle = -\hbar \Omega_\alpha \langle a_\alpha \rangle - \sum_{12} F_{12}(\alpha) \sigma_{12}. \quad (2.74)$$

⁷Man beachte, daß gilt: $\sigma_{12} = \sigma_{12}^c$.

Die Treiberterme sind ausschließlich durch 2-Operator Dichtematrizen gegeben. Andererseits sind die kohärenten Phononen und Photonen direkt mit den Gitterverzerrungen des Kristalls (Glg. (2.11)) und dem kohärenten Lichtfeld (Glg. (2.14) und (2.15)) korreliert. Letztere werden daher direkt durch die Intra- und Interbanddichten bestimmt.

Die zugehörigen Korrekturen zu den elektronischen Korrelationen sind im Treiberterm der 2-Operator Dichtematrix, Glg. (2.70),

$$\begin{aligned}
X = X_1^2 &= \sum_{345} W(3451)\sigma_{34}^{c52} \\
&+ \sum_{3q\lambda} D_{31}(q\lambda) \left\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{32} \right\rangle^c \\
&+ \sum_{3q\lambda} F_{31}(q\lambda) \left\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{32} \right\rangle^c
\end{aligned} \tag{2.75}$$

und der 4-Operator Dichtematrix, Glg. (2.71),

$$\begin{aligned}
W = W_{12}^{34} &= \sum_{567} W(4567)\sigma_{125}^{c367} \\
&+ \sum_{5q\lambda} D_{51}(q\lambda) \left\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{5234} \right\rangle^c \\
&+ \sum_{5q\nu} F_{51}(q\nu) \left\langle (a_{-q\nu}^\dagger - a_{q\nu})\hat{\sigma}_{5234} \right\rangle^c
\end{aligned} \tag{2.76}$$

enthalten. Es ist sofort erkennbar, wie die Kopplung an höhere Korrelationen erfolgt. Sie findet sowohl über die Coulombwechselwirkung $W(1234)\sigma^c$, welche die nächsthöhere rein elektronische Korrektur beinhaltet, wie auch über die Elektron-Phonon bzw. Elektron-Photon Wechselwirkung durch phonon- bzw. photonassiierte Größen, $\langle b_{q\lambda}\hat{\sigma} \rangle^c$ bzw. $\langle a_{q\lambda}\hat{\sigma} \rangle^c$, statt. Man beachte, daß formal die beiden Treiberterme identisch wären, wenn man nur die entsprechenden elektronischen Erwartungswerte um ein Elektron-Erzeuger/Vernichterpaar erweitern würde! Für die verbleibende Größe

$$\begin{aligned}
\Omega = \Omega_{12}^{34} &= \sum_{56} [\overline{W}(5612)\sigma_{54}\sigma_{63} + W(5612)\sigma_{5634} \\
&\quad + \overline{W}(4561)\sigma_{2536}^c + \overline{W}(5361)\sigma_{2546}^c] \\
&+ \sum_{q\lambda} [D_{31}(q\lambda) \left\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{24} \right\rangle^c \\
&\quad + D_{41}(q\lambda) \left\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{23} \right\rangle^c] \\
&+ \sum_{q\nu} [F_{31}(q\nu) \left\langle (a_{-q\nu}^\dagger - a_{q\nu})\hat{\sigma}_{24} \right\rangle^c \\
&\quad + F_{41}(q\nu) \left\langle (a_{-q\nu}^\dagger - a_{q\nu})\hat{\sigma}_{23} \right\rangle^c]
\end{aligned} \tag{2.77}$$

soll der Begriff generalisiertes Coulombfeld eingeführt werden. Der Begriff wird aus mehreren Gründen so gewählt. Zum einen liefert die Coulombwechselwirkung den Hauptanteil mit faktorisierten Beiträgen *und* Korrekturen, während die Elektron-Phonon und Elektron-Photon Wechselwirkung nur über die assistierten Größen beitragen. Der zweite Grund liegt in der Struktur der Bewegungsgleichung (2.71). Berücksichtigt man, daß in den 4-Operator Korrekturen jeweils 4 Operatoren vorkommen und so der Faktor 0.5 vor dem δ zustandekommt, so ist die vereinfachte formale Gestalt von der Form $(\delta - 2\sigma_{(2)})\Omega$. Dieser ist formal identisch mit dem Term in der Polarisationsgleichung der Halbleiter-Blochgleichungen, welcher Phasenraumeffekte beschreibt! Es liegt die Vermutung nahe, daß hier der entsprechende Beitrag vorliegt. Allerdings handelt es sich nun um Effekte höherer Ordnung, was auch sofort durch die Anzahl der beteiligten Operatoren in den Erwartungswerten deutlich wird.

Desweiteren fallen zwei Dinge in den Bewegungsgleichungen der Dichtematrizen, Glg. (2.70) und (2.71), auf:

- Zum einen lassen sich beide Gleichungen vollständig symmetrisch formulieren. Dies ist eine Konsequenz der Hermitizität in den Dichtematrizen $\sigma_{(2)}$ bzw. $\sigma_{(4)}$.
- Da die Dichtematrizen hermitisch sind, d.h. $\sigma_{(2)}^+ = \sigma_{(2)}$ bzw. $\sigma_{(4)}^+ = \sigma_{(4)}$, koppeln sie durch das „i“ in der Bewegungsgleichung allerdings an Terme, welche antihermitisch sind, also $A^+ = -A$, welche wiederum durch hermitische Terme getrieben werden usw..

Die naheliegenste Möglichkeit, die nächsthöheren Korrelationen zu beschreiben, liegt also darin, die Bewegungsgleichungen für die hermitischen und antihermitischen Größen zu herzuleiten. Dies würde in jedem Fall die Wahrung der Symmetrie der Gleichungen garantieren. Da sich aber nun jeder (anti)hermitische Operator \tilde{A} in der Form $\tilde{A} = A + A^+$ ($\tilde{A} = A - A^+$) schreiben läßt, kann man alternativ auch die Bewegungsgleichungen für A aufstellen, welcher in dem hier vorliegenden Fall unter anderem durch die assistierten Größen gegeben ist. Diese sind *nicht* hermitisch und deshalb sind deren Bewegungsgleichungen auch nicht in vollständig symmetrischer Schreibweise formulierbar. Dennoch hat es sich herausgestellt, daß die Gleichungen der assistierten Größen bis auf die Treiberterme durch eine einfache Vorschrift erhalten werden können. Dazu wird die folgende Abbildung definiert:

$$\gamma_x(\sigma_1, \dots, \sigma_n) = \gamma_x\left(\prod_{i=1}^n \sigma_i\right) = \sum_{i=1}^n \gamma_x(\sigma_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \sigma_j \quad (2.78)$$

$$\gamma_x(\sigma_i) = \gamma_x(\langle \hat{\sigma} \rangle_i) = \langle \hat{\sigma} x \rangle_i^c \quad (2.79)$$

$$\gamma_x(a \cdot \sigma) = a \cdot \gamma_x(\sigma) \quad \text{a kein Erwartungswert, sondern Zahl} \quad (2.80)$$

$$\gamma_x(a) = 0 \quad (2.81)$$

$$\gamma(\sigma_1 \pm \sigma_2) = \gamma(\sigma_1) \pm \gamma(\sigma_2). \quad (2.82)$$

Die σ_i stehen dabei für beliebige quantenmechanische Erwartungswerte, während x den jeweilige Phononen- (b_α) oder Photonenvernichter⁸ (a_α) kennzeichnet, mit dem die Größe assistiert werden soll. Enthält das Argument der Abbildung keinen quantenmechanischen Erwartungswert, so ergibt sie Null. Mit Hilfe dieser Abbildung schreiben sich die Bewegungsgleichungen für die assistierten Größen wie folgt:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \gamma_{a_\alpha}(\sigma_{(2)}) &= \gamma_{a_\alpha}(\omega \cdot \sigma_{(2)}) - \gamma_{a_\alpha}(\sigma_{(2)} \cdot \omega) \\ &+ \gamma_{a_\alpha}(X - X^+) + Y_{phot}(\alpha) \end{aligned} \quad (2.83)$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \gamma_{a_\alpha}(\sigma_{(4)}^c) &= \gamma_{a_\alpha}(\omega \odot \sigma_{(4)}^c) - \gamma_{a_\alpha}(\sigma_{(4)}^c \odot \omega) \\ &+ \gamma_{a_\alpha}(\sigma_{(2)} \odot \Omega - \Omega^+ \odot \sigma_{(2)}) \\ &- \gamma_{a_\alpha}\left(\frac{1}{2}(\delta_{(2)} \odot \Omega - \Omega^+ \odot \delta_{(2)})\right) \\ &+ \gamma_{a_\alpha}(W - W^+) + Z_{phot}(\alpha). \end{aligned} \quad (2.84)$$

Die Quellterme Y und Z sind gegeben durch:

$$Y_{phot}(\alpha) = - \sum_{34} F_{34}(-\alpha) [\sigma_{14} \delta_{23} - \sigma_{14} \sigma_{32} - \sigma_{1324}] \quad (2.85)$$

und

$$\begin{aligned} Z_{phot}(\alpha) &= - \sum_{56} F_{56}(-\alpha) [\sigma_{1236}^c \delta_{45} - \sigma_{1246}^c \delta_{35} + \sigma_{125346}^c \\ &+ \sigma_{16} \sigma_{2534}^c - \sigma_{26} \sigma_{1534}^c \\ &+ \sigma_{53} \sigma_{1246}^c - \sigma_{54} \sigma_{1236}^c] \end{aligned} \quad (2.86)$$

Es ist sofort ersichtlich, daß die Ankopplung der assistierten Größen über die Matrixelemente der entsprechenden Wechselwirkung geschieht. In diesen Termen ist auch die oben erwähnte Symmetriebrechung in Form der nächsthöheren elektronischen Korrelation zu sehen, welche sich nicht in eine symmetrische Schreibweise bringen läßt. Analog sind die assistierten Gleichungen für die phononenassistierten Größen gegeben. Dabei ändern sich in den Quelltermen, Glg. (2.85) und (2.86), lediglich die entsprechenden Matrixelemente, d.h. es ist nur $F(-\alpha)$ durch $D(-\alpha)$ zu ersetzen. Die ausgeschriebenen Gleichungen sind in Anhang C.2.2 zu finden.

⁸Diese Vorschrift gilt nur für den Vernichtungsoperator! Wird die entsprechende assistierte Größe für den Erzeuger benötigt, kann sie durch den konjugiert komplexen Term und Umindizierung gewonnen werden.

Wertet man $\gamma_{b_\alpha}(\omega \odot \sigma)$ bzw. $\gamma_{a_\alpha}(\omega \odot \sigma)$ in den Gleichungen (2.83) und (2.84) aus, so tauchen weitere wichtige Korrelationen auf. Sie beschreiben Phononen(Photonen)dichten

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle^c &= (\hbar\omega_{m\mu} - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle^c \\ &- \sum_{12} [D_{12}(-l\nu) \langle b_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle^c - D_{12}(m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \end{aligned} \quad (2.87)$$

bzw.

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu}^\dagger a_{l\nu} \rangle^c &= (\hbar\Omega_{m\mu} - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu}^\dagger a_{l\nu} \rangle^c \\ &- \sum_{12} [F_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + F_{12}(m\mu) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \end{aligned} \quad (2.88)$$

und -kohärenzen

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{m\mu} b_{l\nu} \rangle^c &= -(\hbar\omega_{m\mu} + \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{m\mu} b_{l\nu} \rangle^c \\ &- \sum_{12} [D_{12}(-l\nu) \langle b_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + D_{12}(-m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \end{aligned} \quad (2.89)$$

bzw.

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu} a_{l\nu} \rangle^c &= -(\hbar\Omega_{m\mu} + \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu} a_{l\nu} \rangle^c \\ &- \sum_{12} [F_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + F_{12}(-m\mu) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c]. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Getrieben werden diese Terme von den entsprechenden assistierten 2-Operator Dichtematrizen.

Neben diesen Korrelation tauchen noch weitere in den Gleichungen (2.83) und (2.84) auf. Diese enthalten aber assistierte Größen mit mindestens zwei Phononen- oder Photoneneratoren bzw. gemischte Anteile. Die damit verbundenen Prozesse sollen im Weiteren nicht interessieren, so daß darauf verzichtet wird, die Bewegungsgleichungen für diese, ebenso wie für die restlichen Korrelation höherer Ordnung, anzugeben.

2.2.1 Der Grenzfall niedriger Anregungsintensitäten

Zunächst einmal erfolgt eine Einschränkung der allgemeinen Gleichungen aus Abschnitt 2.2, welche ja noch für den Multibandfall gelten, auf das Zweibandmodell. Es werden damit nur ein Valenz- v und Leitungsband c berücksichtigt. Die erhaltenen, sehr komplexen Gleichungen werden nun auf den Grenzfall niedriger Anregungsintensitäten vereinfacht. Dazu wird eine Entwicklung im externen

Feld durchgeführt, wobei nur Anteile bis zur zweiten Ordnung berücksichtigt werden. Ebenfalls werden nichtresonante Anteile im Rahmen einer „Rotating Wave Approximation“ vernachlässigt. In diesen Gleichungen werden nun alle Größen, welche einen Exzitonenoperator

$$B_{Q\nu}^\dagger = \sum_q \Psi_\nu \left(q - \frac{m_c}{M} Q \right) c_q^\dagger v_{q-Q} \quad (2.91)$$

enthalten, nach Exzitonen-Wellenfunktionen entwickelt. Der Exzitonenoperator $B_{Q\nu}^\dagger$ beschreibt in dieser Notation die Erzeugung eines Exzitons mit Schwerpunktsimpuls Q im Zustand ν . Mit Hilfe der folgenden Definitionen

$$\begin{aligned} \langle v_{k_1}^\dagger c_{k_2} \rangle &= \sum_\nu \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}_1) \Psi_\nu(\vec{q}_2) \\ \langle a_\lambda^\dagger v_{k_1}^\dagger c_{k_2} \rangle^c &= \sum_\nu \mathcal{S}_\nu^\lambda(\vec{Q}_1) \Psi_\nu(\vec{q}_2) \\ \langle b_\lambda v_{k_1}^\dagger c_{k_2} \rangle^c &= \sum_\nu \mathcal{T}_\nu^\lambda(\vec{Q}_1) \Psi_\nu(\vec{q}_2) \\ \langle b_\lambda^\dagger v_{k_1}^\dagger c_{k_2} \rangle^c &= \sum_\nu \overline{\mathcal{T}}_\nu^\lambda(\vec{Q}_1) \Psi_\nu(\vec{q}_2) \\ \langle c_{k_1}^\dagger v_{k_2} v_{k_3}^\dagger c_{k_4} \rangle^c &= \sum_{\nu\mu} \mathcal{N}_{\nu\mu}(-\vec{Q}_1, \vec{Q}_2) \Psi_\nu^*(\vec{q} - \vec{q}_1) \Psi_\mu(\vec{q}_2) \\ \langle b_\lambda c_{k_1}^\dagger v_{k_2} v_{k_3}^\dagger c_{k_4} \rangle^c &= \sum_{\nu\mu} \mathcal{B}_{\nu\mu}^\lambda(-\vec{Q}_1, \vec{Q}_2) \Psi_\nu^*(\vec{q} - \vec{q}_1) \Psi_\mu(\vec{q}_2) \\ \langle a_{\alpha\sigma}^\dagger a_{\beta\sigma'} \rangle^c &= M_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} \\ \langle a_{\alpha\sigma} \rangle &= m_\alpha^\sigma \end{aligned} \quad (2.92)$$

wobei

$$\vec{Q}_1 = \vec{k}_2 - \vec{k}_1 \quad (2.93)$$

$$\vec{Q}_2 = \vec{k}_4 - \vec{k}_3 \quad (2.94)$$

$$\vec{q}_1 = \frac{m_e^{xy}}{M} k_1 + \frac{m_h^{xy}}{M} k_2 \quad (2.95)$$

$$\vec{q}_2 = \frac{m_e^{xy}}{M} k_3 + \frac{m_h^{xy}}{M} k_4 \quad (2.96)$$

$$\vec{q} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 \quad (2.97)$$

gilt, werden die Entwicklungskoeffizienten der einzelnen Größen eingeführt. Während die Koeffizienten die Schwerpunktsdynamik eines Elektron-Lochpaares mit Impuls \vec{Q} beschreiben, ist die Informationen über die Relativbewegung mit den entsprechenden Impulsen \vec{q} in den Lösungen $\Psi_\nu(\vec{q})$ der Wanniergleichung

$$-\frac{\hbar^2 q^2}{2m_r} \Psi_\lambda(q) + \sum_k V(k) \Psi_\lambda(k+q) = -\epsilon_\lambda \Psi_\lambda(q), \quad (2.98)$$

enthalten. Die resultierenden Gleichungen lauten dann:

$$\begin{aligned}
-i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{S}_\nu^{l\sigma}(Q) &= -\left[\frac{\hbar^2Q^2}{2M} - \hbar\Omega_{l\sigma} + \epsilon_\nu + E_{\text{gap}}\right]\mathcal{S}_\nu^{l\sigma}(Q) \\
&\quad -i\sum_\lambda\Psi_\lambda^*(r=0)\mathcal{N}_{\lambda\nu}(l_\parallel, Q) \\
&\quad -\sum_{k\mu}\mathcal{S}_\mu(Q-k)U_{exz}^{\nu\mu}(k) \\
&\quad +i\sum_{q_z\mu}F(-Q, -q_z, \mu)\Psi_\nu^*(r=0)M_{l,(Q,q_z)}^{\sigma\mu} \quad (2.99)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{T}_\nu^\beta(Q) &= -\left[\frac{\hbar^2Q^2}{2M} + \hbar\omega_\beta + \epsilon_\nu + E_{\text{gap}}\right]\mathcal{T}_\nu^\beta(Q) \\
&\quad -\sum_{k\mu}\mathcal{T}_\mu(Q-k)U_{exz}^{\nu\mu}(k) \\
&\quad -(1+n_\beta)\sum_\lambda D_{\text{exz}}^{\nu\lambda}(-\beta)\mathcal{P}_\lambda(Q+\beta_\parallel) \quad (2.100)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar\frac{d}{dt}\overline{\mathcal{T}}_\nu^\beta(Q) &= -\left[\frac{\hbar^2Q^2}{2M} - \hbar\omega_\beta + \epsilon_\nu + E_{\text{gap}}\right]\overline{\mathcal{T}}_\nu^\beta(Q) \\
&\quad -\sum_{k\mu}\overline{\mathcal{T}}_\mu(Q-k)U_{exz}^{\nu\mu}(k) \\
&\quad -n_\beta\sum_\lambda D_{\text{exz}}^{\nu\lambda}(\beta)\mathcal{P}_\lambda(Q-\beta_\parallel) \quad (2.101)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{N}_{\nu\nu'}(Q, Q') &= -\left[\frac{\hbar^2}{2M}(Q'^2 - Q^2) + \epsilon_{\nu'} - \epsilon_\nu\right]\mathcal{N}_{\nu\nu'}(Q, Q') \\
&\quad +\sum_{\beta\lambda}\left\{D_{\text{exz}}^{\lambda\nu}(\beta)\left[\mathcal{P}_\lambda^*(Q+\beta_\parallel)\left(\overline{\mathcal{T}}_{\nu'}^{-\beta}(Q') + \mathcal{T}_{\nu'}^\beta(Q')\right)\right.\right. \\
&\quad\quad\quad\left.+\mathcal{B}_{\lambda\nu'}^{-\beta}(Q+\beta_\parallel, Q') + \mathcal{B}_{\nu'\lambda}^\beta(Q', Q+\beta_\parallel)\right] \\
&\quad\quad\quad -D_{\text{exz}}^{\nu'\lambda}(\beta)\left[\mathcal{P}_\lambda(Q'-\beta_\parallel)\left(\overline{\mathcal{T}}_\nu^{-\beta^*}(Q) + \mathcal{T}_\nu^{\beta^*}(Q)\right)\right. \\
&\quad\quad\quad\left.-\mathcal{B}_{\nu\lambda}^{-\beta}(Q, Q'-\beta_\parallel) + \mathcal{B}_{\lambda\nu}^\beta(Q', -\beta_\parallel, Q)\right]\left.\right\} \\
&\quad +\sum_{k\mu}\left[\mathcal{N}_{\mu\nu'}(Q+k, Q')U_{exz}^{\mu\nu}(k) - \mathcal{N}_{\nu\mu}(Q, Q'-k)U_{exz}^{\nu\mu}(k)\right] \\
&\quad +i\sum_{q_z\sigma}\left[F(-Q, q_z, \sigma)\Psi_\nu(r=0)\mathcal{S}_\nu^{Q, q_z, \sigma}(Q')\right. \\
&\quad\quad\quad\left.+F^*(Q', q_z, \sigma)\Psi_\nu^*(r=0)\mathcal{S}_\nu^{Q', q_z, \sigma^*}(Q)\right] \quad (2.102)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{B}_{\nu\nu'}^\alpha(Q, Q') &= - \left[\frac{\hbar^2}{2M} (Q'^2 - Q^2) + \epsilon_{\nu'} - \epsilon_\nu + \hbar\omega_\alpha \right] \mathcal{B}_{\nu\nu'}^\alpha(Q, Q') \\
&+ \sum_{\beta\lambda} \left[D_{\text{exz}}^{\lambda\nu}(\beta) \overline{\mathcal{T}}_\lambda^{\alpha*}(Q + \beta_{||}) \left(\overline{\mathcal{T}}_{\nu'}^{-\beta}(Q') + \mathcal{T}_{\nu'}^\beta(Q') \right) \right. \\
&\quad \left. - D_{\text{exz}}^{\nu'\lambda}(\beta) \mathcal{T}_\lambda^\alpha(Q' - \beta_{||}) \left(\overline{\mathcal{T}}_\nu^{-\beta*}(Q) + \mathcal{T}_\nu^{\beta*}(Q) \right) \right] \\
&+ \sum_{k\mu} \left[\mathcal{B}_{\mu\nu'}(Q + k, Q') U_{\text{exz}}^{\mu\nu}(k) - \mathcal{B}_{\nu\mu}(Q, Q' - k) U_{\text{exz}}^{\nu'\mu}(k) \right] \\
&+ \sum_\lambda \left[D_{\text{exz}}^{\lambda\nu}(-\alpha) n_{-\alpha} \mathcal{N}_{\lambda\nu'}(Q - \alpha_{||}, Q') \right. \\
&\quad \left. - D_{\text{exz}}^{\nu'\lambda}(-\alpha) (n_{-\alpha} + 1) \mathcal{N}_{\nu\lambda}(Q, Q' + \alpha_{||}) \right] \quad (2.103)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{P}_\nu(Q) &= - \left[\frac{\hbar^2 Q^2}{2M} + \epsilon_\nu + E_{\text{gap}} \right] \mathcal{P}_\nu(Q) \\
&- \sum_{\beta\mu} D_{\text{exz}}^{\nu\mu}(\beta) \left[\overline{\mathcal{T}}_\mu^{-\beta}(Q - \beta_{||}) + \mathcal{T}_\mu^\beta(Q - \beta_{||}) \right] \\
&- \sum_{k\mu} \mathcal{P}_\mu(Q - k) U_{\text{exz}}^{\nu\mu}(k) \\
&+ i \sum_{q_z\sigma} \Psi_\nu^*(r=0) F(Q, q_z, \sigma) m_{Q, q_z}^\sigma \quad (2.104)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} M_{nl}^{\sigma\sigma'} &= (\hbar\Omega_{n\sigma} - \hbar\Omega_{l\sigma'}) M_{nl}^{\sigma\sigma'} \\
&- \sum_\lambda \left[F^*(-l\sigma') \mathcal{S}_\lambda^{n\sigma}(l_{||}) \Psi_\lambda(r=0) \right. \\
&\quad \left. + F(n\sigma) \mathcal{S}_\lambda^{l\sigma'*}(n_{||}) \Psi_\lambda^*(r=0) \right] \quad (2.105)
\end{aligned}$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} m_\alpha^\sigma = -\hbar\Omega_{\alpha\sigma} m_\alpha^\sigma - iF^*(-\alpha\sigma) \sum_\lambda \mathcal{P}_\lambda(\alpha_{||}) \Psi_\lambda(r=0) \quad (2.106)$$

Die in diesen Gleichungen auftretenden Matrixelemente sind für die Phononen durch

$$\begin{aligned}
D_{\text{exz}}^{\nu\lambda}(\alpha) &= \overline{D}^c(\alpha) \sum_k \Psi_\nu^*(k) \Psi_\lambda \left(k - \frac{m_{hh}}{M} \alpha_{||} \right) \\
&- \overline{D}^v(\alpha) \sum_k \Psi_\nu^*(k) \Psi_\lambda \left(k + \frac{m_e}{M} \alpha_{||} \right) \quad (2.107)
\end{aligned}$$

und für die Unordnung durch

$$\begin{aligned}
U_{\text{exz}}^{\nu\lambda}(\alpha) &= U(\alpha, c) \sum_k \Psi_\nu^*(k) \Psi_\lambda \left(k - \frac{m_{hh}}{M} \alpha_{\parallel} \right) \\
&\quad - U(\alpha, v) \sum_k \Psi_\nu^*(k) \Psi_\lambda \left(k + \frac{m_e}{M} \alpha_{\parallel} \right)
\end{aligned} \tag{2.108}$$

gegeben. Die reine Wechselwirkung wird also durch eine Faltung mit den Exzitonwellenfunktionen im Impulsraum ersetzt. Im Ortsraum bedeutet dies, daß die Wechselwirkung am Ort \vec{r} im Wesentlichen mit dem Absolutquadrat der Relativwellenfunktion $\Psi(\vec{r})$ gewichtet wird. Die Wechselwirkung von Phononen und Unordnung mit den einzelnen exzitonischen Zuständen wird also durch die räumliche Ausdehnung der Elektron-Lochpaare bestimmt.

Weiterhin werden ab hier vereinfachend die Entwicklungskoeffizienten ebenso wie die eigentlichen Erwartungswerte bezeichnet, also \mathcal{S} als photonenassistierte Polarisation, \mathcal{P} als Polarisation usw. und nur dort, wo Verwechslungsgefahr besteht, explizit gesagt, ob es sich um den Koeffizienten oder die eigentliche physikalische Größe handelt.

Zur weiteren Vereinfachung wird nun angenommen, daß im Fall der Phononen eine Badnäherung ausreichend ist. Dazu zwingt einen schon die Tatsache, daß es numerisch unmöglich ist, auf den momentan verfügbaren Rechnern die Elektron-Phonon Wechselwirkung dynamisch für ein zweidimensionales elektronisches System mit Phononen zu realisieren. Dabei spielt die Tatsache, daß Phononen prinzipiell als dreidimensionale Teilchen behandelt werden müssen, eine wesentliche Rolle. Da der Einfluß der Phononen auf elektronische Wellenpakete bereits von [9] untersucht wurde, ist dieser Aspekt nur noch im Fall der exzitonischen Wellenpakete interessant. Dabei ist aber, wie die Wortwahl schon nahelegt, die Coulombwechselwirkung dominant, so daß nach einer Entwicklung in Exziton-Wellenfunktionen die Annahme eines Bades vernünftige Ergebnisse liefern sollte.

Die Markovnäherung wird ebenfalls bei den Photonen angewandt. Dabei wird vorausgesetzt, daß Gedächtniseffekte und Energierenormierungen aufgrund der Elektron-Photon Wechselwirkung keine wesentlichen Änderungen der Propagation elektronischer oder exzitonischer Wellenpakete bewirkt. Da die Materie-Licht Wechselwirkung hier nur im Rahmen der optischen Anregung und dem strahlenden Zerfall berücksichtigt werden soll, ist die Näherung durchaus gerechtfertigt. Daher werden die assistierten 2- und 4-Operator Erwartungswerte mit einer Markovnäherung durch die nichtassistierten Größen ausgedrückt und man erhält die Bewegungsgleichungen für die Polarisation und die Exzitonendichte. Weiterhin wird die Darstellung des elektrischen Feldes

$$\begin{aligned}
\vec{E}(\vec{r}) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}) \\
&= -i \sum_{\sigma \vec{k}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar \Omega_{\vec{k}\sigma}}{V}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\xi}_{\vec{k}\sigma} \left(a_{-\vec{k}\sigma}^\dagger - a_{\vec{k}\sigma} \right)
\end{aligned} \tag{2.109}$$

verwendet, um den Einfluß externer Photonen auszudrücken. Darüber hinaus werden sämtliche Wechselwirkungsanteile, die Matrixelemente von höherer als zweiter Ordnung besitzen, vernachlässigt. Damit verbleiben nur noch die Gleichungen für die Polarisation \mathcal{P} und für die inkohärenten Exzitonendichte \mathcal{N} .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}) &= -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2 Q^2}{2M} + E_{Gap} + E_n + \epsilon_\nu \right] \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}) \\
&\quad - \sum_{\mu\lambda\vec{k}} W_{phon}^{\mu\nu\mu\lambda}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_\lambda(\vec{Q}) \\
&\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu\vec{k}} U_{exz}^{\nu\mu}(k) \mathcal{P}_\mu(\vec{Q} - \vec{k}) \\
&\quad - \sum_{\lambda} \Gamma_{phot}^{\nu\lambda}(\vec{Q})^* \mathcal{P}_\lambda(\vec{Q}) \\
&\quad + \frac{2\pi i}{\hbar} \sum_{\sigma} \psi_\nu^*(r=0) \vec{E}_\sigma(\vec{Q}) \cdot \vec{d}^{e\nu} f(0)
\end{aligned} \tag{2.110}$$

Die Gleichung für die Polarisation \mathcal{P} enthält fünf Anteile. Zum einen ist da der wechselwirkungsfreie Anteil (Zeile 1), der die ungestörte Dynamik eines Elektron-Lochpaares beschreibt. Durch die Wechselwirkung mit den Phononen (Zeile 2) nimmt die Polarisation jedoch ebenso ab, wie durch den strahlenden Zerfall (Zeile 4). Das externe elektrische Feld (Zeile 5) dient als Quelle und die Wechselwirkung mit der Unordnung sorgt für die Überlagerung mit anderen Exzitonenzuständen (Zeile 3).

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{N}_{\lambda\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') &= -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2}{2M} (Q'^2 - Q^2) + \epsilon_{\lambda'} - \epsilon_\lambda \right] \mathcal{N}_{\lambda\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu\vec{k}} \left[U_{exz}^{\nu\lambda}(k) \mathcal{N}_{\nu\lambda'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}') - U_{exz}^{\lambda'\nu}(k) \mathcal{N}_{\lambda\nu}(\vec{Q}, \vec{Q}' + \vec{k}) \right] \\
&\quad - \sum_{\nu\nu'\vec{k}} \left[W_{phon}^{\nu\lambda\nu\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k}) \mathcal{N}_{\nu'\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \right. \\
&\quad \quad + W_{phon}^{\nu\lambda'\nu\nu'}(\vec{Q}', \vec{Q}' + \vec{k})^* \mathcal{N}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
&\quad \quad - W_{phon}^{\lambda\nu\lambda'\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}, \vec{Q}')^* \left(\mathcal{N}_{\nu\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) + \mathcal{P}_\nu(\vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_{\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}) \right) \\
&\quad \quad \left. - W_{phon}^{\lambda'\nu\lambda\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}) \left(\mathcal{N}_{\nu\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) + \mathcal{P}_{\nu'}(\vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}' + \vec{k}) \right) \right] \\
&\quad - \sum_{\nu} \left[\mathcal{N}_{\nu\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \Gamma_{phot}^{\lambda\nu}(\vec{Q}) + \mathcal{N}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \Gamma_{phot}^{\lambda'\nu}(\vec{Q})^* \right]
\end{aligned} \tag{2.111}$$

Die inkohärente Exzitonendichte \mathcal{N} enthält wie die Polarisation auch den nicht-wechselwirkenden Anteil (Zeile 1) und auch sie zerfällt strahlend (Zeile 7). Als Quelle taucht hier jedoch nicht mehr das externe elektrische Feld auf, sondern

die Polarisation (Zeile 5+6), welche über phononische Streuprozesse zerfällt und dabei inkohärente Exzitonendichte generiert. Die inkohärente Exzitonendichte selber unterliegt weiterhin einer Streuung durch Phononen, welche zu einer Umverteilung der Impulse führt (Zeile 3-6). Bei diesen Streuprozessen bleibt die Dichte jedoch erhalten. Ebenfalls wirkt die Unordnung über Streuprozesse auf die inkohärente Exzitonendichte ein (Zeile 2).

In diesen Gleichungen sind die Phononenstreuraten definiert als

$$\begin{aligned}
W_{phon}^{\mu\mu'\nu\nu'}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) &= \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{k_z} D_{exz}^{\mu\mu'}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) D_{exz}^{\nu\nu'}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1)^* \\
&\times \left[n_{|\vec{k}_2 - \vec{k}_1|} \delta \left(\frac{\hbar^2}{2M} [k_1^2 - k_2^2] + \hbar\omega_{|\vec{k}_2 - \vec{k}_1|} + \epsilon_{\nu'} - \epsilon_{\nu} \right) \right. \\
&\left. + \left(1 + n_{|\vec{k}_2 - \vec{k}_1|} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2M} [k_1^2 - k_2^2] - \hbar\omega_{|\vec{k}_2 - \vec{k}_1|} + \epsilon_{\nu'} - \epsilon_{\nu} \right) \right] \quad (2.112)
\end{aligned}$$

und die Zerfallsrate aufgrund der spontanen Emission durch

$$\begin{aligned}
\Gamma_{phot}^{\nu\nu'}(\vec{Q}) &= \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{q_z \sigma} \left| F(\vec{Q}, q_z, \sigma) \right|^2 \Psi_{\nu}(r=0) \Psi_{\nu'}^*(r=0) \\
&\times \delta \left(\frac{\hbar^2 Q^2}{2M} + E_G + E_n + \epsilon_{\nu'} - \hbar\Omega_{Q, q_z, \sigma} \right) \quad (2.113)
\end{aligned}$$

Die Phononenstreuraten enthalten dabei die energieerhaltende δ -Distribution wie auch die entsprechenden Matrixelemente und Bose-Einstein Verteilungsfunktionen n_k für die Absorptions- und Emissionsprozesse. Bei den Zerfallsraten tauchen zusätzlich noch die Wellenfunktionen $\Psi(r)$ auf, da diese nicht wie bei den Phononen mit in die neuen Matrixelemente integriert wurden (vgl. auch Glg. (2.107) und (2.108)).

2.2.2 Die Behandlung von Unordnung - Problem der Ensemblemittelung

Nachdem nun die Hierarchie der quantenmechanischen Erwartungswerte abgebrochen und ein Satz geschlossener Gleichungen erhalten wurde, liegt mit der Behandlung der Unordnung ein weiteres Problem vor. Bei Voraussetzung eines selbstmittelnden Experimentes bestehen dann zwei Möglichkeiten:

1. Man berechnet für ein konkretes Unordnungspotential die Dynamik des Systems. Dies wird für sehr viele verschiedenen Realisierungen der Unordnung durchgeführt, wobei diese so gewählt wurden, daß sie einer bestimmten Verteilung (z.B. Gauß- oder Poissonverteilung) folgen. Anschließend wird über die verschiedenen Ergebnisse gemittelt. Ist dies erfüllt, kann mit diesem Verfahren die Unordnung im Rahmen der jeweiligen Modellannahmen exakt beschrieben werden.

2. Es wird eine Korrelationsentwicklung bezüglich der Ensemblemittelung durchgeführt.

$$\begin{aligned}
\langle U\mathcal{A}\mathcal{B} \rangle &= \langle U \rangle \langle \mathcal{A} \rangle \langle \mathcal{B} \rangle \\
&+ \langle U\mathcal{A} \rangle^c \langle \mathcal{B} \rangle \\
&+ \langle U\mathcal{B} \rangle^c \langle \mathcal{A} \rangle \\
&+ \langle U \rangle \langle \mathcal{A} \rangle \langle \mathcal{B} \rangle^c
\end{aligned} \tag{2.114}$$

Analog zur quantenmechanischen Korrelationsentwicklung werden nun für die Korrekturen die entsprechenden Bewegungsgleichungen aufgestellt. Anschließend erfolgt eine Klassifizierung der Hierarchie nach der Unordnung als Entwicklungsparameter, sowie ein Abbrechen, indem ab einer gewissen Ordnung alle weiteren Korrekturen vernachlässigt werden. Auch hier hätte man bis zu dieser Stelle die wesentlichen kohärenten Eigenschaften des Systems erfaßt. Dieses Verfahren ist natürlich nur im Grenzfall schwacher Unordnung anwendbar.

In dieser Arbeit wird angenommen, daß die Unordnung schwach genug ist, um eine Korrelationsentwicklung zu rechtfertigen. Die Exzitonendichte in Ensemblemittelung $\langle \langle c^\dagger v v^\dagger c \rangle \rangle_E$ ist dann durch die Zerlegung

$$\langle \langle c_1^\dagger v_2 v_3^\dagger c_4 \rangle \rangle_E = \langle \langle c_1^\dagger v_2 \rangle \rangle_E \langle \langle v_3^\dagger c_4 \rangle \rangle_E + \langle \langle c_1^\dagger v_2 \rangle \langle v_3^\dagger c_4 \rangle \rangle_E^c + \langle \langle c_1^\dagger v_2 v_3^\dagger c_4 \rangle^c \rangle_E$$

bzw. in schematischer Schreibweise für die Entwicklungskoeffizienten durch

$$= \langle \mathcal{P}_\lambda^* \mathcal{P}_{\lambda'} \rangle_E + \langle \mathcal{P}_\lambda^* \rangle_E \langle \mathcal{P}_{\lambda'} \rangle_E + \langle \mathcal{N}_{\lambda\lambda'} \rangle_E$$

gegeben. Die durch die Ensemblemittelung in den Bewegungsgleichungen (2.110) und (2.111) neu auftauchenden Größen sind:

- $\langle \mathcal{P}_\lambda^* \mathcal{P}_{\lambda'} \rangle_E$, eine Korrelation bezüglich der Ensemblemittelung, welche die Entwicklungsamplituden der Polarisation enthält,
- $\langle \mathcal{P}_\lambda \rangle_E$, die ensemblegemittelte Polarisationsamplitude,
- $\langle U\mathcal{P}_\lambda \rangle_E$, die zur ensemblegemittelte Polarisationsamplitude unordnungsassitierte Größe
- $\langle \mathcal{N}_{\lambda\lambda'} \rangle_E$, die ensemblegemittelte Exzitonendichteamplitude sowie
- $\langle U\mathcal{N}_{\lambda\lambda'} \rangle_E$, die ensemblegemittelte unordnungsassitierte Exzitonendichteamplitude.

Ebenso wie im Fall der Phononen werden Markovnäherungen angewandt und damit die unordnungsassistierten Größen eliminiert. Damit entfällt sofort die

Möglichkeit, Unordnungs-Gedächtniseffekte und damit Lokalisierung zu beschreiben. Da die Korrelationsentwicklung aber ohnehin schwache Unordnung voraussetzt, ist dies keine kritische Näherung. Der Vorteil dieser Verfahrensweise ist, daß bei einer Entwicklung bis zur zweiten Ordnung im Unordnungsmatrixelement nur noch die Kenntnis der Korrelationsfunktion $\langle U_{\vec{q}_1\lambda}^{IFR} U_{\vec{q}'\lambda'}^{IFR} \rangle$, vgl. Glg. (2.50), zur Beschreibung des Systems notwendig ist. Führt man diese Berechnungen durch, so ergeben sich die folgenden Gleichungen:⁹

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}) &= -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2 Q^2}{2M} + E_{Gap} + E_n + \epsilon_\nu \right] \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}) \\
&\quad - \sum_{\mu\lambda\vec{k}} W_{unord}^{\mu\nu\mu\lambda}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_\lambda(\vec{Q}) \\
&\quad - \sum_{\mu\lambda\vec{k}} W_{phon}^{\mu\nu\mu\lambda}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_\lambda(\vec{Q}) \\
&\quad - \sum_{\lambda} \Gamma_{phot}^{\nu\lambda}(\vec{Q})^* \mathcal{P}_\lambda(\vec{Q}) \\
&\quad + \frac{2\pi i}{\hbar} \sum_{\sigma} \psi_\nu^*(r=0) \vec{E}_\sigma(\vec{Q}) \cdot \vec{d}^{c\nu} f(0)
\end{aligned} \tag{2.115}$$

Die Polarisationsgleichung bleibt bei der Ensemblemittelung bis auf die Unordnungsanteile unverändert. Letztere verursachen nun jedoch ebenso wie die anderen Wechselwirkungen einen Zerfall der Polarisation. Die zugehörigen Streuraten sind definiert als

$$\begin{aligned}
W_{unord}^{\mu'\nu\nu'}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) &= \frac{\pi}{\hbar^2} \left\langle U_{exz}^{\mu\mu'}(\vec{k}_2 - \vec{K}_1) U_{exz}^{\nu\nu'}(\vec{k}_2 - \vec{K}_1)^* \right\rangle_E \\
&\quad \times \delta \left(\frac{\hbar^2}{2M} [k_1^2 - k_2^2] + \epsilon_{\nu'} - \epsilon_\nu \right),
\end{aligned} \tag{2.116}$$

mit dem Matrixelement aus Glg. (2.108) Die ensemblegemittelte Exzitonendichte

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{N}_{\lambda\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') &= -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2}{2M} (Q'^2 - Q^2) + \epsilon_{\lambda'} - \epsilon_\lambda \right] \mathcal{N}_{\lambda\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
&\quad - \sum_{\nu\nu'\vec{k}} \left[W_{unord}^{\nu\lambda\nu\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k}) \mathcal{N}_{\nu'\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \right. \\
&\quad \quad + W_{unord}^{\nu\lambda'\nu\nu'}(\vec{Q}', \vec{Q}' + \vec{k})^* \mathcal{N}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
&\quad \quad - W_{unord}^{\lambda\nu\lambda'\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}, \vec{Q}')^* \mathcal{N}_{\nu\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) \\
&\quad \quad \left. - W_{unord}^{\lambda'\nu\lambda\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}) \mathcal{N}_{\nu'\nu}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) \right]
\end{aligned}$$

⁹Die Ensemblemittelung wurde dabei nicht explizit mitgeschrieben. Es ist jedoch klar, daß alle hier auftauchenden Größen nun gemittelt sind!

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\nu\nu'\vec{k}} \left[W_{phon}^{\nu\lambda\nu\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k}) \mathcal{N}_{\nu'\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \right. \\
& \quad + W_{phon}^{\nu\lambda'\nu\nu'}(\vec{Q}', \vec{Q}' + \vec{k})^* \mathcal{N}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
& \quad - W_{phon}^{\lambda\nu\lambda'\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}, \vec{Q}')^* \mathcal{N}_{\nu\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) \\
& \quad \left. - W_{phon}^{\lambda'\nu\lambda\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}) \mathcal{N}_{\nu'\nu}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) \right] \\
& + \sum_{\nu\nu'\vec{k}} \left[W_{phon}^{\lambda\nu\lambda'\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}, \vec{Q}')^* \right. \\
& \quad \times \left(\mathcal{P}_\nu(\vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_{\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}) + \mathcal{K}_{\nu\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) \right) \\
& \quad + W_{phon}^{\lambda'\nu\lambda\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}) \\
& \quad \times \left(\mathcal{P}_{\nu'}(\vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}' + \vec{k}) + \mathcal{K}_{\nu'\nu}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) \right) \left. \right] \\
& - \sum_{\nu} \left[\mathcal{N}_{\nu\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \Gamma_{phot}^{\lambda\nu}(\vec{Q}) + \mathcal{N}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \Gamma_{phot}^{\lambda'\nu}(\vec{Q})^* \right] \quad (2.117)
\end{aligned}$$

unterscheidet sich im Gegensatz zur Polarisation von der ungemittelten Größe nicht nur in den Unordnungsanteilen (Zeile 2-5), sondern auch die Quellterme werden modifiziert. So werden aus dem Produkt von zwei Polarisationen zwei Beiträge, nämlich das Produkt von zwei ensemblegemittelten Polarisationen und dem ensemblegemittelten Produkt (Zeile 10-13)

$$\mathcal{K}_{\lambda\lambda'}(k_1, k_2) = \langle \mathcal{P}_\lambda(k_1)^* \mathcal{P}_{\lambda'}(k_2) \rangle_E,$$

welches im Folgenden als kohärente Exzitonendichte bezeichnet wird. Die dazugehörige Gleichung lautet

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{K}_{\lambda\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') &= -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar^2}{2M} (Q'^2 - Q^2) + \epsilon_{\lambda'} - \epsilon_\lambda \right] \mathcal{K}_{\lambda\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
& - \sum_{\nu\nu'\vec{k}} \left[W_{unord}^{\nu\lambda\nu\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k}) \mathcal{K}_{\nu'\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \right. \\
& \quad + W_{unord}^{\nu\lambda'\nu\nu'}(\vec{Q}', \vec{Q}' + \vec{k})^* \mathcal{K}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \\
& \quad - W_{unord}^{\lambda\nu\lambda'\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}, \vec{Q}')^* \left(\mathcal{K}_{\nu\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) + \mathcal{P}_\nu(\vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_{\nu'}(\vec{Q}' + \vec{k}) \right) \\
& \quad \left. - W_{unord}^{\lambda'\nu\lambda\nu'}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}) \left(\mathcal{K}_{\nu'\nu}(\vec{Q} + \vec{k}, \vec{Q}' + \vec{k}) + \mathcal{P}_{\nu'}(\vec{Q} + \vec{k})^* \mathcal{P}_\nu(\vec{Q}' + \vec{k}) \right) \right] \\
& - \sum_{\nu\nu'\vec{k}} \left[W_{phon}^{\nu\lambda\nu\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q} + \vec{k}) \mathcal{K}_{\nu'\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \right. \\
& \quad \left. + W_{phon}^{\nu\lambda'\nu\nu'}(\vec{Q}', \vec{Q}' + \vec{k})^* \mathcal{K}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \right] \\
& - \sum_{\nu} \left[\mathcal{K}_{\nu\lambda'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \Gamma_{phot}^{\lambda\nu}(\vec{Q}) + \mathcal{K}_{\lambda\nu'}(\vec{Q}, \vec{Q}') \Gamma_{phot}^{\lambda'\nu}(\vec{Q})^* \right], \quad (2.118)
\end{aligned}$$

wobei ersichtlich ist, daß eine große Ähnlichkeit mit der der inkohärenten Exzitonendichte besteht. Der Hauptunterschied ist jedoch, daß die kohärente Exzitonendichte durch Unordnungsstreuung aus der Polarisation erzeugt wird und zusätzlich durch Phononen zu inkohärenter Exzitonendichte zerfällt.

Stellt man diese Gleichungen schematisch dar, so werden sofort die möglichen Prozesse sichtbar. Das externe Lichtfeld generiert zunächst kohärente Polarisation

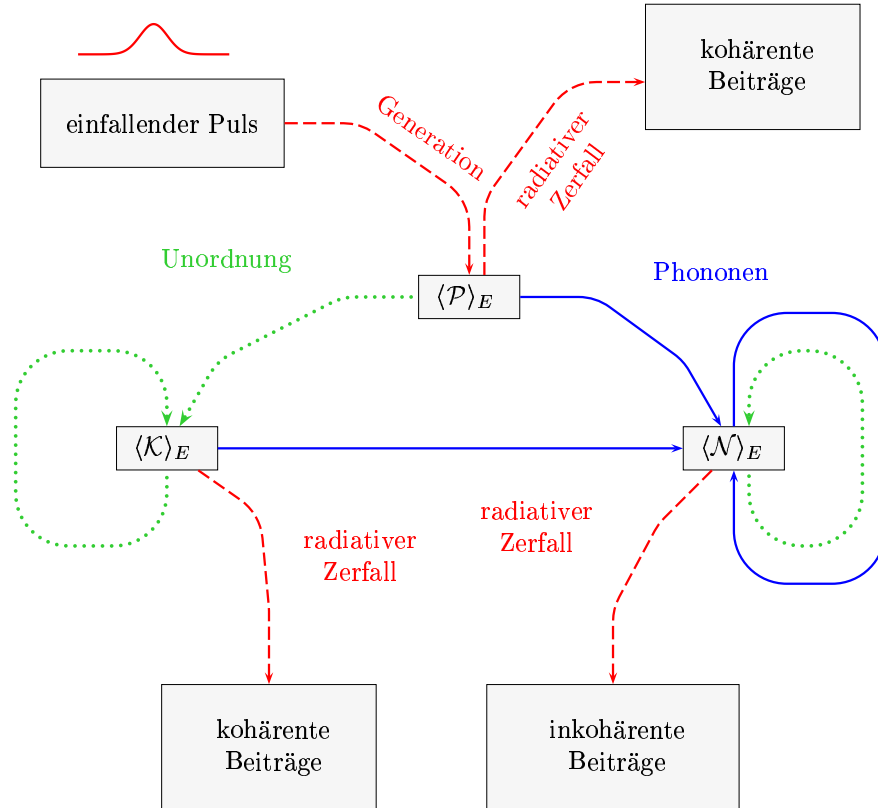


Abbildung 2.2: Flußdiagramm für stattfindende Prozesse bei der Anregung von exzitonischen Systemen. Die gestrichelte Linie kennzeichnet Photonprozesse, die gepunktete die Unordnung und die durchgezogene Linie steht für die Phononen.

on, welche über drei Wege zerfällt:

1. Der strahlende Zerfall führt zu den kohärenten Beiträgen im emittierten Sekundäremissionssignal.
2. Die Wechselwirkung mit den strukturellen Unebenheiten des Quantenfilmes resultiert in der Erzeugung kohärenter Exzitonendichte \mathcal{K} .
3. Die akustischen Phononen verursachen die phononenassitierte Generation inkohärenter Exzitonendichte \mathcal{N} .

Die kohärente Exzitonendichte kann ebenfalls radiativ zerfallen und produziert dabei wiederum kohärente Beiträge zu der emittierten Strahlung. Streuprozesse aufgrund der Wechselwirkung mit dem Unordnungspotential führen zur Umverteilung der kohärenten Exzitonen. Der Einfluß der Phononen wiederum verursacht auch hier einen Zerfall und in der Folge entstehen durch diesen Prozeß inkohärente Exzitonen. Die Impulse der inkohärente Exzitonendichte können nun durch Phononen- und Unordnungsstreuprozesse umverteilt werden. Der strahlende Zerfall ist hier jedoch die einzige Möglichkeit einer Vernichtung von inkohärenter Exzitonendichte. Die dabei emittierten Anteile an der Strahlung tragen jedoch keine Phaseninformationen des ursprünglichen anregenden Lichtfeldes mehr, sind also inkohärent.

Kapitel 3

Anwendungen

3.1 Relevante Größen bei der Raum-Zeitdynamik

Bevor die räumliche und zeitliche Dynamik von Wellenpaketen untersucht werden kann, müssen zuerst die Größen definiert werden, anhand derer die Ausbreitung der Ladungsträger beobachtet werden kann. Als Ausgangspunkt der Betrachtungen dient die Dichtematrix

$$\mathcal{D}(\vec{Q}, \vec{q}, t) = \tilde{\mathcal{D}}\left(\vec{q} - \frac{m_2}{M}\vec{Q}, \vec{q} + \frac{m_1}{M}\vec{Q}\right),$$

der Schwerpunkts-

$$\vec{Q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1$$

und Relativimpulse

$$\vec{q} = \frac{m_1\vec{k}_1 + m_2\vec{k}_2}{M = m_1 + m_2}.$$

$\tilde{\mathcal{D}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ ist die verallgemeinerte Dichtematrix. $m_{1/2}$ kennzeichnet dabei die entsprechende Masse des Teilchens mit Impulsvektor $k_{1/2}$.

- Die Ortsverteilung

$$\mathcal{D}(\vec{R}, t) = \sum_{\vec{Q}\vec{q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \mathcal{D}(\vec{Q}, \vec{q}, t) \quad (3.1)$$

gibt direkt die räumliche Dichteverteilung an. Sie wird durch die Fouriertransformation bezüglich des Schwerpunktsimpulses und dem Übersummieren aller Relativimpulse gewonnen.

- Die Energie- oder Relativimpulsverteilung¹

$$\mathcal{D}(\vec{q}, t) = \int d^2R \mathcal{D}(\vec{R}, \vec{q}, t) = \mathcal{D}(\vec{Q} = 0, \vec{q}, t) \quad (3.2)$$

¹Beide Bezeichnungen können gleichwertig benutzt werden, da im hier vorliegenden Fall eine eindeutige Relation zwischen beiden besteht.

gibt an, wie sich die Anregung auf die Relativbewegung der Teilchen verteilt. Im Rahmen dieser Arbeit wird weiterhin nur die Verteilung in Abhängigkeit der Impulsbeträge

$$\mathcal{D}(q, t) = \int_0^{2\pi} d\phi_q \int d^2R \mathcal{D}(\vec{R}, \vec{q}, t) \quad (3.3)$$

berücksichtigt. Allerdings ist diese Größe noch nicht ausreichend für die alleinige Beschreibung der Wellenpaketdynamik, da die Information über die Richtung der Propagation *einzelner* Elektronen (Exzitonen) noch fehlt. Diese Information ist in der

- Winkelverteilung[22]

$$\mathcal{D}(\alpha = \phi_q - \phi_R, t) = \frac{1}{2\pi\mathcal{D}_0} \int_0^\infty q dq \int_0^\infty R dR \mathcal{D}(\vec{R}, \vec{q}, t) \quad (3.4)$$

enthalten. Die Verteilung gibt an, wie der Relativimpuls eines einzelnen

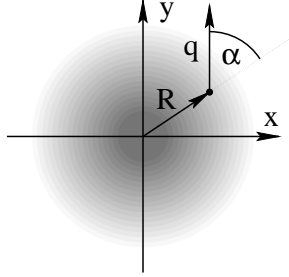


Abbildung 3.1: Winkel α zwischen Relativimpuls \vec{q} und Radialvektor \vec{R} .

Exzitons im Mittel zum Radialvektor ausgerichtet ist, vgl. Abb. 3.1. \mathcal{D}_0 ist dabei die Gesamtdichte

$$\mathcal{D}_0 = \int_0^\pi d\alpha \mathcal{D}(\alpha) \quad (3.5)$$

Eine um $\alpha = 0$ (π) zentrierte Verteilung bedeutet, daß die Relativimpulse und somit die Geschwindigkeitsvektoren radial aus dem Zentrum des Wellenpaketes heraus(hinein)zeigen. Die Ladungsträger propagieren im Mittel also aus dem Fokus der Verteilung hinaus(hinein). Eine flache Verteilung unabhängig von α heißt dann, daß die Impuls- bzw. Geschwindigkeitsrichtungen statistisch gleichmäßig verteilt sind.

- Die Charakterisierung der Propagation kann durch die Varianz $s^2 = \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2$ erfolgen. Im Fall einer gaußförmigen Verteilung $\exp[-R_{||}^2/\Delta^2(t)]$ ist letztere jedoch bereits durch deren 2. Moment

$$\Delta^2(t) = \langle R^2 \rangle = \frac{1}{\mathcal{D}_0} \int_0^{2\pi} d\phi_R \int_0^\infty R^3 dR \mathcal{D}(\vec{R}, t) \quad (3.6)$$

vollständig bestimmt, wobei

$$\mathcal{D}_0 = \int_0^{2\pi} d\phi_R \int_0^\infty R dR \mathcal{D}(\vec{R}, t) \quad (3.7)$$

wiederum die Gesamtdichte ist.

3.2 Systeme nichtwechselwirkender Teilchen

Nachdem die für die Raum-Zeitdynamik wichtigen Größen definiert wurden, soll nun erst einmal untersucht werden, wie das Verhalten von Teilchen ohne Wechselwirkungen aussieht. Der Vorteil an dieser Verfahrensweise ist, daß unter Vorgabe einer gaußförmigen Anfangsverteilung

$$\mathcal{D}(\vec{R}, \vec{q}) = \frac{\alpha^2}{\pi^2 \sigma^2} \exp \left[-R^2 / \sigma^2 - q^2 \alpha^2 \right] \quad (3.8)$$

zum Zeitpunkt $t = 0$ die Dynamik vollständig analytisch beschreibbar ist. Die zu diesem Problem korrespondierende Bewegungsgleichung lautet

$$\left(\frac{d}{dt} + \vec{v}(\vec{q}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_{||}} \right) \mathcal{D}(\vec{R}_{||}, \vec{q}, t) = 0. \quad (3.9)$$

mit der Geschwindigkeit $\vec{v}(\vec{q}) = \frac{\hbar \vec{q}}{M}$. Die zugehörige Lösung ist durch

$$\mathcal{D}(\vec{R}, \vec{q}, t) = \mathcal{D}(\vec{R} - t \cdot \vec{v}(\vec{q})) \quad (3.10)$$

gegeben. Die Dynamik wird also durch die Verteilung der Relativimpulse \vec{q} bestimmt. Zusammen mit der Anfangsverteilung, Glg. (3.8), ergibt sich die Dynamik des Wellenpaketes im Ortsraum als

$$\mathcal{D}(\vec{R}, t) = \sum_{\vec{q}} \mathcal{D}(\vec{R} - t \cdot \vec{v}(\vec{q})) = \frac{2}{\pi \Delta_0^2} \exp \left[-\frac{R^2}{\Delta_0^2} \right], \quad \Delta_0^2 = \sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{M^2 \alpha^2}. \quad (3.11)$$

σ und α beschreiben dabei die räumliche und energetische Breite der Verteilung. Man erkennt deutlich, daß die Dynamik nur durch eine Verbreiterung des Wellenpaketes charakterisiert ist. Das zweite Moment der Verteilung ist für große Zeiten durch einen parabolischen Verlauf gekennzeichnet. Maßgeblich für die Geschwindigkeit der Ausbreitung ist dabei die Teilchenmasse M .

Die Energieverteilung kann durch die Integration über alle Ortskoordinaten aus der Lösung, Glg. (3.10), gewonnen werden.

$$\int_0^\infty R dR \int_0^{2\pi} d\phi_R \mathcal{D}(\vec{R}, \vec{q}) = \frac{\alpha^2}{\pi} \exp \left[-q^2 \alpha^2 \right] \quad (3.12)$$

Die Verteilung ist also zeitlich gesehen konstant, was aufgrund der fehlenden Stöße auch zu erwarten war.

Die Winkelverteilung, Glg. (3.4), kann in diesem Fall ebenfalls analytisch exakt bestimmt werden. Sie ist durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\eta = \phi_q - \phi_R) &= \frac{A}{8\pi^2} \left[\frac{1}{\Delta^2} - \left(\frac{M\sigma\alpha}{\hbar t \cos \eta} \right)^2 \right. \\ &\times \left. \left\{ \frac{\arctan \mu - 0.5\pi (1 + \text{sgn}(\cos \eta))}{\mu^3} - \frac{1}{\mu^2 (\mu^2 + 1)} \right\} \right], \quad (3.13) \end{aligned}$$

wobei

$$\mu = \sqrt{\tan^2 \eta + \left(\frac{M\sigma\alpha}{\hbar t \cos \eta} \right)^2} \quad (3.14)$$

ist. Betrachtet man die beiden Grenzfälle $t \rightarrow 0$ und $t \rightarrow \infty$, so ist folgendes Verhalten festzustellen:

- Für $t \rightarrow 0$ gilt:

$$\mathcal{D}(\eta = \phi_q - \phi_R) = \frac{A\sigma^2}{8\pi^2\Delta^2} \quad (3.15)$$

Die Verteilung ist also winkelunabhängig. Damit bewegen sich zu Beginn die Teilchen im Mittel in alle möglichen Richtungen.

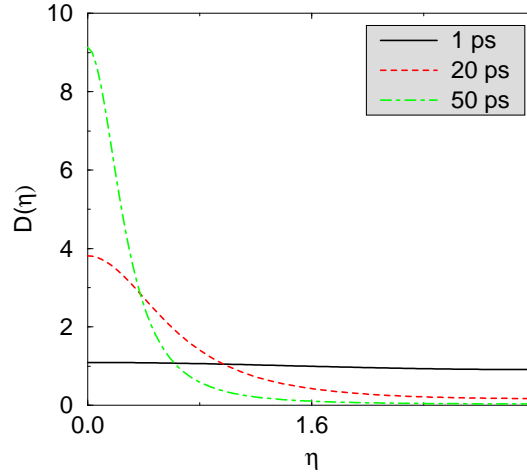


Abbildung 3.2: Zeitentwicklung der Winkelverteilung für nichtwechselwirkende Teilchen der Anfangsverteilung Glg. (3.8). Mit zunehmender Zeit bildet sich ein Maximum bei $\eta = 0$ heraus, welches immer schmaler und höher wird. Die Modellparameter wurden wie folgt gewählt: $\sigma = 1\mu m$, $\alpha = 0.01\mu m$ und $M = 0.2m_0$.

- Für $t \rightarrow \infty$ ist ein Maximum bei $\eta = 0$ zu erkennen, welches mit zunehmender Zeit immer stärker und schmaler wird, siehe Abb. 3.2. Dieses Verhalten zeigt, daß bei großen Zeiten im Mittel die meisten Teilchen eine Geschwindigkeit parallel zum Radialvektor aufweisen. Physikalisch ist es so zu verstehen, daß die Partikel zu Beginn zwar in alle möglichen Richtungen propagieren, da sie jedoch keinerlei Stößen unterliegen, haben sie irgendwann den ursprünglichen Anregungsbereich verlassen und die Richtung des Geschwindigkeitsvektors geht asymptotisch gegen den Radialvektor.

3.3 Elektronische Systeme

In diesem Abschnitt stehen die kohärenten Aspekte der Ladungsträgerdynamik im Vordergrund. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf den Elektron- und Lochdichten

$$f_{k_1 k_2}^e = \langle c_{k_1}^\dagger c_{k_2} \rangle \quad (3.16)$$

$$f_{k_1 k_2}^h = \delta_{k_1 k_2} - \langle v_{k_1}^\dagger v_{k_2} \rangle. \quad (3.17)$$

Deren kohärente Anteile lassen sich mit Hilfe von Erhaltungssätzen

$$f_{k_1 k_2}^e = \sum_k P_{k k_1}^* P_{k k_2} \quad (3.18)$$

$$f_{k_1 k_2}^h = \sum_k P_{k_1 k} P_{k_2 k}^* \quad (3.19)$$

durch die Polarisierung

$$P_{k_1 k_2} = \langle v_{k_1}^\dagger c_{k_2} \rangle \quad (3.20)$$

ausdrücken. Verwendet man nun die Entwicklung der Polarisierung nach Exziton Wellenfunktionen, Glg. (2.92), so können nach einer Variablentransformation auf Relativ- und Schwerpunktsimpulse sowie einer Fouriertransformation in den Ortsraum die Dichten wie folgt geschrieben werden:

$$f^{e/h}(\vec{R}) = \frac{M^2}{4m_{v/c}^2 A} \int d^2 r \left| \sum_\lambda \Psi_\lambda \left(\frac{M\vec{r}}{2m_{v/c}} \right) \mathcal{P}_\lambda \left(\vec{R} \mp \frac{\vec{r}}{2}, t \right) \right|^2 \quad (3.21)$$

Ebenso kann für die Exzitonendichte

$$N_{k_1, k_2} = \sum_{\nu\nu'} \langle B_{k_1\nu}^\dagger B_{k_2\nu'} \rangle \Psi_\nu^*(r=0) \Psi_{\nu'}(r=0) \quad (3.22)$$

ein Erhaltungssatz formuliert werden. Ersetzt man in Glg. (3.22) die Exzitonoperatoren mit Hilfe von Glg. (2.91), so kann auch die kohärente Exzitonendichte mit der bei niedrigen Anregungsintensitäten gültigen Relation

$$\langle B_{k_1\nu}^\dagger B_{k_2\nu'} \rangle \approx \langle B_{k_1\nu}^\dagger \rangle \langle B_{k_2\nu'} \rangle \quad (3.23)$$

durch die Polarisierung berechnet werden. Im Ortsraum ergibt sich daraus die Beziehung

$$N(R, t) = \left| \sum_\nu \Psi_\nu(r=0) \mathcal{P}_\nu(R, t) \right|^2. \quad (3.24)$$

Während die Lösungen der Wanniergleichung (2.98) als bekannt vorausgesetzt werden, muß die Exzitonenamplitude \mathcal{P} dagegen mit Hilfe der Polarisationsgleichung (2.115) berechnet werden. Dabei werden sämtliche Zerfallsprozesse vernachlässigt und es wird σ^+ -polarisiertes Licht angenommen. Dann erhält man mit

$$\Omega(Q) = 2\pi \vec{E}(\vec{Q}) \cdot \vec{d}^{cv} f(0)$$

die folgende vereinfachte Gleichung:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{P}_\lambda(Q, t) = \left(-\frac{\hbar^2 Q^2}{2M} + \Delta - \epsilon_\lambda \right) \mathcal{P}_\lambda(Q, t) + \Psi_\lambda^*(\vec{r} = 0) \Omega(Q). \quad (3.25)$$

Um nun einige analytische Erkenntnisse bezüglich der Ladungsträgerverteilung zu erlangen, werden zwei Annahmen gemacht:

1. Die paraxiale Näherung sei gültig. Dies ist für kleine transversale Impulse im Vergleich zu den Impulsen in Propagationsrichtung des Lichtfeldes \vec{e}_z ($Q_{\parallel} \ll k_z = \frac{2\pi}{\lambda}$) gültig. Diese Bedingung ist gut erfüllt für Wellenlängen von $\lambda = 300nm$ und Pulsbreiten von $1\mu m$ ($Q_{\parallel}/k_z \approx 0.05$). Stärker fokussierte Pulse erfordern im Allgemeinen die Lösung der gekoppelten Vektor-Maxwellgleichungen, zu Illustrationszwecken von Effekten im Nahfeldbereich wird im Folgenden die paraxiale Näherung auch bis zur Größenordnung der Lichtwellenlänge verwendet. Mit dieser Näherung ist der auf den Quantenfilm einfallende Lichtpuls durch eine gaußförmige Gestalt gegeben.

$$\Omega(R_{\parallel}, t) = \Omega_0 \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{\tau^2} - \frac{R_{\parallel}^2}{\sigma^2}\right) \quad (3.26)$$

Zentriert ist der Puls dabei zeitlich um t_0 mit der räumlichen und zeitlichen Breite σ und τ .

2. Als zweite Annahme wird vorausgesetzt, daß die räumliche Verteilung praktisch unverändert während der Dauer des einfallenden Pulses ist. Um den zugehörigen Fehler abzuschätzen, wird der Fall freier Elektronen behandelt. Die mittlere kinetische Energie eines Elektrons ist durch die Pulsdauer $\bar{E} = 2\hbar/\tau$ festgelegt. Bei Annahme einer parabolischen Dispersionsrelation erhält man eine typische Wellenzahl $\bar{q} = 2\sqrt{m_{c/v}/\hbar\tau}$ und eine typische Geschwindigkeit von $\frac{\hbar\bar{q}}{m_{c/v}} = 10^{-4}\mu m/fs$ im Fall eines $100fs$ Pulses. Damit würde sich eine räumlich lokalisierte Verteilung von $1\mu m(0.2\mu m)$ Breite maximal um 1(5) Prozent ändern.

Durch diese Vereinfachungen kann die Gleichung für die Exzitonamplitude $\mathcal{P}_\lambda(Q, t)$ analytisch für $t - t_0 \gg \tau$ gelöst werden:

$$\mathcal{P}_\lambda(R, t) = \frac{i\tau\sigma^2\Omega_0\sqrt{\pi}}{2\hbar} \Psi_\lambda^*(\vec{r} = 0) \frac{\exp\left(-\frac{R^2}{4\eta^2(t-t_0)}\right)}{\eta^2(t-t_0)}$$

$$\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar}(\Delta - \epsilon_\lambda)(t - t_0) - \frac{\tau^2}{4\hbar^2}(\Delta - \epsilon_\lambda)^2 \right] \quad (3.27)$$

wobei

$$\eta(t) = \sqrt{\frac{\sigma^2}{4} + \frac{i\hbar}{2M}(t - t_0)} \quad (3.28)$$

ist. Setzt man Glg. (3.27) in die Gleichungen (3.21) und (3.24) ein, so erhält man:

$$f^{e/h}(\vec{R}) = \frac{\Omega_0^{+2} \pi \tau^2 \sigma^4}{4A\hbar^2} \int d^2r g \left(\vec{R} - \frac{m_{v/c}\vec{r}}{2M}, t \right) \cdot |\Phi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.29)$$

und

$$N(R, t) = \frac{\Omega_0^{+2} \pi \tau^2 \sigma^4}{4\hbar^2} g \left(\vec{R}, t \right) \cdot |\Phi(\vec{r} = 0, t)|^2. \quad (3.30)$$

Die Funktion

$$g(\vec{R}, t) = \left| \frac{\exp[-R^2/|\eta(t)|^2]}{|\eta(t)|^2} \right|^2 \quad (3.31)$$

repräsentiert die Dynamik eines Wellenpaketes aus nichtwechselwirkenden Teilchen mit Masse M . Sie trägt der Schwerpunktsbewegung des Elektron-Lochpaares Rechnung. Diese Funktion beschreibt die räumliche Ladungsträgerverteilung als Gaußfunktion, welche sich mit zunehmender Zeit verbreitert. Die Funktion $|\Phi(\vec{r}, t)|$,

$$\begin{aligned} |\Phi(\vec{r}, t)|^2 &= \left| \sum_{\lambda} \Psi_{\lambda}(\vec{r}) \Psi_{\lambda}^*(\vec{r} = 0) \exp \left[\frac{i}{\hbar}(\Delta - \epsilon_{\lambda})(t - t_0) \right] \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left[- \left((\Delta - \epsilon_{\lambda}) \frac{\tau}{2\hbar} \right)^2 \right] \right|^2, \end{aligned} \quad (3.32)$$

spiegelt dagegen die Relativbewegung zwischen Elektron und Loch wieder. Sie hängt sowohl von den Eigenfunktionen der Wanniergleichung, Glg. (2.98), wie auch vom energetischen Überlapp des einfallenden Pulses mit den Energien der Eigenfunktionen aufgrund der endlichen Pulsdauer τ ab. Formal beschreibt diese Funktion die Dynamik eines Ein-Teilchen Wellenpaketes mit einer deltaförmigen Gestalt im Ort zur Zeit t_0 und der Wellenzahlverteilung[23]

$$\exp \left[- \left((\Delta - \epsilon_{\lambda}) \frac{\tau}{2\hbar} \right)^2 \right].$$

Sie kann als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, Elektron und Loch im Abstand \vec{r} vorzufinden. Da die Schwerpunktsbewegung weder von der Anregungsenergie, noch von der Pulsdauer oder davon abhängt, ob die Teilchen nun coulombkorriert sind oder nicht, müssen die Unterschiede in der Dynamik bei gleichen

Teilchenmassen und gleicher Fokussierung also ausschließlich in der Relativbewegung zu suchen sein!

Offensichtlich sind die Ladungsträgerverteilungen $f^{e/h}$, Glg. (3.29), durch eine Faltung aus Schwerpunkts- ($g(\vec{R})$) und Relativbewegung ($|\Phi(\vec{r}, t)|$) gegeben. Daher ist es auch zu erwarten, daß die attraktive Coulombwechselwirkung die Wellenpaketdynamik nichtwechselwirkender Teilchen wesentlich ändert. Im Gegensatz dazu ist die Exzitonendichte, Glg. (3.30), ein direktes Produkt aus der Schwerpunktsbewegung und der Wahrscheinlichkeit, Elektron und Loch an der gleichen Stelle zu finden, gegeben. Die zugehörige Dynamik kann als die Bewegung eines Elektron-Lochpaares als einzelnes Teilchen mit der Masse $M = m_e + m_h$ aufgefaßt werden.

3.3.1 Frei-Teilchenpropagation

Als nächstes werden mit Hilfe von Glg. (3.29) und (3.30) einige Beispiele für Wellenpaketausbreitungen untersucht. Für die numerische Auswertung werden folgende Parameter benutzt: $\sigma = 1.08\mu m$ oder $\sigma = 0.2\mu m$, $m_v = 0.25m_0$, $m_c = 0.0672m_0$, $t_0 = 0$ und $\tau = 100fs$. Diese entsprechen typischen Eigenschaften eines optisch angeregten GaAs-Quantenfilmes, zum einen mit herkömmlich fokussiertem Licht [11, 12] und zum anderen durch Nahfeldanregungen [10]. Für die weiteren Rechnungen ist der optisch anregende Puls immer um $t_0 = 0ps$ zentriert. Die Lösungen $\Psi_{\vec{\nu}}(\vec{r})$ der Wanniergleichung (2.98) sind ohne Wechselwirkungspotential $V(\vec{r})$ im Ortsraum durch ebene Wellen

$$\Psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} \exp[-i\vec{\nu} \cdot \vec{r}] \quad (3.33)$$

mit den Energien

$$\epsilon_{\nu} = \frac{\hbar^2 \nu^2}{2m_r} \quad (3.34)$$

gegeben, wobei m_r die reduzierte Masse ist. Mit diesen Ausdrücken erhält man für die Ladungsträgerdichten im Fall einer Bandkantenanregung ($\Delta = 0$)

$$f^{e/h}(R) = \frac{\Omega_0^2 \tau m_r \sigma^2}{4\hbar^3 \Delta_{e/h}^2 A} \exp\left(-\frac{R^2}{\Delta_{e/h}^2}\right), \quad (3.35)$$

als Resultat von Glg. (3.21). Die Dynamik wird dabei durch eine sich zeitlich verbreiternde Gaußfunktion beschrieben. Diese Verbreiterung wird durch das zweite Moment $\Delta_{e/h}^2$ der Verteilung, Glg. (3.6), charakterisiert, welches sich aus den beiden Anteilen

$$\Delta_0^2 = \frac{\sigma^2}{2} + \frac{2\hbar^2}{M^2 \sigma^2} (t - t_0)^2 \quad (3.36)$$

und

$$\widehat{\Delta}_{e/h}^2 = \frac{\hbar m_{v/c}^2}{M^2 m_r} \left(\frac{\tau}{2} + \frac{2}{\tau} (t - t_0)^2 \right) \quad (3.37)$$

zusammensetzt. Der erste Beitrag, Δ_0^2 , ist abhängig von der Gesamtmasse M und der Größe σ der Verteilung, welche durch den räumlichen Fokus des Lichtpulses vorgeschrieben wird. Dieser Anteil steht in Bezug zu der Bewegung des Schwerpunktes, verursacht durch den übertragenen Photonenimpuls und ist zur Zeit $t = t_0$ proportional zu σ^{-2} .

In ähnlicher Weise wie die räumlich Breite σ geht die Pulsdauer τ in den zweiten Beitrag $\widehat{\Delta}_{e/h}^2$, vgl. Glg. (3.37), ein. $\widehat{\Delta}_{e/h}^2$ spiegelt den kinetischen Energieübertrag auf das Elektron-Lochpaar aufgrund der spektralen Bandbreite des Pulses wieder. Zur Zeit $t = t_0$ ist $\widehat{\Delta}_{e/h}^2$ proportional zu τ , was wiederum die inverse Breite der Wellenzahlverteilung $f_q = \int d^2R f_q(\vec{R}) = f_q(Q = 0)$ nach dem Puls bestimmt. Der Faktor m_v/m_c zwischen $\widehat{\Delta}_e^2$ und $\widehat{\Delta}_h^2$ in Glg. (3.37) ist verantwortlich für die schnellere Ausbreitung der Elektronen im Vergleich zu den Löchern. Da nun die Näherung nur für Zeiten, die viel länger als die Pulsdauer sind, gültig ist ($\tau \ll t - t_0$), kann der zeitunabhängige Teil von Glg. (3.37) vernachlässigt werden und führt zum Ausdruck:

$$\widehat{\Delta}_{e/h}^2 \approx \frac{\hbar m_{v/c}^2}{M^2 m_r} \frac{2}{\tau} (t - t_0)^2. \quad (3.38)$$

Man beachte, daß für stark fokussierte Pulse $\frac{2\hbar^2}{M^2 \sigma^2} (t - t_0)^2 \gg 1$, der Lichtimpuls ebenfalls signifikant zur Wellenpaketdynamik beiträgt. Im Allgemeinen können sowohl die Fokussierung wie auch die Pulsdauer die Dynamik bestimmen und typische Ausbreitungszeiten festlegen. Welcher der beiden Anteile dominiert, hängt wiederum von der konkreten Wahl der Parameter σ und τ ab.

Zur Illustration der analytische Lösung zeigt Abb. 3.7 das räumlich Profil der Elektronendichte gemäß Glg.(3.35) für unterschiedliche Zeiten nach der optischen Anregung zur Zeit $t = 0fs$ und die Fokussierungen von $\sigma = 0.2\mu m$ (Abb. 3.7.a) und $\sigma = 1.08\mu m$ (Abb. 3.7.b)). Es ist deutlich erkennbar, daß im Fall starker Fokussierung ($\sigma = 0.2\mu m$) die Dynamik aufgrund des Lichtimpulses $\sim \sigma^{-2}$ wesentlich schneller ist als bei schwach fokussierten Pulsen ($\sigma = 1.08\mu m$). In beiden Fällen zeigt die Zeitableitung des zweiten Momentes der Verteilung $\frac{d}{dt} \Delta_{e/h}^2(t) \sim t$ eine lineare Zeitabhängigkeit - ein Indiz für das ballistische Transportregime [6].

Die Relativbewegung $|\Phi(\vec{r}, t)|^2$ der nichtwechselwirkenden Elektronen und Löcher, vgl. Glg. (3.32), ist in Abb. 3.8.a) gezeigt. Es ist eine Trennung der Elektronen und Löcher aufgrund unterschiedlicher Geschwindigkeiten erkennbar. Aus Gründen der Teilchenzahlerhaltung nimmt daher auch das Maximum bei $r = 0$, wo die Teilchen optisch generiert wurden, ab.

3.3.2 Coulombkorrelierte Zustände

In diesem Abschnitt wird die Wellenpaketausbreitung für die Anregung von gebundenen und ungebundenen Elektron-Lochpaaren analysiert. Die gebundenen (Exzitonen) und ungebundenen (Kontinuum) Eigenzustände und Energien sind

durch die Lösung von Glg. (2.98) gegeben, vgl. (B.16) und (B.17). Aufgrund der

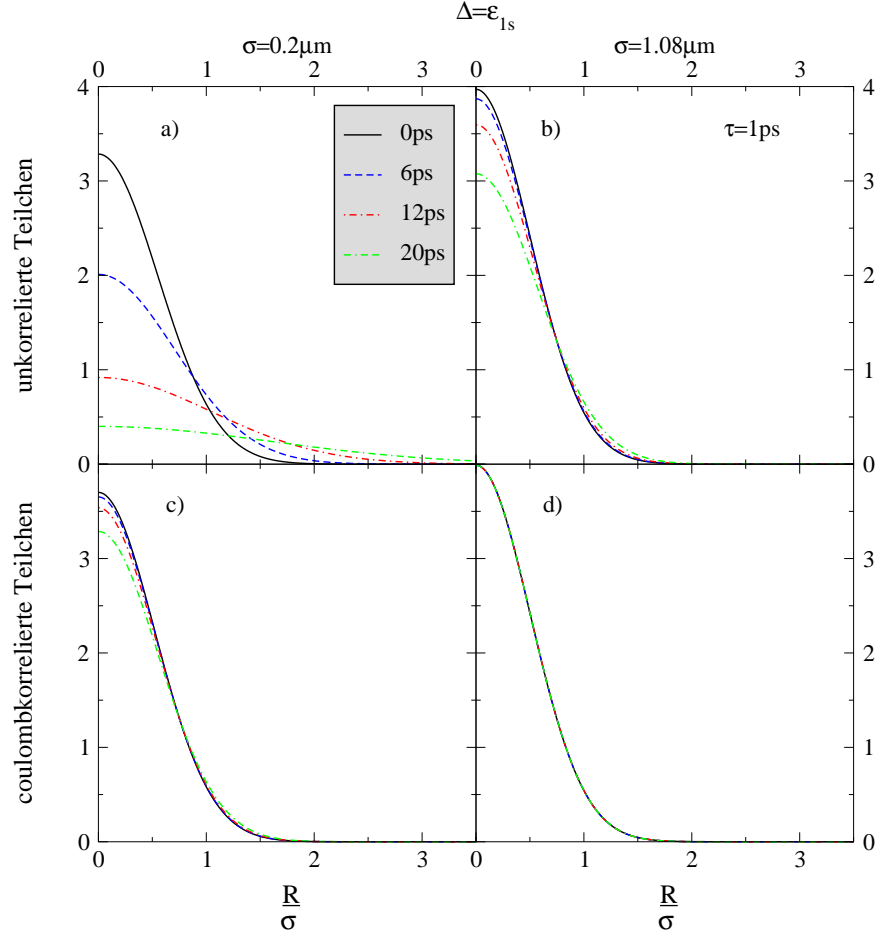


Abbildung 3.3: Ortsverteilungen der Elektronendichte bei Anregung am 1s-Exziton. Verglichen wird die räumliche Propagation für nichtwechselwirkende Elektronen (a,b) mit der von coulombkorrelierten Elektron-Lochpaaren(c,d). Die Anregung erfolgte energetisch schmal mit einem 1ps Puls.

azimutalen Symmetrie in den Anregungsbedingungen tragen nur Zustände mit $m = 0$ bei. Doch selbst mit dieser Einschränkung notwendiger Quantenzahlen ist es nicht möglich, das Problem in vollem Umfang analytisch zu lösen. Um stabile numerische Resultate zu erhalten, wird Glg. (3.32) mit ca. 20000 unterschiedlichen ungebundenen und ca. 200 gebundenen Eigenzuständen berechnet.

3.3.2.1 Anregungen am Exziton

Als erstes wird die Anregung an der niedrigsten Resonanz im System, dem 1s-Exziton, betrachtet. Dabei wird die Dynamik der freien Elektronen der coulomb-

korrelierter Elektron-Lochpaare gegenübergestellt (Abb. 3.3). Es kann beobachtet werden, daß die Ortsverteilungen durch gaußförmige Kurven beschrieben werden, welche sich mit der Zeit verbreitern. Vergleicht man nun den Einfluß des Anregungsgebietes σ und den der attraktiven Coulombwechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern, so sind zwei Merkmale beobachtbar:

- Eine stärker fokussierte Anregung verursacht eine schnellere Propagation. Die trifft sowohl bei der freien Elektronendynamik (Abb. 3.3.a,b)) wie auch bei den korrelierten Elektron-Lochpaaren (Abb. 3.3.c,d) zu.
- Die Propagation erfolgt bei den coulombkorrelierten Teilchen wesentlich langsamer als für freie Teilchen. Dabei ist die Dynamik im Fall der $1.08\mu\text{m}$ -Anregung auf einer 20ps - Zeitskala nicht mehr beobachtbar.

Das Verhalten der nichtwechselwirkenden Elektronen wurde bereits anhand der analytischen Lösung im letzten Abschnitt erklärt. Daher ist bekannt, daß die Dynamik im Fall der $1.08\mu\text{m}$ Fokussierung primär durch Pulslänge und damit die Relativimpulsverteilung bestimmt wird. Aufgrund der Pulsverstimmung werden in diesem Fall nur Zustände angeregt, welche näher an der Bandkante liegen als bei Bandkantenanregung, wodurch die Propagation langsamer erfolgt. Der übertragene Schwerpunktsimpuls durch die räumlich inhomogene Situation kann bei dieser Fokussierung nahezu vernachlässigt werden.

Bei den coulombkorrelierten Zuständen ist aufgrund der spektral schmalen Anregung zudem davon auszugehen, daß nur kohärente 1s-Exzitonen optisch generiert wurden. Reduziert man also zur analytischen Beschreibung die Summe über alle Exzitonenzustände auf den 1s-Zustand und nimmt anstelle der zweidimensionalen Exziton-Wellenfunktion

$$\Psi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{8}{\pi a_0^2}} \exp\left[-\frac{2r}{a_0}\right],$$

wobei a_0 den Exziton-Bohrradius kennzeichnet, den folgenden Ausdruck

$$\Psi_{1s}(r) = \frac{\beta}{a_0} \exp\left[-\frac{r^2}{a_0^2}\right] \quad (3.39)$$

an, so kann das Integral Glg. (3.32) analytisch ausgewertet werden. β wurde aus Normierungsgründen $\beta = \sqrt{2/\pi}$ gesetzt. Das daraus resultierende analytische Ergebnis für die Elektron- und Lochdichte lautet

$$f^{e/h} = \frac{4\beta^2 \Omega_0^{+2} \pi^2 \tau^2 \sigma^2}{A\hbar^2} |\Psi_{1s}(r=0)|^2 \frac{\exp\left[-\frac{R^2}{\Delta_0^2 + \overline{\Delta}_{e/h}^2}\right]}{\Delta_0^2 + \overline{\Delta}_{e/h}^2}, \quad (3.40)$$

wobei das zweite Moment die Beiträge Δ_0^2 , vgl. Glg. (3.36), und

$$\overline{\overline{\Delta}}_{e/h}^2 = \frac{a_0^2 m_v^2 / c}{8M^2}. \quad (3.41)$$

enthält. Δ_0^2 beschreibt die ballistische Exzitonpropagation, wobei ein Elektron-Lochpaar als Einheit angesehen wird. Der zweite Beitrag, $\overline{\overline{\Delta}}_{e/h}^2$, hängt unter-

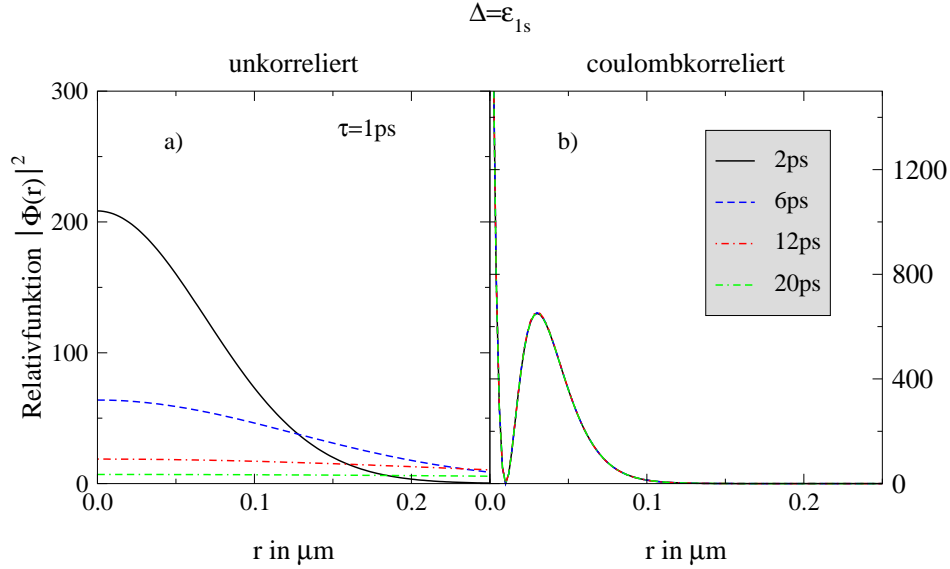


Abbildung 3.4: Relativfunktion für wechselwirkende und nichtwechselwirkende Teilchen.

schiedlich von der Elektron- und Lochmasse ab und ist Ausdruck des räumlichen Feldgradienten (wenn $\frac{\sigma^2}{2} < \frac{a_0^2 m_v / c}{8M^2}$) über die interne exzitonische Struktur mit Ausdehnung a_0 .

Im Folgenden werden auf den betrachteten Zeitskalen zwei Fälle diskutiert:

- räumlich breite Anregungen $\frac{\sigma^2}{2} \gg \frac{2\hbar^2}{M^2\sigma^2}(t - t_0)^2$
- räumlich schmale Anregungen $\frac{\sigma^2}{2} \approx \frac{2\hbar^2}{M^2\sigma^2}(t - t_0)^2$

Die erste Situation liegt für räumlich Breiten von $\sigma = 1.08\mu m$ vor. Als Konsequenz ist eine langsame Dynamik zu beobachten, vgl. Abb. (3.3d). Weiterhin gilt $\Delta_0^2 \gg \overline{\overline{\Delta}}_{e/h}^2$. Aus diesem Grund zeigen auch die Elektron- und Lochverteilungen nur geringfügige Unterschiede im Ortsraum, welche aufgrund der langsamen Dynamik nahezu zeitunabhängig sind. Dieses Regime wurde bereits in [8] untersucht.

Die zweite Situation ist für $\sigma = 0.2\mu\text{m}$ auf einer Pikosekunden Zeitskala zu finden, wo eine schnellere Dynamik beobachtet werden kann, Abb. 3.3.c). Ausserdem besitzen $\overline{\Delta}_{e/h}^2$ und Δ_0^2 die gleiche Größenordnung. Daher sind auch die Differenzen zwischen den Elektron- und Lochverteilungen beträchtlich größer.

Ursächlich für dieses Verhalten ist die Relativfunktion, Glg. (3.32). Während im Fall nichtwechselwirkender Teilchen diese eine deutliche Verbreiterung zeigt, Abb. 3.4.a), ist sie im Fall der coulombkorrelierten Elektronen und Löcher nahezu zeitlich konstant. Dies impliziert, daß ohne Wechselwirkung die Elektronen und Löcher eine räumliche Trennung erfahren, was aufgrund der verschiedenen Massen auch zu erwarten ist. Die Coulombanziehung hat jedoch zur Folge, daß sich Elektronen und Löcher nicht mehr beliebig weit voneinander entfernen können. Der Anziehung wirkt die unterschiedlich schnelle Propagation entgegen, so daß sich ein mittlerer Abstand der Elektronen von den Löchern von ungefähr 30nm einstellt, vgl. Abb. 3.4.b). Da die Relativfunktion zeitlich konstant ist, kann die räumliche Dynamik ausschließlich über die Schwerpunktsbewegung erfolgen, welche naturgemäß sehr langsam ist.

Die kohärente exzitonische Dichte, Glg. (3.24), kann ebenfalls analytisch berechnet werden:

$$N(R) = \frac{2\pi\sigma^2\tau^2\Omega_0^{+2}}{\hbar^2} |\Psi_{1s}(r=0)|^4 \frac{e^{-R^2/\Delta_0^2}}{\Delta_0^2}. \quad (3.42)$$

Deren Dynamik ist vollständig durch die Schwerpunktsbewegung bestimmt, vgl. Glg. (3.36). Wiederum können zwei Fälle unterschieden werden.

- (i) Zum einen, bei Annahme einer schwach fokussierten Anregung $\sigma = 1.08\mu\text{m}$, kann die Argumentation der coulombkorrelierten Elektronen und Löcher einfach übertragen werden. Die korrespondierende Dynamik gleicht Abb. 3.3.d).
- (ii) Eine starke Fokussierung, $\sigma = 0.2\mu\text{m}$, resultiert in einem kleineren zeitunabhängigen Anteil in Δ_0^2 und verursacht so eine schnelle Dynamik auf einer 10ps Zeitskala.

3.3.2.2 Anregungen oberhalb der Bandkante

Auch die Situation bei Anregung oberhalb der Bandkante ist einfach zu verstehen. In diesem Fall kann bei spektral hinreichend schmaler Anregung davon ausgegangen werden, daß kein energetischer Überlapp mit den gebundenen Zuständen vorliegt. Erfolgt die Anregung außerdem hinreichen hoch im Band, so nähern sich die exakten Lösungen der Wanniergleichung für die Streuzustände ebenen Wellen an. Damit ist natürlich eine äquivalente Dynamik verbunden. In Abb. 3.5 ist dieses Verhalten deutlich zu sehen. Dabei ist erkennbar, daß im Fall der starken Fokussierung die Dynamik wiederum wesentlich schneller abläuft. Ein Vergleich

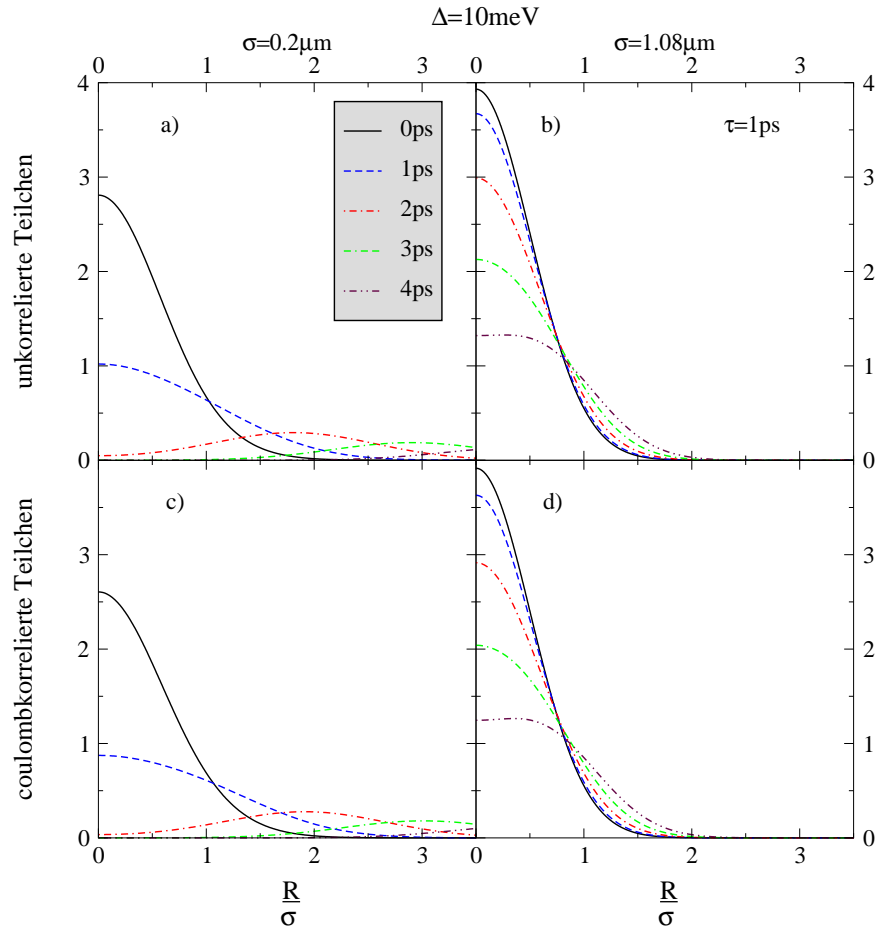


Abbildung 3.5: Ortsverteilungen der freien und coulombkorrelierten Elektronendichte für einen $\tau = 1ps$ Puls und einer spektralen Anregung oberhalb der Bandkante.

der Zeitskalen der Anregungen am 1s-Exziton und hoch im Band zeigt, daß die Propagation hier wesentlich schneller abläuft. Weiterhin ist eine Deformation des Wellenpaketes erkennbar, was in der Folge zu einer Torusstruktur führt. Beide Effekte können anhand der Relativwellenfunktion $|\Phi(\vec{r})|^2$, Abb. 3.6, erklärt werden. Zunächst sind diese für freie Elektronen, Abb. 3.6.a), und coulombwechselwirkende Elektron-Lochpaare, Abb. 3.6.b), identisch. Das ist aufgrund der identischen Dynamik im Ortsraum auch zu erwarten gewesen. Im Vergleich zu einer Anregung am 1s-Exziton, vgl. Abb. 3.4, ist hier jedoch zu beobachten, wie das Maximum der Relativwellenfunktion zu endlichen Abständen wandert und dabei in der Amplitude abnimmt. Die Abnahme der Amplitude ist einfach eine Folge der Normierung im Zweidimensionalen. Die Verschiebung des Maximums hängt dagegen mit der Überschußenergie der optischen Anregung in Bezug auf die Bandkante zusammen. Diese resultiert in einer räumlichen Trennung von

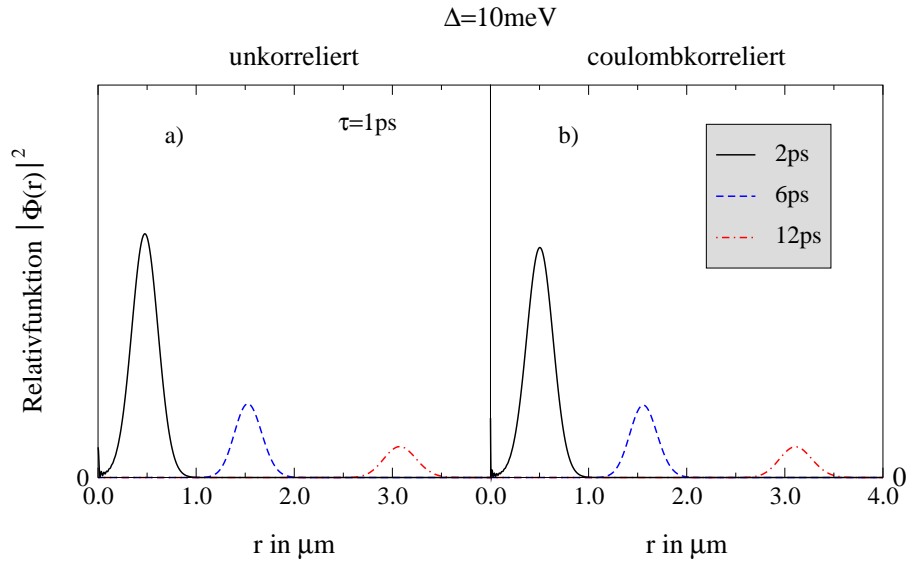


Abbildung 3.6: Relativfunktion im Fall der Anregung oberhalb der Bandkante mit einem 1ps Puls.

Elektronen und Löchern. Bei hinreichend hohen Energien ist dann der kinetische Anteil in der Relativbewegung so dominant, daß vom Einfluß der Coulombwechselwirkung nicht mehr viel zu spüren ist und die Dynamik der freien Teilchen gleicht.

3.3.2.3 Anregungen an der Bandkante

Die Anregung an der Bandkante ist insofern ein Sonderfall, da nun sowohl gebundene, wie auch ungebundene Zustände angeregt werden. Die Näherung, daß man sich auf einzelne Exzitonen oder Kontinuumszustände zurückziehen kann, ist hier nicht mehr gültig. In der Ortsverteilung der Elektronendichte, Abb. 3.7, sind wiederum die Zeitentwicklungen für die beiden Fälle nichtwechselwirkender und coulombkorrelierter Teilchen bei unterschiedlichen Fokussierungen dargestellt. Dabei ist im Fall der frei beweglichen Elektronen, Abb. 3.7.a-b), ein qualitativ gleiches Verhalten zu beobachten wie bei der Anregungen an der $1s$ -Resonanz. Allerdings erfolgt die Verbreiterung hier wesentlich schneller. Dies wird durch den unterschiedlichen energetischen Überlapp des anregenden Pulses mit den Wellenfunktionen verursacht. Aufgrund der in diesem Fall höheren Anregungsenergie werden nun mehr Zustände oberhalb der Bandkante angeregt, was in der Folge zu einer schnelleren Dynamik führt. Dabei erfolgt jedoch keine vollständige Ladungstrennung wie bei Anregungen oberhalb der Bandkante und nichtwechselwirkenden Teilchen, wie anhand der Relativfunktion, Abb. 3.8.a) gesehen werden kann, vgl. auch Abb. 3.6.a). Die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron und Loch am

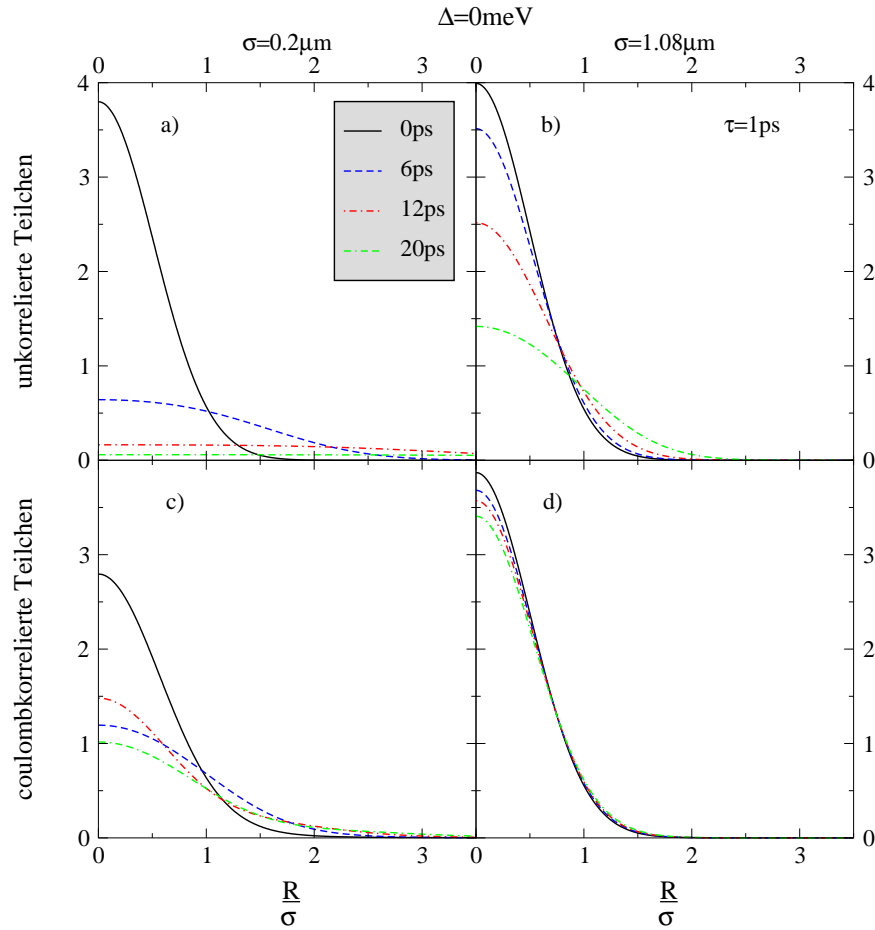


Abbildung 3.7: Ortsverteilungen der freien und coulombkorrelierten Elektrondichte für einen $\tau = 1ps$ Puls und einer spektralen Anregung an der Bandkante.

selben Ort vorzufinden ($r=0$), bleibt auch bei großen Zeiten maximal. Aufgrund der höheren mittleren Energien der Teilchen im Vergleich zur Anregung an der Exzitonresonanz wird die Relativfunktion aber schneller breiter, was Ausdruck der räumlichen Ladungstrennung ist.

Die Situation der coulombwechselwirkenden Elektronen und Löcher zeigt dagegen ein komplizierteres Verhalten. So weist die Ortsverteilung bei schwacher Fokussierung von $\sigma = 1.08\mu m$, Abb. 3.7.d), eine sehr viel langsamere Dynamik als im Fall nichtwechselwirkender Teilchen auf. Reduziert man das Anregungsgebiet auf $\sigma = 0.2\mu m$, so sind zusätzlich Fluktuationen in der räumlichen Breite der Verteilung zu erkennen. Die Ursache dieser Erscheinung muß in der Relativbewegung der Elektronen und Löcher, Abb. 3.8.b), zu suchen sein. Diese zeigt ein völlig neues Verhalten als bisher:

- Die Verteilung besitzt eine sehr starke Spitze bei einem Elektron-Loch-

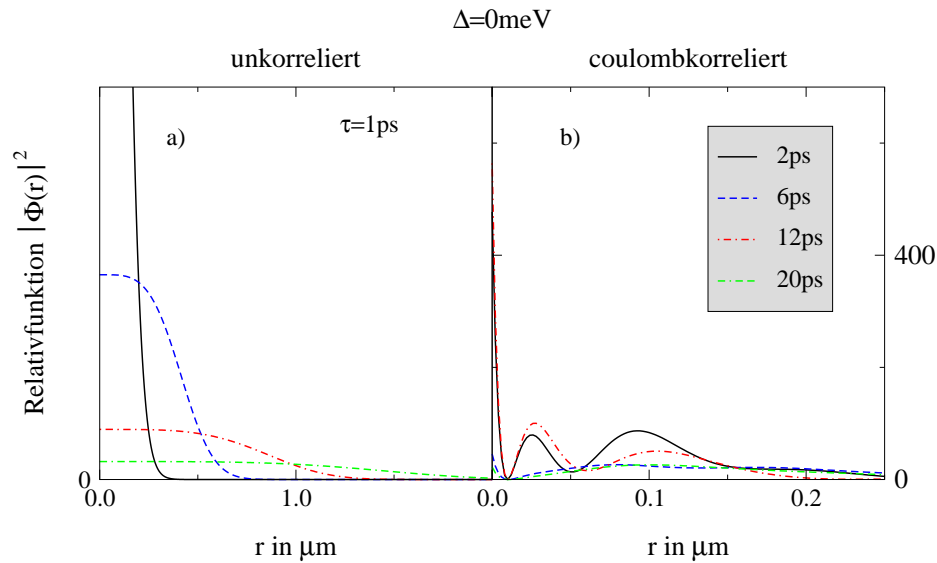


Abbildung 3.8: Ortsverteilungen der freien und coulombkorrelierten Elektronendichte für einen $\tau = 1\text{ps}$ Puls und einer spektralen Anregung an der Bandkante.

abstand von $r = 0$. Dieses Maximum nimmt im Verlauf der Zeit zwar ab, verschwindet aber nicht völlig. Physikalisch bedeutet das, daß sich die Elektronen nicht von den Löchern lösen. Es muß sich hier um die Beteiligung von gebundenen Zuständen, also Exzitonen, handeln.

- Bei einem endlichen Elektron-Lochabstand ist ebenfalls ein endliche Wahrscheinlichkeit zu beobachten. Diese Wahrscheinlichkeit oszilliert jedoch, wobei sie ständig breiter wird. Die damit verbundene räumliche Trennung der Elektronen und Löcher läßt auf die Beteiligung von Kontinuumszuständen schließen. Die auftretenden Oszillationen können innerhalb dieser Erklärung als Interferenz der verschiedenen gebundenen und ungebundenen Zustände interpretiert werden. Damit ist aber physikalisch ebenfalls eine Fluktuation im Abstand der Elektronen und Löcher verbunden. Diese Schwankungen sind letztendlich in der Ortsverteilung als „Atmen“ der Verteilung beobachtbar.

Beim Versuch, dieses Verhalten analytisch zu beschreiben, werden zwei Näherungen angewandt:

1. Die gebundenen Zustände werden durch das 1s-Exziton als einzige Resonanz beschrieben.
2. Die Kontinuumszustände werden durch ebene Wellen angenähert.

Durch diese Annahmen ist es möglich, die Relativwellenfunktion analytisch zu bestimmen. Dabei tauchen die Anteile von den ebenen Wellen

$$\sum_{\lambda} \Big|_{\text{ebene Wellen}} = \frac{1}{4\pi a_0^2} \frac{\exp[-r^2/4D]}{D} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Delta \cdot (t - t_0) - \frac{\Delta^2 \tau^2}{4\hbar^2} \right] \quad (3.43)$$

mit

$$D = E_0 \left(\frac{\tau}{4\hbar} - \frac{\Delta \tau^2}{2\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} (t - t_0) \right) \quad (3.44)$$

und vom 1s-Exziton

$$\sum_{\lambda} \Big|_{1s} = \frac{2}{\pi a_0^2} e^{-r^2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\Delta - \epsilon_{1s})(t - t_0) - (\Delta - \epsilon_{1s})^2 \frac{\tau^2}{4\hbar^2} \right]. \quad (3.45)$$

auf. Da beide Beiträge komplexwertig sind, tritt ein Interferenzterm $2\Re$ in Glg. (3.32) auf. Er ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \Re &= E_0 \left[\left(\frac{\tau}{4\hbar} - \frac{\Delta \tau^2}{2\hbar^2} \right) \cos(\Omega \cdot (t - t_0)) + \frac{1}{\hbar} (t - t_0) \sin(\Omega \cdot (t - t_0)) \right] \\ &\quad \times \frac{\exp \left[-\frac{r^2}{4|D|^2} \left(\frac{\tau}{4\hbar} - \frac{\Delta \tau^2}{2\hbar^2} \right) \right]}{|D|^2} \end{aligned} \quad (3.46)$$

mit der Frequenz

$$\Omega = r^2 \frac{5E_0(t - t_0)}{4|D|^2 \hbar}. \quad (3.47)$$

E_0 kennzeichnet die dreidimensionale Exzitonbindungsenergie, vgl. Anhang Glg. (B.18), und Δ steht für die energetische Verstimmung des anregenden Pulses zur Bandkante. Wenn diese Beschreibung korrekt ist, dann muß ein direkter Zusammenhang der räumlichen Fluktuationen mit der Stärke der Coulombwechselwirkung existieren.

3.3.2.4 Das zweite Moment der Ortsverteilung bei coulombkorrelierten Zuständen

Für die Untersuchung der im letzten Abschnitt beobachteten Fluktuationen der räumlichen Breite ist die Ortsverteilung schlecht geeignet, da sie nur die Information der räumlichen Breite zu bestimmten Zeiten enthält. Das zweite Moment der Verteilung enthält jedoch genau diese Information für alle Zeiten und ist daher die ideale Größe, um den Zusammenhang zwischen der Stärke der Coulombwechselwirkung mit der Frequenz der Oszillation zu untersuchen. Abbildung 3.9.a) zeigt das zweite Moment der Ortsverteilungen zunächst einmal für eine Exzitonbindungsenergie von $E_0 = -4meV$ und verschiedenen spektralen Anregungen. Abgesehen von den leichten Oszillationen, welche im Anschluß betrachtet werden sollen, ist folgendes Verhalten sichtbar:

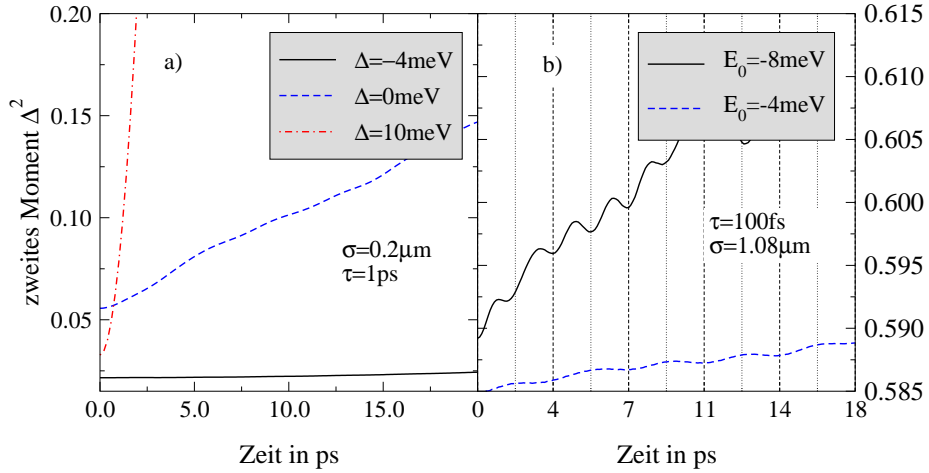


Abbildung 3.9: Das zweite Moment coulombkorrelierter Zustände

- Mit zunehmender Anregungsenergie steigt das zweite Moment immer schneller an. Dieser Effekt ist ganz klar ein Folge des spektralen Überlapps des Lichtpulses mit den zu diesen Energien zugehörigen Wellenfunktionen.
- Der Anstieg *scheint* linear zu sein. Dies ist jedoch vermutlich nur aufgrund der kurzen Zeitskalen so! Wie bereits analytisch gezeigt werden konnte, liegt sowohl im Fall der ausschließlichen Anregung der 1s-Resonanz wie auch bei Anregungen hoch im Band eine quadratische Abhängigkeit vor. Es ist unwahrscheinlich, daß im mittleren Regime plötzlich ein anderes Verhalten auftreten soll. Begünstigt wird dieser Effekt durch die langen Zeitskalen (100ps), auf denen die Schwerpunktsbewegung stattfindet.
- Der Anfangswert des zweiten Momentes zeigt ein nichtmonotones Verhalten. Der Anstieg und anschließende Abfall kann ebenfalls ein Folge der Überlagerung der Zustände, also ein Interferenzeffekt sein. Der Interferenzterm in der Relativfunktion, Glg. (3.46), weist nämlich selbst bei $t = t_0$, also zum Zeitpunkt der Anregung, eine Abhängigkeit von der Pulsverstimmung zu Bandkante auf.

In Abbildung 3.9.b) wurde die Abhängigkeit des zweiten Momentes von der dreidimensionalen Bindungsenergie E_0 bei einer Bandkantenanregung dargestellt. Dabei ist deutlich eine Frequenzverdopplung bei Verdopplung der Bindungsenergie erkennbar, was die bisherige Theorie über die Ursache der Oszillationen stützt. Der nun stärkere Anstieg bei der größeren Bindungsenergie kann auf den kleineren Überlapp des anregenden Pulses mit der nun weiter entfernt liegenden Exzitonresonanz zurückgeführt werden. Dadurch werden im Verhältnis zu den gebundenen Exzitonen die Kontinuumszustände stärker gewichtet, was zu einer schnelleren Verbreiterung führt.

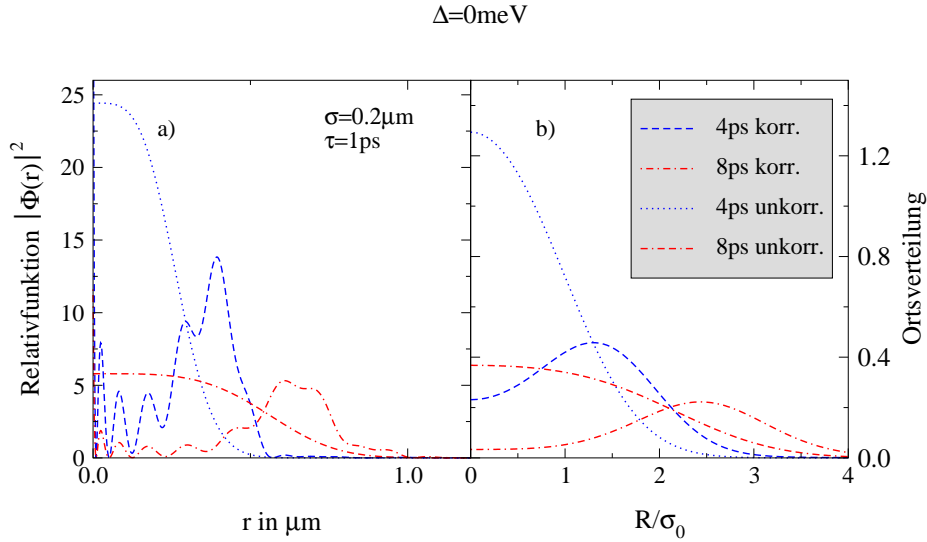


Abbildung 3.10: Ortsverteilung und Relativfunktion von Kontinuumszuständen

3.3.2.5 Dynamik ungebundener Zustände

Die Ergebnisse der Untersuchungen an den Ortsverteilungen zeigen eigentlich schon, daß im Fall einer Bandkantenanregung die Kombination von gebundenen und ungebundenen Zuständen eine wesentliche Rolle spielt. Um diesen Aspekt noch weiter zu verschärfen, wird nun angenommen, daß es hinreichend wäre, Bandkantenanregungen durch die ausschließliche Verwendung von Kontinuumszuständen zu beschreiben.² In Abb. 3.10.b) ist der Vergleich zu freien Elektronen gezeigt. Während die unkorrelierten Ladungsträger die bereits bekannte Gaußstruktur mit der entsprechenden Verbreiterung aufweisen, ist bei den coulombwechselwirkenden Elektronen die Ausbildung einer torusartigen Struktur auffällig.

Diese unterschiedlichen Charakteristika in der Dynamik wechselwirkender und nichtwechselwirkender Elektron-Lochpaare kann wie folgt verstanden werden: Indem man die Coulombwechselwirkung einschaltet, verschiebt sich die Grundzustandsenergie, welche im Fall nichtwechselwirkender Teilchen der Bandkantenenergie entspricht, zur niedrigsten Exzitonresonanz im System. Aus diesem Grund entspricht eine Bandkantenanregung im Fall wechselwirkender Teilchen einer Anregung mit einer Überschußenergie in der Größe der Bindungsenergie des 1s-Exzitons. Diese Überschußenergie ist in einem Maxima bei endlichen Wellenzahlen in der entsprechenden Verteilung zu sehen und führt so zu der beobachteten torusartigen Struktur des Wellenpaketes im Ortsraum.

Detailliertere Informationen können gewonnen werden, wenn man sich die Re-

²Da die Effekte bei einer starken Fokussierung stärker hervortreten, wird $\sigma = 0.2\mu\text{m}$ gewählt. Die beobachteten Effekte sind jedoch keine Folge der Fokussierung!

lativbewegung von Elektronen und Löchern, $|\Phi(\vec{r}, t)|^2$, betrachtet, Glg. (3.32). Abb. 3.10.a) zeigt die Zeitentwicklung von $|\Phi(\vec{r}, t)|^2$ in Anwesenheit der Coulombwechselwirkung. Zur Zeit $t = 0$ ist ein scharfes Maximum um $r = 0$ zu finden, ein Zeichen, daß Elektronen und Löcher optisch an der gleichen Position generiert wurden, ähnlich wie im nichtwechselwirkenden Fall. Mit zunehmender Zeit wird das Maximum kleiner, verschiebt sich zu endlichen Distanzen und zeigt so die Trennung von Elektronen und Löchern, welche ihre Korrelation verlieren. Die wellenartige Struktur in der Relativfunktion wird vermutlich durch die unvollständige Basis verursacht, was in strukturierten Elektron-Lochabständen zu sehen wäre.

Die Abnahme bei $r = 0$ ist wiederum eine Konsequenz des Verlustes der Korrelation von Elektronen und Löchern nach ihrer korrelierten optischen Anregung bei $r = 0$, welche sich mit zunehmender Zeit räumlich trennen. Da sich die Elektron(Loch)dichte durch eine Faltung der Relativ- und Schwerpunktsbewegung, Glg. (3.29), berechnet, ist daher die torusartige Struktur im Ortsraum zu sehen.

3.4 Exzitonische Systeme

In diesem Kapitel soll die Dynamik von exzitonischen Wellenpaketen untersucht werden. Dabei wird angenommen, daß durch eine spektral schmale Anregung an der niedrigsten Exzitonresonanz auch nur 1s-Exzitonen zu dieser Dynamik beitragen, womit die Summe über die möglichen Zustände in den Bewegungsgleichungen (2.115), (2.118) und (2.117) entfällt. Obwohl die Gleichungen jetzt im strengen Sinne die Dynamik der Entwicklungskoeffizienten der Exzitonendichte (Polarisation) des 1s-Zustandes beschreiben, wird dieser aus praktischen Gründen auch weiterhin als Exzitondichte bezeichnet.

Begonnen wird die Untersuchung mit dem Versuch, einen Teilaspekt des Problems, die Exziton-Phononstreuung, auf analytischem Weg zu analysieren. Da diese jedoch durch eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung beschrieben wird, ist dieser Versuch nur teilweise erfolgreich. Anschließend erfolgt die Auswertung der numerischen Ergebnisse, welche anhand der Orts-, Relativimpuls- und Winkelverteilung erfolgt (vgl. Abschnitt 3.1).

3.4.1 Analytisch lösbare Modellsysteme

3.4.1.1 Exziton-Phonon Streuung – Der Zusammenhang zwischen der räumlich homogenen und inhomogenen Lösung der Problems

Schreibt man die Anteile der Exziton-Phononstreuung von Glg. (2.117) in Relativ- und Schwerpunktskoordinaten

$$\begin{aligned}\vec{Q} &= \vec{Q}' - \vec{Q} \\ \vec{q} &= \frac{\vec{Q}' + \vec{Q}}{2},\end{aligned}\tag{3.48}$$

so kann man diese in folgende Gestalt bringen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} N(\vec{Q}, \vec{q}, t) \Big|_{phon} &= - \sum_{\vec{k}\lambda, \sigma=\pm 1} \left[N(\vec{Q}, \vec{q}, t) w_{\sigma} \left(\vec{q} + \lambda \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{k} \right) \right. \\ &\quad \left. - N(\vec{Q}, \vec{q} + \sigma \vec{k}, t) w_{-\sigma} \left(\vec{q} + \sigma \vec{k} + \lambda \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{k} \right) \right]\end{aligned}\tag{3.49}$$

Dabei wird der Querstrich, der in Glg. (3.48) aus Gründen der Unterscheidbarkeit für den Schwerpunktsimpuls benutzt wurde, hier und in allen folgenden Gleichungen weggelassen. Die Streuraten $w_{\sigma}(\vec{q}, \vec{k})$ sind dabei definiert als

$$w_{\sigma}(\vec{q}, \vec{k}) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k_z} |D(k, k_z)|^2 \left(n_{k, k_z} + \frac{1 - \sigma}{2} \right)$$

$$\times \xi \left(\epsilon_{|\vec{q}+\sigma\vec{k}|} - \epsilon_{|\vec{q}|} - \sigma \hbar \omega_{k,k_z} \right). \quad (3.50)$$

Die Funktion $\xi(x)$ ist allgemein durch

$$\xi(x) = \int_0^\infty e^{-\frac{i}{\hbar}xt} dt \quad (3.51)$$

gegeben. Um diese Anteile zumindest halbwegs vernünftig beschreiben zu können, müssen Näherungen in dem System der gekoppelten Gleichungen vorgenommen werden. Dazu wird eine Entwicklung der Gleichungen nach dem Phononenimpuls \vec{k} durchgeführt. Dies ist möglich, da dieser klein gegen typische Elektronenimpulse $k \ll q$ ist. Gleichung (3.49) nimmt dadurch die Gestalt

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N(\vec{Q}, \vec{q}, t) \right|_{phon} = \sum_{\vec{k}\lambda, \sigma=\pm 1} \left[-\sigma \vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q + (\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)^2 \right] N(\vec{Q}, \vec{q}, t) w_\sigma \left(\vec{q} + \lambda \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{k} \right) \quad (3.52)$$

an. Dies ist die „Fokker-Planck“ Gleichung für ein räumlich inhomogenes System[24]. Wie schon im räumlich homogenen Fall kann sie auch hier in Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t N(\vec{Q}, \vec{q}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{Q}, \vec{q}, t) \quad (3.53)$$

geschrieben werden. Damit ist sofort ersichtlich, daß im betrachteten System die Exzitonenzahl bei der Exziton-Phonon Streuung erhalten bleibt. Aufgrund der Badnäherung bei den Phononen ist dies auch die einzige erhaltene Größe. Eine ausführliche Diskussion der Eigenschaften der Fokker-Planck Gleichung ist in [25] zu finden. Die Fouriertransformation von Gleichung (3.52) in der Zeit liefert sofort die Eigenwertgleichung für den Fokker-Planck Operator.

$$\lambda N_\lambda(\vec{Q}, \vec{q}, t) = \sum_{\vec{k}\lambda, \sigma=\pm 1} \left[-\sigma \vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q + (\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)^2 \right] N_\lambda(\vec{Q}, \vec{q}, t) w_\sigma \left(\vec{q} + \lambda \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{k} \right) \quad (3.54)$$

mit $\lambda = -iw$. Kennt man die Eigenfunktionen N_λ zum Eigenwert λ , so ist das Problem prinzipiell gelöst. Da jedoch der Fokker-Planck Operator nichthermitisch ist, werden auch die Eigenfunktionen zum hermitisch adjungierten Operator benötigt, um ein binormales Satz an Eigenfunktionen zu haben. Zur Konstruktion dieses Operators bzw. der zugehörigen Eigenfunktionen ist jedoch die Kenntnis der stationären Verteilung $N_0(\vec{q})$ notwendig. Daher wird im Folgenden versucht, zunächst diese zu bestimmen.

3.4.1.1.1 Die stationäre Lösung - räumlich homogene Systeme Im räumlich homogenen Fall ($\vec{Q} = 0$) ist die stationäre Verteilung gemäß Glg. (3.53)

gewiß dann gegeben, falls die Stromdichte \vec{j} identisch verschwindet und eine nicht-triviale Lösung für das resultierende System der folgenden partiellen Differentialgleichungen erster Ordnung gefunden werden kann:

$$\sum_{\vec{k}, \sigma = \pm 1} \left[-\sigma \vec{k} + \frac{\vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)}{2} \right] w_\sigma(\vec{q}, \vec{k}) N^0(\vec{q}) = 0 \quad (3.55)$$

Wertet man den Differentialoperator aus, so gelangt man zu der Gleichung

$$\sum_j A_{ij}(\vec{q}) \frac{\partial}{\partial q_j} N_0(\vec{q}) + C_i(\vec{q}) N_0(\vec{q}) = 0, \quad (3.56)$$

wobei die Größen $A_{ij}(\vec{q})$ und $C_i(\vec{q})$ ($i, j = x, y$) wie folgt definiert sind:

$$A_{ij}(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}, \sigma = \pm 1} \frac{k_i k_j}{2} w_\sigma(\vec{q}, \vec{k}) \quad (3.57)$$

$$C_i(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}, \sigma = \pm 1} k_i \left[-\sigma + \frac{\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q}{2} \right] w_\sigma(\vec{q}, \vec{k}) \quad (3.58)$$

Die zugehörige Matrixgleichung wird nun in den Variablen $p = \frac{\partial}{\partial q_x} N^0(\vec{Q}, \vec{q})$ und $q = \frac{\partial}{\partial q_y} N^0(\vec{Q}, \vec{q})$ diagonalisiert und man erhält:

$$p = -f(q_x, q_y) N^0(q_x, q_y) \quad (3.59)$$

$$q = -g(q_x, q_y) N^0(q_x, q_y) \quad (3.60)$$

mit den Funktionen

$$f(q_x, q_y) = \frac{A_{yy} C_x - A_{xy} C_y}{A_{xx} A_{yy} - A_{xy} A_{yx}} \quad (3.61)$$

$$g(q_x, q_y) = \frac{A_{xx} C_y - A_{yx} C_x}{A_{xx} A_{yy} - A_{xy} A_{yx}} \quad (3.62)$$

Mit Hilfe der Definitionen (3.57) und (3.58) können außerdem die Relationen

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial q_x} A_{xy}(q_x, q_y) &= \frac{\partial}{\partial q_y} A_{xx}(q_x, q_y) \\
\frac{\partial}{\partial q_y} A_{xy}(q_x, q_y) &= \frac{\partial}{\partial q_x} A_{yy}(q_x, q_y) \\
\frac{\partial}{\partial q_x} A_{xx}(q_x, q_y) &= \frac{\partial}{\partial q_y} A_{yy}(q_y, q_x) \\
\frac{\partial}{\partial q_x} C_y(q_x, q_y) &= \frac{\partial}{\partial q_y} C_x(q_x, q_y) \\
\frac{\partial}{\partial q_x} C_x(q_x, q_y) &= \frac{\partial}{\partial q_y} C_y(q_y, q_x) \\
A_{xy}(q_x, q_y) &= A_{yx}(q_x, q_y)
\end{aligned} \tag{3.63}$$

gezeigt werden. Damit die beiden partiellen Differentialgleichungen, Glg. (3.59) und (3.60), eine gemeinsame Lösung haben, muß nun die Beziehung

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial q_y} f(q_x, q_y) = \frac{\partial}{\partial q_x} g(q_x, q_y)} \tag{3.64}$$

gelten [26]. Anhand der obigen Symmetrien, Glg. (3.63), und der Definitionen (3.57) und (3.58) kann festgestellt werden, daß diese Bedingung *nicht* erfüllt ist. Die Lösung mittels einer einfachen Pfadintegration ist somit nicht möglich. Diese Tatsache ist äquivalent damit, daß die Stromdichte eben nicht identisch verschwinden kann und somit kein *detailliertes Gleichgewicht* gilt.

Um dennoch eine stationäre Lösung zu erhalten, wird nun versucht, die Eigenwertgleichung

$$\sum_{\vec{k}, \sigma=\pm 1} \left[-\sigma(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q) + \frac{(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)^2}{2} \right] w_\sigma(\vec{q}, \vec{k}) N(\vec{q}) = \lambda N(\vec{q}) \tag{3.65}$$

zu lösen. Für $\lambda = 0$ erhält man so auch die stationäre Verteilung. Allerdings hat sich damit die Komplexität des Problems erheblich erhöht, da nun eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung gelöst werden muß. Dazu werden die beiden neuen Funktionen

$$\begin{aligned}
N^+(\vec{q}, \vec{k}) &= w_{+1}(\vec{q}, \vec{k}) N(\vec{q}) \\
N^-(\vec{q}, \vec{k}) &= w_{-1}(\vec{q}, \vec{k}) N(\vec{q})
\end{aligned} \tag{3.66}$$

eingeführt. Die gesuchte Verteilung kann aus diesen beiden über

$$N(\vec{q}) = \frac{\sum_{\vec{k}} \left(N^+(\vec{q}, \vec{k}) + N^-(\vec{q}, \vec{k}) \right)}{\sum_{\vec{k}} \left(w_{+1}(\vec{q}, \vec{k}) + w_{-1}(\vec{q}, \vec{k}) \right)} = \frac{\sum_{\vec{k}} \left(N^+(\vec{q}, \vec{k}) + N^-(\vec{q}, \vec{k}) \right)}{f(\vec{q})} \quad (3.67)$$

erhalten werden. Mit diesen Definitionen geht die Eigenwertgleichung, Glg. (3.65), in folgende Gestalt über:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} \left[-(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q) \left(N^+(\vec{q}, \vec{k}) - N^-(\vec{q}, \vec{k}) \right) + \frac{(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)^2}{2} \left(N^+(\vec{q}, \vec{k}) + N^-(\vec{q}, \vec{k}) \right) \right] \\ = \frac{\lambda}{f(\vec{q})} \sum_{\vec{k}} \left(N^+(\vec{q}, \vec{k}) + N^-(\vec{q}, \vec{k}) \right) \end{aligned} \quad (3.68)$$

Die Gleichung wird nun summandenweise gelöst. Dazu wird eine Variablensubstitution

$$\begin{aligned} X_1(q_1, q_2) &= q_1 k_1 + q_2 k_2 \\ X_2(q_1, q_2) &= q_1 k_2 - q_2 k_1 \end{aligned} \quad (3.69)$$

durchgeführt. Mit

$$\begin{aligned} G_1(\vec{X}, \vec{k}) &= N^+(\vec{X}, \vec{k}) + N^-(\vec{X}, \vec{k}) \\ G_2(\vec{X}, \vec{k}) &= N^+(\vec{X}, \vec{k}) - N^-(\vec{X}, \vec{k}) \end{aligned} \quad (3.70)$$

erhält man dann die zu lösende Differentialgleichung

$$-k^2 \frac{\partial}{\partial X_1} G_2(\vec{X}, \vec{k}) + \frac{k^4}{2} \frac{\partial^2}{\partial X_1^2} G_1(\vec{X}, \vec{k}) = \frac{\lambda}{f(\vec{X}, \vec{k})} G_1(\vec{X}, \vec{k}) \quad (3.71)$$

Andererseits bestehen natürlich immer noch die Relationen (3.66). Damit gilt ebenso:

$$G_1(\vec{X}, \vec{k})(w_{-1}(\vec{X}, \vec{k}) - w_{+1}(\vec{X}, \vec{k})) = -G_2(\vec{X}, \vec{k})(w_{-1}(\vec{X}, \vec{k}) + w_{+1}(\vec{X}, \vec{k})) \quad (3.72)$$

Mit dieser Beziehung bekommt man als Bestimmungsgleichung für $G_1(\vec{X}, \vec{k})$:

$$\begin{aligned} k^2 \frac{\partial}{\partial X_1} \left[G_1(\vec{X}, \vec{k}) \frac{w_{-1}(\vec{X}, \vec{k}) - w_{+1}(\vec{X}, \vec{k})}{w_{-1}(\vec{X}, \vec{k}) + w_{+1}(\vec{X}, \vec{k})} \right] + \frac{k^4}{2} \frac{\partial^2}{\partial X_1^2} G_1(\vec{X}, \vec{k}) \\ = \frac{\lambda}{f(\vec{X}, \vec{k})} G_1(\vec{X}, \vec{k}) \end{aligned} \quad (3.73)$$

Im stationären Fall ($\lambda = 0$) kann diese Gleichung durch gewöhnliches Aufintegrieren gelöst werden und man erhält:

$$G_1(\vec{X}, \vec{k}) = C_1(X_2, \vec{k})e^{M(\vec{X}, \vec{k})} + C_2(X_2, \vec{k})e^{M(\vec{X}, \vec{k})} \int dX_1 e^{-M(\vec{X}, \vec{k})} \quad (3.74)$$

wobei

$$M(X'_1, X_2, \vec{k}) = -\frac{2}{k^2} \int_{X_{1,0}}^{X'_1} dX_1 \frac{w_{-1}(\vec{X}, \vec{k}) - w_{+1}(\vec{X}, \vec{k})}{w_{-1}(\vec{X}, \vec{k}) + w_{+1}(\vec{X}, \vec{k})} \quad (3.75)$$

ist. Damit lautet die stationäre Lösung

$$N(\vec{q}) = f^{-1}(\vec{q}) \sum_k \left[C_1(q_1 k_2 - q_2 k_1, \vec{k}) e^{M(\vec{q}, \vec{k}, q_1 k_2 - q_2 k_1, \vec{k})} + C_2(q_1 k_2 - q_2 k_1, \vec{k}) e^{M(\vec{q}, \vec{k}, q_1 k_2 - q_2 k_1, \vec{k})} \int_{X_{1,0}}^{\vec{q} \cdot \vec{k}} dX_1 e^{-M(X_1, q_1 k_2 - q_2 k_1, \vec{k})} \right]$$

Die Funktionen C_1 und C_2 sind dabei so zu wählen, daß geforderte Randbedingungen erfüllt werden. Die Lösung des vollen Eigenwertproblems ist dagegen nicht analytisch durch eine endliche Anzahl von Quadraturen möglich. Dies kann z.B. dadurch gezeigt werden, indem man Glg. (3.73) über geeignete Transformationen auf die Riccati-Gleichung bringt, deren Lösungen nur in Spezialfällen angebar sind [27, 28]. Die Frage der Eindeutigkeit der stationären Lösung ist durchaus nichttrivial und muß in jedem Fall gesondert geprüft werden. Kriterien dazu können in [25] gefunden werden.

3.4.1.1.2 Die stationäre Lösung - räumlich inhomogene Systeme Nachdem nun bekannt ist, wie die stationäre Lösung im homogenen Fall gefunden werden kann, ist dieses Verfahren problemlos auch auf die räumlich inhomogene Situation anwendbar. Wenn man sich die zu lösende Gleichung

$$\sum_{\vec{k}, \sigma=\pm 1} \left[-\sigma \vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q + \frac{(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)^2}{2} \right] \underbrace{\left[w_\sigma(\vec{q} + \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{k}) + w_\sigma(\vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{k}) \right]}_{\tilde{w}_\sigma(\vec{q}, \vec{Q}, \vec{k})} N(\vec{Q}, \vec{q}) = \lambda N(\vec{Q}, \vec{q}) \quad (3.76)$$

anschaut, so ist erkennbar, daß nur die entsprechenden Streuraten $w_\sigma(\vec{q}, \vec{k})$ in Glg. (3.65) durch $\tilde{w}_\sigma(\vec{q}, \vec{Q}, \vec{k})$ zu ersetzen sind. Ebenso hätte man die Lösung der räumlich inhomogenen Eigenwertgleichung, falls es gelänge, das Problem im homogenen Fall in den Griff zu bekommen.

3.4.1.2 Näherungsweise Lösung der Fokker-Planckgleichung

Um die Fokker-Planckgleichung (3.76) lösen zu können, müssen 3 Probleme in den Griff bekommen werden:

1. Die Fokker-Planckgleichung ist eine gekoppelte Gleichung in den Relativimpulsen \vec{q} . Die Mischung der unterschiedlichen q durch den Term $\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q$ und anschließender Übersummation muß auf geeignete Art und Weise aufgehoben werden.
2. Die Mischung der unterschiedlichen vektoriellen Komponenten der Relativimpulse muß durch geeignete Transformation eliminiert werden.
3. Das größte Problem schließlich ist die Tatsache, daß es sich hier um eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung mit *nichtkonstanten* Koeffizienten handelt. Selbst wenn es gelingt, diese Gleichung auf eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung zu reduzieren, ist eine Gleichung dieser Art entweder nicht analytisch oder nur mit Hilfe spezieller Funktionen (Besselfunktionen, hypergeometrische Reihen etc.) darstellbar.

Es wird angenommen, daß eine im Ort und in den Relativimpulsen gaußförmige Anfangsverteilung gemäß Glg. (3.8) vorliegt. Zunächst wird gezeigt, daß dann die beiden ersten Probleme ohne weitere Näherungen lösbar sind. Dazu wird die linke Seite von Glg. (3.49) mit

$$1 = \frac{\sum_{\vec{k}, \sigma = \pm} B_\sigma(\vec{q}, \vec{k}, \vec{Q})}{\sum_{\vec{k}, \sigma = \pm 1} B_\sigma(\vec{q}, \vec{k}, \vec{Q})} = \frac{1}{B(\vec{q}, \vec{Q})} \sum_{\vec{k}, \sigma = \pm 1} B_\sigma(\vec{q}, \vec{k}, \vec{Q}) \quad (3.77)$$

multipliziert. Die Größe

$$B_\sigma(\vec{q}, \vec{k}, \vec{Q}) = \left[1 + \left(\vec{\nabla}_q \cdot \vec{Q} \right) + \frac{\left(\vec{\nabla}_q \cdot \vec{Q} \right)^2}{2} + \dots \right]_{\vec{Q}=0} \tilde{w}_\sigma(\vec{q}, \vec{Q}, \vec{k}) \quad (3.78)$$

kann dabei die Entwicklung der Streuraten, Glg. (3.50), nach den Schwerpunktsimpulsen \vec{Q} , aber auch die ungenäherte Streuraten sein. Bei „üblichen“ Fokussierungen von $\sigma = 1.08 \mu m$ sind diese um 1-2 Größenordnungen kleiner als die Relativimpulse, so daß die Näherung gegebenenfalls sinnvoll sein kann.

Nun wird Summation und Differentiation vertauscht und die Differentialgleichung für jeden Summanden separat betrachtet. Falls es gelingt, die Gleichung summandenweise zu lösen, hat man somit auch sofort eine Lösung des Gesamtproblems gefunden. Das Problem reduziert sich daher auf

$$\frac{1}{B(\vec{q}, \vec{Q})} \frac{\partial}{\partial t} N_\sigma(\vec{Q}, \vec{q}, \vec{k}, t) = \left[-\sigma \vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q + \frac{(\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_q)^2}{2} \right] N_\sigma(\vec{Q}, \vec{q}, \vec{k}, t), \quad (3.79)$$

wobei die neue Funktion $N_\sigma(\vec{Q}, \vec{q}, \vec{k}, t)$ durch folgende Relationen mit der Exzitondichte $N(\vec{Q}, \vec{q}, t)$ verknüpft ist:

$$\begin{aligned} N_\sigma(\vec{Q}, \vec{q}, \vec{k}, t) &= N(\vec{Q}, \vec{q}, t) B_\sigma(\vec{q}, \vec{k}, \vec{Q}) \\ N(\vec{Q}, \vec{q}, t) &= \frac{1}{B(\vec{q}, \vec{Q})} \sum_{\vec{k}, \sigma=\pm 1} N_\sigma(\vec{Q}, \vec{q}, \vec{k}, t) \end{aligned} \quad (3.80)$$

Die \vec{k} und σ übersummierte Streurrate ist dabei eine Art Gewichtungsfunktion, mit der die einzelnen Relativ- und Schwerpunktsimpulse an der Streuung beteiligt sind.

Als nächstes werden nun die einzelnen Vektorkomponenten der Relativimpulse entkoppelt. Dazu dient die folgende lokale (im Punkt $(k_1, k_2)^t$) Variablentransformation:

$$\begin{aligned} X_1(q_1, q_2) &= q_1 k_1 + q_2 k_2 \\ X_2(q_1, q_2) &= q_1 k_2 - q_2 k_1 \\ Y_1(Q_1, Q_2) &= Q_1 k_1 + Q_2 k_2 \\ Y_2(Q_1, Q_2) &= Q_1 k_2 - Q_2 k_1 \end{aligned} \quad (3.81)$$

Damit reduziert sich Glg. (3.79) auf

$$\frac{1}{\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{N}_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, t) = \left[-\sigma k^2 \frac{\partial}{\partial X_1} + \frac{k^4}{2} \frac{\partial^2}{\partial X_1^2} \right] \tilde{N}_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, t) \quad (3.82)$$

Die Gewichtungsfunktion besitzt nach der Transformation die neue Form

$$\begin{aligned} \tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k}) &= \frac{1}{\hbar^2 k^2} \sum_{\vec{Z}, k_z \sigma} \left| D \left(\frac{Z}{k}, k_z \right) \right|^2 \left(n_{\frac{Z}{k}, k_z} + \frac{1-\sigma}{2} \right) \\ &\quad \left\{ \xi \left(\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{Z^2}{k^2} + \frac{2\sigma}{k^2} \vec{X} \cdot \vec{Z} \right] - \sigma \hbar \omega_{\frac{Z}{k}, k_z} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\hbar^2}{2Mk^2} \right) \frac{(\vec{Y} \cdot \vec{Z})^2}{2} \xi'' \left(\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{Z^2}{k^2} + \frac{2\sigma}{k^2} \vec{X} \cdot \vec{Z} \right] - \sigma \hbar \omega_{\frac{Z}{k}, k_z} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Eine Fourier- oder Laplacetransformation in der Zeit macht daraus sofort eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung, so daß damit die beiden ersten Probleme gelöst sind. Da es sich hier darum geht, die Lösung anhand einer Anfangsverteilung zu finden, wird die Laplacetransformation

$$N(s) = \int_0^\infty e^{-st} N(t) dt, \quad N(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{st} N(s) ds \quad \text{Re}(s) \geq c \quad (3.84)$$

gewählt. Die transformierte Gleichung (3.82)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})} \left[s\tilde{N}_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) - \tilde{N}_{0,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}) \right] \\ &= \left[-\sigma k^2 \frac{\partial}{\partial X_1} + \frac{k^4}{2} \frac{\partial^2}{\partial X_1^2} \right] \tilde{N}_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) \end{aligned} \quad (3.85)$$

enthält dann die Anfangsverteilung $\tilde{N}_{0,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k})$ als Inhomogenität. Diese Größe erhält man durch entsprechende Umformungen aus Glg.(3.8):³

$$\tilde{N}_{0,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}) = \frac{\alpha^2}{L^2\pi} \exp \left[-\frac{\alpha^2 X^2}{k^2} - \frac{Y^2 \sigma^2}{4k^2} \right] B_\sigma(\vec{q}(\vec{X}, \vec{k}), \vec{k}, \vec{Q}(\vec{Y}, \vec{k})) \quad (3.86)$$

Als Nächstes muß nun die Lösung der zugehörigen homogenen Gleichung gefunden werden. Da die Gewichtungsfunktion selbst von X_1 in nichttrivialer Weise abhängt, ist es nicht möglich, in jedem Fall eine Lösung anzugeben. Daher werden 2 verschiedene Näherungen betrachtet, welche die Gestalt der Gewichtungsfunktion verändern⁴:

1. bezüglich X konstante Drift- und Diffusionsterme:

Die Gewichtungsfunktion wird also durch den Ausdruck

$$\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k}) \approx \tilde{B}(\vec{X} = 0, \vec{Y}, \vec{k}) \quad (3.87)$$

genähert, wobei einfach $\vec{X} = 0$ in Glg. (3.83) gesetzt wurde. Diese Näherung betrifft die Energieerhaltung eines einzelnen Streuprozesses. Im Fall der Markovnäherung stellt die Funktion $\xi(x)$ zwar die entsprechende energieerhaltende Deltafunktion dar, im Allgemeinen ist die Energieerhaltung jedoch nur eine Folge dieser Näherung. Weiterhin werden die Phononen als Bad behandelt, d.h. Gesamtenergie und Gesamtimpuls des elektronischen Systems sind von vornherein nicht erhalten gewesen. Die Teilchenzahlerhaltung wird dagegen durch diese Näherung nicht beeinflusst, das asymptotische Verhalten der Gewichtungsfunktion für große Relativimpulse \vec{q} wird allerdings geändert. Während die ursprüngliche Gewichtungsfunktion vorgab, daß die Streuung von Elektronen mit großen Relativimpulsen stark unterdrückt wurde, besteht diese Einschränkung nun nicht mehr. Für kleine Impulse geht die Gewichtungsfunktion trivialerweise in die exakte Form über. Es ist zu hoffen, daß selbst diese einfachste mögliche Näherung eine gute Beschreibung des ursprünglichen Problems liefert.

³Man beachte, daß hier α und σ die energetische und räumliche Breite der Anfangsverteilung sind!

⁴Diese Näherungen sind relativ unkritisch, da sie Drift- und Diffusionsterm gleichermaßen betreffen und außerdem die wichtige Kopplung der vektoriellen Komponenten bereits durch vorherige Transformationen berücksichtigt wurden.

Benutzt man nun Glg. (3.87), so wirkt die partielle Ableitung ∂_{X_1} nur noch auf $\tilde{N}_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, t)$. Die Lösung der homogenen Gleichung kann daher bestimmt werden und ist gegeben durch

$$G_{1/2,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) = \exp \left[\left(\frac{\sigma}{k^2} \pm \frac{1}{k^2} \sqrt{1 + \frac{2s}{\tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k})}} \right) X_1 \right]. \quad (3.88)$$

2. Drift- und Diffusionsterm mit quadratischen Anteilen in X :

Es wird nun versucht, eine Näherung zu finden, welche das Verhalten der Gewichtungsfunktion qualitativ besser beschreibt.

Nimmt man für die Funktion $\xi(x)$ eine Lorenzfunktion an, so ist die Gewichtungsfunktion selbst eine Summe verschiedener Lorenzfunktionen in X_1 . Das Inverse einer einzelnen Lorenzfunktion ist wiederum ein Polynom 2. Grades. Die Idee bei dieser Näherung ist nun die Folgende: Man approximiert die Summe von verschiedenen Lorenzfunktionen durch das Inverse eines Polynoms zweiten Grades. Diese Näherung sollte zumindest für kleine X_1 brauchbare Ergebnisse liefern, aber auch für größere Impulse eine konsistentere Annahme darstellen, da nun die Gewichtungsfunktion selber für große X_i verschwindet. \tilde{B} wird somit durch

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})} &\approx \underbrace{\frac{1}{\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})} \Big|_{\substack{X_1=0 \\ X_2=0}} - \frac{\partial_{X_2}^2 \tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})}{\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})^2} \Big|_{\substack{X_1=0 \\ X_2=0}}}_{=:a} X_2^2 \\ &\quad - \underbrace{\frac{\partial_{X_1}^2 \tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})}{\tilde{B}(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k})^2} \Big|_{\substack{X_1=0 \\ X_2=0}}}_{=:b} X_1^2 \\ &= a - bX_1^2 \end{aligned} \quad (3.89)$$

genähert. Wie leicht nachgerechnet werden kann, verschwinden aus Symmetriegründen alle ungeraden wie auch die gemischten Ableitungen, so daß der quadratische Anteil in X_1 den ersten Beitrag darstellt. Die zu diesem Problem zugehörigen Lösungen sind durch die konfluente hypergeometrische ${}_1F_1(a, b; z)$ und Kummersche Funktion $\Psi(a, b; z)$ gegeben, vgl. Anhang B.2:

$$\begin{aligned} G_{1,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) &= \frac{\sqrt{bs}}{\sqrt{2k^2\sqrt{-bs}}} X_1 \exp \left[\frac{\sigma X_1}{k^2} - \frac{bsX_1^2}{\sqrt{2k^2}} \sqrt{\frac{-1}{bs}} \right] \\ &\quad \times {}_1F_1 \left(\frac{1}{8} \left(b - \sqrt{\frac{-2}{bsk^4}} (2as + 1) \right), \frac{3}{2}; \frac{bs}{k^2} \sqrt{\frac{-2}{bs}} X_1^2 \right) \end{aligned} \quad (3.90)$$

$$G_{2,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) = \frac{\sqrt{bs}}{\sqrt{2k^2\sqrt{-bs}}} X_1 \exp \left[\frac{\sigma X_1}{k^2} - \frac{bsX_1^2}{\sqrt{2k^2}\sqrt{bs}} \sqrt{\frac{-1}{bs}} \right] \\ \times \Psi \left(\frac{1}{8} \left(b - \sqrt{\frac{-2}{bsk^4}} (2as + 1) \right), \frac{3}{2}; \frac{bs}{k^2} \sqrt{\frac{-2}{bs}} X_1^2 \right) \quad (3.91)$$

Nachdem in beiden Fällen Lösungen der homogenen Gleichung bekannt sind, kann die zugehörige inhomogene Lösung über die Methode der Variation der Konstanten berechnet werden [29].

$$C_{1,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) = - \int \frac{N_{0,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}) G_{2,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s)}{H_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s)} dX_1 \quad (3.92)$$

$$C_{2,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) = \int \frac{N_{0,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}) G_{1,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s)}{H_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s)} dX_1 \quad (3.93)$$

$$H_\sigma(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) = G_{1,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) \partial_{X_1} G_{2,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) \\ - G_{2,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) \partial_{X_1} G_{1,\sigma}(\vec{Y}, \vec{X}, \vec{k}, s) \quad (3.94)$$

Sie ist durch

$$\tilde{N}_\sigma^{inhom} = C_{1,\sigma} G_{1,\sigma} + C_{2,\sigma} G_{2,\sigma} \quad (3.95)$$

gegeben. Damit verbleiben zwei Integrationskonstanten je σ aus der homogenen Lösung. Die Normierung der Ladungsträgerdichte wird bereits durch die Anfangsverteilung und die Laplacetransformation gewährleistet, so daß die insgesamt vier verbleibenden Konstanten durch Randbedingungen festgelegt werden müssen. Für räumlich fokussierte Anregungen mit endlicher spektraler Breite sind *natürliche* Randbedingungen, d.h. die Verteilung und deren Ableitungen nach q_i verschwinden im Unendlichen, gegeben. Nun erfüllt die spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung bereits die volle Differentialgleichung, die Anfangsbedingung, wie auch die geforderten Randbedingungen. Da die Lösung des Anfangswertproblems eindeutig bestimmt ist, stellt die spezielle Lösung somit auch die physikalisch relevante Lösung dar und die homogenen Anteile fallen weg. Damit ist das Problem der Exziton-Phonon-Streuung prinzipiell gelöst, wobei sogar die Gesamtheit aller Lösungen bestimmt werden konnte. Anschließend müssen nun die inverse Laplacetransformation und anschließend die inversen Koordinatentransformationen durchgeführt werden. Über Relation (3.80) kann so die inkohärente Exzitonendichte berechnet werden.

Ein Problem besteht nun allerdings in der praktischen analytischen Auswertung der integralen Ausdrücke, insbesondere die inverse Laplacetransformation bereitet Probleme. Im Allgemeinen wird die endgültige Berechnung numerisch erfolgen müssen, jedoch bietet dieses Verfahren den Vorteil, daß die Verteilung zu beliebigen Zeiten direkt bestimmt werden kann anstatt die Lösung über die Bewegungsgleichungen durch die Zeitentwicklung mühsam zu berechnen.

Zwar liefert obiges Verfahren die Lösung für beliebige Anfangsverteilungen bei $t = 0$, welche die *natürlichen* Randbedingungen erfüllen, dennoch kann bei Verwendung der speziellen Anfangsbedingung, Glg. (3.8), ein einfacherer analytischer Ausdruck in Fall konstanter Drift- und Diffusionsterme angegeben werden, wenn man eine etwas andere Methode anwendet. Im Allgemeinen führt diese jedoch nicht notwendigerweise zum Erfolg.

3.4.1.3 Konstante Drift und Diffusionskoeffizienten

Man startet nun mit Glg. (3.82). Unter Verwendung der Näherung konstanter Drift- und Diffusionsterme, Glg. (3.87), kann die in X_1 fouriertransformierte Gleichung

$$\frac{1}{\tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k})} \partial_t N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t) = \left[-i\sigma k^2 r - \frac{k^4}{2} r^2 \right] N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t) \quad (3.96)$$

direkt in der Zeit aufintegriert werden.

$$\begin{aligned} N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t) &= N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, 0) \exp \left[\tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k}) \left(-i\sigma k^2 r - \frac{k^4}{2} r^2 \right) t \right] \\ &+ C_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}) \end{aligned} \quad (3.97)$$

Da die Gewichtungsfunktion positiv ist und daher die Lösung N_σ für $t \rightarrow \infty$ verschwindet, muß C_σ die stationäre Lösung des Problems, Glg. (3.52), sein. Daraus folgt, daß

$$N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, 0) = N_{0\sigma}(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}) - C_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}) \quad (3.98)$$

gilt, wobei $N_{0\sigma}(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k})$ die Anfangsverteilung des Problems ist. Da die explizite Form der Gleichgewichtsverteilung selbst bei konstanten Koeffizienten noch immer eine sehr komplizierte Gestalt besitzt, wird nun angenommen, daß die stationäre Verteilung ebenfalls durch eine gaußförmige Verteilung im Ort und in den Relativimpulsen gegeben sei. Bei dieser Annahme ist es hinreichend, nur den Anteil mit der Anfangsverteilung $N_{0\sigma}(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k})$, Glg. (3.8), zu betrachten. Die Berechnung des Anteils mit der stationären Lösung verläuft dann völlig analog.

Einsetzen der entsprechend transformierten Gleichung (3.86) für die Anfangsverteilung und anschließender Rücktransformation⁵ liefert für diesen Anteil

$$N_\sigma(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{k}, t) = \frac{\alpha^2}{L^2 \pi} \tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k}) \exp \left[-\frac{X_2^2 \alpha^2}{k^2} - \frac{Y^2 \sigma^2}{4k^2} \right] \frac{\exp \left[-\frac{(\alpha k \bar{\sigma} \tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k}) t - \frac{\alpha X_1}{k})^2}{\tilde{\eta}(\vec{Y}, \vec{k}, t)^2} \right]}{\tilde{\eta}(\vec{Y}, \vec{k}, t)}, \quad (3.99)$$

⁵Nur die Tatsache, daß die Anfangsverteilung hier eine gaußförmige Gestalt hat, ermöglicht die analytische Rücktransformation.

wobei $\eta(\vec{Y}, \vec{k}, t)$ durch

$$\tilde{\eta}(\vec{Y}, \vec{k}, t) = \sqrt{1 + 2\alpha^2 k^2 \tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k})t} \quad (3.100)$$

gegeben ist. Resubstitution der Variablen und die Summation über $\sigma = \pm 1$ und \vec{k} ergibt dann:

$$\begin{aligned} N(\vec{Q}, \vec{q}, t) &= \sum_{\vec{k}} \frac{\alpha^2}{L^2 \pi B(\vec{Q}) \eta(\vec{Q}, \vec{k}, t)} \exp \left[-\frac{q^2 \alpha^2 + (q_1 k_2 - q_2 k_1)^2 2\alpha^4 B(\vec{Q})t}{\eta(\vec{Q}, \vec{k}, t)^2} \right] \\ &\times \exp \left(-\frac{Q^2 \sigma^2}{4} - \frac{\alpha^2 k^2 B(\vec{Q})^2 t^2}{\eta(\vec{Q}, \vec{k}, t)^2} \right) \\ &\times \left[B_{+1}(\vec{k}, \vec{Q}) \exp \left(\frac{2\alpha t B(\vec{Q}) \vec{q} \cdot \vec{k}}{\eta(\vec{Q}, \vec{k}, t)^2} \right) + B_{-1}(\vec{k}, \vec{Q}) \exp \left(-\frac{2\alpha t B(\vec{Q}) \vec{q} \cdot \vec{k}}{\eta(\vec{Q}, \vec{k}, t)^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.101)$$

mit

$$\eta(\vec{Q}, \vec{k}, t) = \sqrt{1 + 2\alpha^2 k^2 B(\vec{Q})t} \quad (3.102)$$

$$B(\vec{Q}) = \sum_{\vec{k}, \sigma=\pm} B_\sigma(\vec{k}, \vec{Q}), \quad (3.103)$$

wobei $B_\sigma(\vec{k}, \vec{Q}) = B_\sigma(\vec{q} = 0, \vec{k}, \vec{Q})$ aus Glg. (3.78) ist. Davon ausgehend lassen sich nun problemlos die Energie-

$$\begin{aligned} N(\vec{q}, t) &= N(\vec{Q} = 0, \vec{q}, t) \\ &= \frac{1}{B(\vec{Q})} \sum_{\vec{k}, \sigma=\pm 1} \frac{\alpha^2 B_\sigma(\vec{Q} = 0, \vec{k})}{L^2 \pi \eta} \exp \left[-\frac{(q_1 k_2 - q_2 k_1)^2 \alpha^2}{k^2} \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{\alpha^2}{k^2 \eta^2} (\vec{q} \cdot \vec{k})^2 + \frac{2\alpha^2 \sigma B(0)}{\eta^2} (\vec{q} \cdot \vec{k})t - \frac{\alpha^2 k^2 B(0)^2}{\eta^2} t^2 \right] \end{aligned} \quad (3.104)$$

und Schwerpunktsimpulsverteilung

$$N(\vec{Q}, t) = \sum_{\vec{q}} N(\vec{Q}, \vec{q}, t) = \frac{1}{4\pi^2} e^{-\frac{Q^2 \sigma^2}{4}} \quad (3.105)$$

bestimmen. Während erstere offensichtlich eine explizite Zeitabhängigkeit besitzt, zeigt die Schwerpunktsimpulsverteilung ohne den Anteil der Frei-Teilchenenergien keinerlei Dynamik. Dieses Verhalten ist in Übereinstimmung mit der Tatsache, daß

$$\frac{d}{dt} \sum_{\vec{q}} N(\vec{Q}, \vec{q}, t) = \frac{d}{dt} N(\vec{Q}, t) = 0 \quad (3.106)$$

gilt, wie man anhand Glg. (3.49) feststellt. Damit ist natürlich auch die Ladungsträgerverteilung im Ortsraum konstant.

3.4.1.4 Die Exziton-Phononstreuung in Kombination mit der freien Bewegung der Exzitonen

Um festzustellen, wie die Dynamik im Ortsraum modifiziert wird, wenn die Frei-Teilchenenergien berücksichtigt werden, muß die Ausgangsgleichung (3.82) um die entsprechenden Terme ergänzt werden. Die in X_1 fouriertransformierte Gleichung lautet dann:

$$\left(\frac{1}{\tilde{B}(\vec{Y}, \vec{k})} \left[\partial_t - \frac{\hbar}{Mk^2} Y_1 \partial_r + \frac{i\hbar}{Mk^2} X_2 Y_2 \right] + \sigma k^2 r + \frac{k^4}{2} r^2 \right) N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t) = 0 \quad (3.107)$$

Diese partielle Differentialgleichung 1.Ordnung in 2 Variablen läßt sich einfach lösen, wenn man die folgende lineare Transformation anwendet:

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= t \quad \text{und} \\ \tilde{r} &= r + \frac{\hbar Y_1}{Mk^2} t \end{aligned} \quad (3.108)$$

Die anschließende Resubstitution liefert schließlich

$$\begin{aligned} N_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t) &= N_{0\sigma} \left(r + \frac{Y_1 \hbar}{Mk^2} t, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t \right) \exp \left[-\frac{i\hbar}{Mk^2} X_2 Y_2 t - \frac{k^4}{2} r^2 t \right] \\ &\times \exp \left[-r \left(\sigma k^2 t + \frac{Y_1 \hbar k^2 t^2}{2M} \right) - \frac{\sigma Y_1 \hbar t^2}{2M} - \frac{k^4 t}{6} \left(\frac{Y_1 \hbar t}{Mk^2} \right)^2 \right] \\ &+ C_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}) \end{aligned} \quad (3.109)$$

mit einer beliebigen Funktion $N_{0\sigma}$. Die Lösung des hier vorliegenden Anfangswertproblems erhält man durch die Wahl $t = 0$. $N_{0\sigma}$ ist dann durch die in X_1 fouriertransformierte Glg. (3.86) minus der stationären Lösung $C_\sigma(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k})$ gegeben. Auch hier wird die Annahme einer im Ort und in den Relativimpulsen gaußförmigen stationären Verteilung gemacht. Betrachtet man nun wiederum nur den Anteil, der nicht die stationäre Lösung enthält, so erhält man schließlich:

$$\begin{aligned} N_{\bar{\sigma}}(r, X_2, \vec{Y}, \vec{k}, t) &= \frac{\sqrt{k^2 \pi} \alpha}{2L\pi^2} \exp \left[-\frac{\alpha^2 X_2^2}{k^2} - \frac{Y^2 \sigma^2}{4k^2} - \frac{\left(r + \frac{Y_1 \hbar}{Mk^2} t \right)^2 k^2}{4\alpha^2} \right] \\ &\times \left(\tilde{w}_{\bar{\sigma}}(\vec{X} = 0, \vec{k}) + \frac{Y_1^2}{2} \tilde{g}_{\bar{\sigma}}(\vec{X} = 0, \vec{k}) \right) \exp \left[-\frac{i\hbar}{Mk^2} X_2 Y_2 t - \frac{k^4}{2} r^2 t \right] \\ &\times \exp \left[-r \left(\bar{\sigma} k^2 t + \frac{Y_1 \hbar k^2 t^2}{2M} \right) - \frac{\bar{\sigma} Y_1 \hbar t^2}{2M} - \frac{k^4 t}{6} \left(\frac{Y_1 \hbar t}{Mk^2} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.110)$$

Dies ist eine verschobene Gaußfunktion in r und somit problemlos wieder zurück auf X_1 fouriertransformierbar. Die anschließende Resubstitution der X_i und Y_i

sowie die Summation über \vec{k} und $\bar{\sigma} = \pm 1$ ergibt dann das endgültige Resultat

$$\begin{aligned}
N(\vec{Q}, \vec{q}, t) &= \frac{1}{B(\vec{Q})} \sum_{\vec{k}, \bar{\sigma}=\pm 1} \frac{\alpha}{L^2 \pi \eta} B_{\bar{\sigma}}(\vec{Q}, \vec{k}) \exp \left[-\frac{\alpha^2}{k^2} (q_1 k_2 - q_2 k_1)^2 - \frac{Q^2 \sigma^2}{4} \right] \\
&\times \exp \left[-\frac{i\hbar}{M\eta^2} \vec{Q} \cdot \vec{q} t - \frac{\alpha^2}{k^2 \eta^2} (\vec{q} \cdot \vec{k})^2 + 2(\vec{q} \cdot \vec{k}) \frac{\alpha^2 \bar{\sigma} t B(\vec{Q})}{\eta^2} + i \frac{\hbar t^2 \bar{\sigma} B(\vec{Q})}{2M\eta^2} (\vec{Q} \cdot \vec{k}) \right. \\
&\quad - \frac{i\hbar \alpha^2 t^2}{M\eta^2} B(\vec{Q}) \left(k^2 \vec{Q} \cdot \vec{q} + (q_1 k_2 - q_2 k_1) (Q_1 k_2 - Q_2 k_1) \right) \\
&\quad \left. - \frac{\alpha^2 k^2 t^2 B(\vec{Q})^2}{\eta^2} - \frac{\hbar^2 t^3 B(\vec{Q})}{6M^2 \eta^2} (\vec{Q} \cdot \vec{k})^2 \left(1 + \frac{\alpha^2 k^2 t B(\vec{Q})}{2} \right) \right], \quad (3.111)
\end{aligned}$$

wobei η durch Glg. (3.102) gegeben ist. Die Energie- oder Relativimpulsverteilung wird wiederum durch Glg. (3.104) beschrieben. Im Gegensatz zum vorherigen Ergebnis besitzt nun aber auch die Schwerpunktsimpulsverteilung eine Zeitabhängigkeit:

$$\begin{aligned}
N(\vec{Q}, t) &= \frac{1}{B(\vec{Q})} \sum_{\vec{k}, \bar{\sigma}} \frac{1}{4\pi^2} B_{\bar{\sigma}}(\vec{k}, \vec{Q}) \exp \left[-\frac{Q^2 \sigma^2}{4} - \frac{\alpha^2 k^2 t^2 B(\vec{Q})^2}{\eta^2} \right] \\
&\times \exp \left[-\frac{\hbar^2 t^2}{4M^2 \alpha^2 k^2} (k_2 Q_1 - k_1 Q_2)^2 - \frac{i\hbar t^2 \bar{\sigma} B(\vec{Q})}{2M\eta^2} \left(1 + \alpha^2 k^2 t B(\vec{Q}) \right) (\vec{k} \cdot \vec{Q}) \right] \\
&\times \exp \left[-(\vec{k} \cdot \vec{Q})^2 \frac{\hbar^2 t^2}{\eta^2} \left(\frac{1}{\alpha^2 k^2 M^2} + \frac{13}{6} \frac{t B(\vec{Q})}{M^2} + \frac{17}{16} \frac{\alpha^2 k^2 t^2 B(\vec{Q})^2}{M^2} \right) \right] \quad (3.112)
\end{aligned}$$

Anhand der Gleichungen (3.104), (3.111) und (3.112) soll nun die Dynamik der Exzitonen in den Grenzfällen kurzer und langer Zeiten untersucht werden.

3.4.1.5 Verhalten auf kurzen und langen Zeitskalen

Intuitiv erwartet man, daß bei kurzen Zeiten nur die Frei-Teilchendynamik zu sehen ist. Man erhält bei Auswertung von Glg. (3.111) bis zum ersten nichtverschwindenden Term in t :

$$\begin{aligned}
N(\vec{Q}, \vec{q}, t \approx 0) &= \frac{1}{B(\vec{Q})} \sum_{\vec{k}, \bar{\sigma}=\pm 1} \frac{\alpha}{L^2 \pi} B_{\bar{\sigma}}(\vec{Q}, \vec{k}) \exp \left[-\alpha^2 q^2 - \frac{Q^2 \sigma^2}{4} \right] \\
&\times \exp \left[-\frac{i\hbar}{M} \vec{Q} \cdot \vec{q} t + 2(\vec{q} \cdot \vec{k}) \alpha^2 \bar{\sigma} t B(\vec{Q}) \right]. \quad (3.113)
\end{aligned}$$

Man erkennt, daß neben der Anfangsverteilung

$$\exp \left[-\alpha^2 q^2 - \frac{Q^2 \sigma^2}{4} \right] \quad (3.114)$$

und Frei-Teilchen Energie

$$\exp\left(-\frac{i\hbar}{M}\vec{Q}\cdot\vec{q}t\right) \quad (3.115)$$

zusätzliche Beiträge vorhanden sind. Diese können mit der Exziton-Phonon Streuung assoziiert werden und wirken direkt auf die Verteilung der Relativimpulse. Der eigentliche zeitabhängige Beitrag besteht allerdings aus zwei Anteilen dieser Art: einer für die tatsächliche Anfangsverteilung und ein weiterer für die Gleichgewichtsverteilung. Beide unterscheiden sich aufgrund der Annahme einer Gaußverteilung im Ort und in den Relativimpulsen lediglich um die räumliche σ und energetische Breite α . Bei sehr langen Zeiten $t \rightarrow \infty$ liefert trivialerweise nur die Gleichgewichtsverteilung einen nichtverschwindenden Beitrag, da die Lösung der Differentialgleichung gerade so konstruiert wurde.

Damit ist es gelungen, auf analytischem Weg ein Verfahren zu entwickeln, die durch Exziton-Phononstreuung beeinflusste Dynamik inkohärenter Exzitonen zu beschreiben.

3.4.2 Numerische Auswertung der Bewegungsgleichungen

Aufgrund der komplexen Struktur des betrachteten Problems ist eine Auswertung der gekoppelten Gleichungen (2.115), (2.118) und (2.117) nur auf numerischem Weg möglich. Die Quadraturen wurden dabei mit Hilfe des Runge-Kutta Verfahrens 4.Ordnung vorgenommen. Als Indikatoren für die numerische Korrektheit wurden unterschiedliche Erhaltungssätze überprüft (Dichteerhaltung bei verschiedenen Ein- und Ausstreuprozessen) sowie einzelne kritische Rechnungen mit Hilfe des Bulirsch-Stoer Verfahrens verifiziert. Letzteres bietet die Möglichkeit der Fehlerkontrolle, ist aber im Vergleich zum Runge-Kutta Verfahren mit den dem Problem speziell angepaßten Schrittweiten langsamer. Das Programm wurde parallelisiert und mit Hilfe von MPI (**M**essage **P**assing **I**nterface) implementiert. Die benötigte Rechenzeit lag dabei zwischen 2500 und 5000 CPU Stunden auf einer Alpha-Workstation (21164A).

Die Auswertung der Gleichungen erfolgt im Fall ohne strukturelle Unordnung anhand einer $L_z = 30nm$ breiten Halbleiterheterostruktur. Spielen Quantenfilmfluktuationen eine Rolle, so wird die Breite von $L_z = 15nm$ bis $L_z = 30nm$ variiert. Sofern nicht explizit anders erwähnt, entsprechen die Anregungsbedingungen einem $\tau = 500fs$ -Puls mit dem Maximum bei $t_0 = 3ps$, resonant mit dem 1s-Exziton und einer räumlichen Fokussierung von $\sigma = 1\mu m$. Für die Phononen wurde der akustische Zweig verwendet, da kleine Energieüberträge notwendig sind, um 1s-Exzitonen generieren zu können. Dies wird deutlich, wenn an entsprechender Stelle der Generationsprozeß der inkohärenten Exzitonendichte diskutiert wird. Die verwendeten modellspezifischen Parameter sind in Anhang A.1 zu finden. Da sämtliche Größen Zerfallsprozessen unterliegen, werden die Orts-, Winkel- und Relativimpulsverteilung stets normiert.

3.4.2.1 Geordnete Systeme

Da die optische Anregung zur Entstehung der Polarisation führt, wird die Diskussion mit dieser Größe begonnen. In Abb. 3.11 ist die Zeitentwicklung für unterschiedliche Temperaturen von $T=10\text{K}$ bis zu $T=300\text{K}$ zu sehen. Dabei ist eine

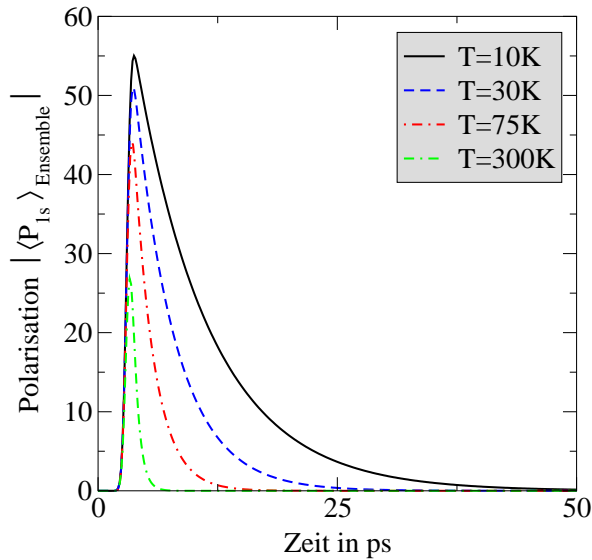


Abbildung 3.11: Zeitentwicklung der Polarisation bei unterschiedlichen Temperaturen. Der Abfall ist monoexponentiell, wie in einer logarithmischen Auftragung leicht gesehen werden kann (nicht gezeigt).

allgemeine Tendenz feststellbar. So nimmt mit zunehmender Temperatur das Maximum der Polarisation beständig ab, ebenso wie die Abfallszeit. Der Abfall selber ist monoexponentiell, was auf eine zeitlich konstante Zerfallsrate hinweist. Das Verhalten ist leicht zu verstehen. Aufgrund konstanter Anregungsbedingungen und der nicht temperaturabhängigen Materie-Lichtwechselwirkung wird in jeder dieser Kurven der gleiche Betrag an Polarisation erzeugt. Die Prozesse, welche zum Zerfall führen, sind in geordneten Systemen dagegen die strahlende Rekombination und die phononenassistierte Generation von inkohärenter Exzitonendichte, vgl. Abb. 2.2. Der Ausstreuprozess von der Polarisation zu der inkohärenten Exzitonendichte hin nimmt mit zunehmender Temperatur zu, so daß ein früherer und stärkerer Abfall der Polarisation zu sehen ist.

Das Zeitverhalten der inkohärenten Gesamtexzitonendichte \mathcal{N} , welche durch die Polarisation \mathcal{P} erzeugt wird, ist in Abb. 3.12 zu sehen. Mit zunehmender Temperatur sind dabei folgende Tendenzen erkennbar:

- Die Anstiegszeit wird kürzer. Dies ist aufgrund des schneller stattfindenden Generationsprozesses zu erwarten gewesen.
- Der Abfall wechselt von einem mono- zu einem biexponentiellen Verhalten ($T > 30\text{K}$).
- Das Maximum nimmt zunächst rasch zu ($T < 75\text{K}$), um bei hohen Temperaturen ($T = 300\text{K}$) dann wieder abzufallen.

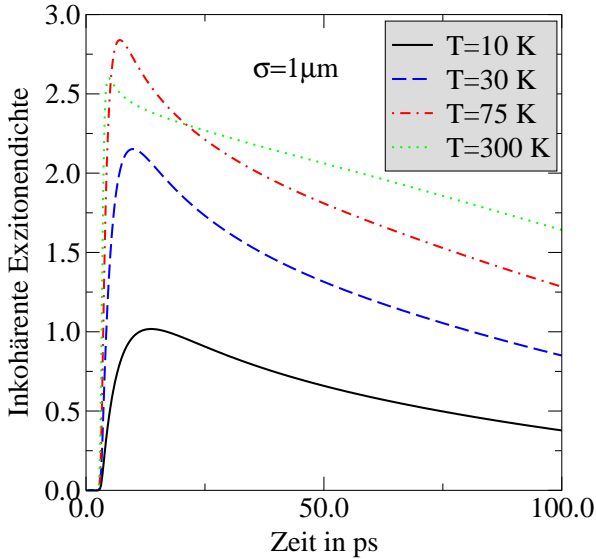


Abbildung 3.12: Zeitentwicklung des inkohärenten Anteils der Exzitonendichte bei unterschiedlichen Temperaturen.

Um die beiden letzten Punkte verstehen zu können, muß man sich allerdings zuerst die Zeitentwicklung der Relativimpulsverteilung, Abb. 3.13, anschauen. Zu erkennen sind zwei Spitzen in der Verteilung, deren Lage offensichtlich zeitlich konstant ist. Anhand von Abb. 3.14 ist erkennbar, daß diese Spitzen den Schnittpunkten der Exziton-Phonon q_{phon} und der Exziton-Photon Dispersionen q_{phot} entsprechen. In einem streng zweidimensionalen System wären allerdings nur Streuprozesse an diesen beiden Punkten der Dispersionskurven möglich. Hier jedoch werden Phononen und Photonen dreidimensional behandelt, wodurch ein zusätzlicher Impuls durch die z-Komponente aufgenommen (Photonen) bzw. abgegeben (Phononen) werden kann. Dementsprechend können Exzitonen nur für $q_{||} \geq p_{phon}$ erzeugt werden und nur für $q_{||} \leq p_{phot}$ strahlend zerfallen. Abhängig von der Temperatur finden dann noch Streuprozesse der Exzitonen mit Phononen statt, welche eine Umverteilung bewirken. Diese Streuung ist in den Impulsvektoren nicht eingeschränkt und führt zu einem „Verschmieren“ der scharfen Kanten und einer Verbreiterung der Verteilung.

Anhand der Dispersionsrelationen wird deutlich, daß optische Phononen kaum einen Beitrag zur phononenassistierten Generation der inkohärenten Exzitonendichte liefern können. Der Schnittpunkt mit der 1s-Exzitondispersion liegt bei so großen Relativimpulsen, so daß das zugehörige Matrixelement nahezu verschwindet.

Betrachtet man unter diesen Gesichtspunkten die Energieverteilung, Abb. 3.13, so ist zu frühen Zeiten ($t=3ps$) zunächst nur die Generation von Exzitonendichte erkennbar (2+3), welche zu der Spitze bei q_{phon} führt. Zu späteren Zeiten ($t=8ps$) wird zum einen die Exzitonendichte umverteilt (1-3), zu sehen in einer Verbreiterung der Verteilung und einem Auffüllen der Zustände bei kleinen Wellenzahlen. Dabei setzt gleichzeitig der strahlende Zerfall ein (1+2). Da dieser nur für $q_{||} \leq q_{phot}$ stattfinden kann, kommt es zu einer Entleerung der Dich-

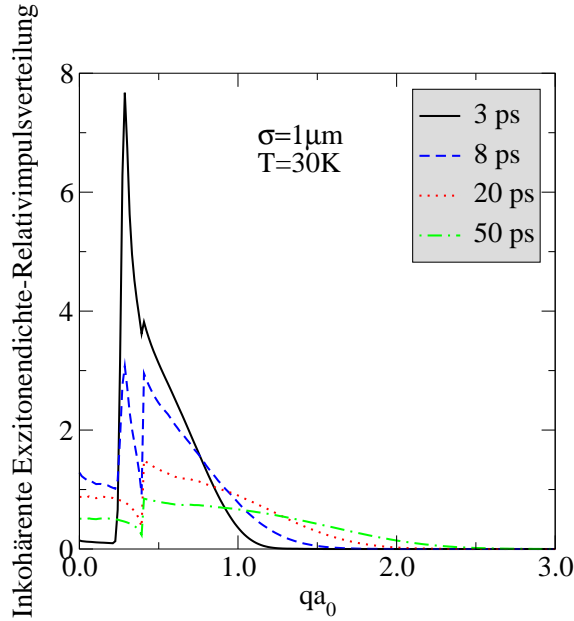


Abbildung 3.13: Zeitentwicklung der Relativimpulsverteilung des inkohärenten Anteils der Exzitonendichte bei $T=30\text{K}$. Die beiden Spitzen in der Verteilung korrespondieren zu den Schnittpunkten in den Dispersionsrelationen zwischen Exzitonen, Phononen und Photonen.

te für kleinere Wellenzahlen und eine zweite Spitze bei $q_{\parallel} = q_{phot}$ erscheint. Zu noch späteren Zeiten ($t=50\text{ ps}$) ist die Polarisation bereits vollständig zerfallen und es kann keine neue Dichte mehr generiert werden. Dominant sind nun die Umverteilungs- und Zerfallsprozesse. Die Phononspitze q_{phon} verschwindet also und es ist nur noch die Kante bei q_{phot} erkennbar, welche die Grenze des strahlenden Zerfalls kennzeichnet.

Die temperaturabhängige Dynamik der inkohärenten Gesamtexzitonendichte kann nun mit Hilfe der Relativimpulsverteilung erklärt werden. Entscheidend ist dabei, wie hoch der Anteil der Exzitonen mit $q_{\parallel} \leq q_{phot}$ an der Gesamtexzitonendichte ist. Da dieser stark von den Exziton-Phonon Streuprozessen beeinflusst wird, ist dieser Anteil sowohl zeit- wie auch temperaturabhängig. In

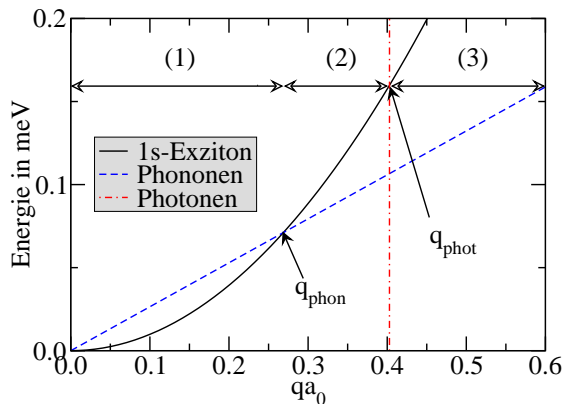


Abbildung 3.14: Dispersionsrelation für Exzitonen, Phononen und Photonen. q_{\parallel} ist die Wellenzahl in der Quantenfilmebene. Die Schnittpunkte q_{phon} und q_{phot} sind als die Spitzen in Abb. 3.13 zu sehen. Die Generation von Exzitonendichte ist nur für $q_{\parallel} \geq q_{phon}$ (2+3) und der strahlende Zerfall nur für $q_{\parallel} \leq q_{phot}$ (1+2) möglich. Exziton-Phonon Streuung kann für alle q_{\parallel} (1+2+3) stattfinden.

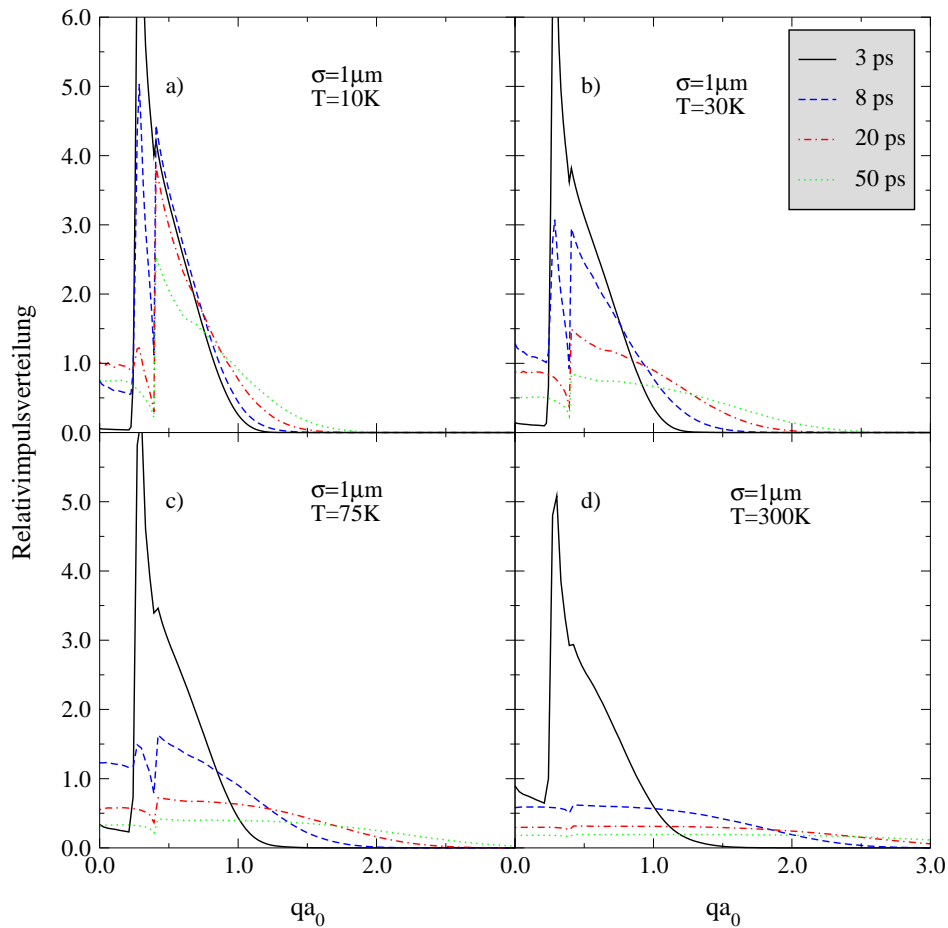


Abbildung 3.15: Verteilung der Relativimpulse der inkohärenten Exzitonendichte bei unterschiedlichen Temperaturen.

Abb. 3.15 sind die Relativimpulsverteilungen für unterschiedliche Temperaturen zu verschiedenen Zeiten dargestellt. Dabei sind zwei entgegengesetzte Prozesse erkennbar:

1. Mit zunehmender Temperatur finden phononenassistierte Streuprozesse auf immer kürzeren Zeitskalen statt, zu sehen im wesentlich schnelleren Verschwinden der generations- und zerfallsbedingten Strukturierung der Verteilung. Dies begünstigt den Auffüllprozeß der Exzitonen bei kleinen Relativimpulsen und führt zu einem schnelleren Zerfall der inkohärenten Exzitonendichte.
2. Mit zunehmender Temperatur wird die Gleichgewichtsverteilung immer breiter, wodurch der Prozentsatz der Exzitonen, welche strahlend zerfallen können, immer weiter abnimmt. Dieser Prozeß resultiert in einer größeren

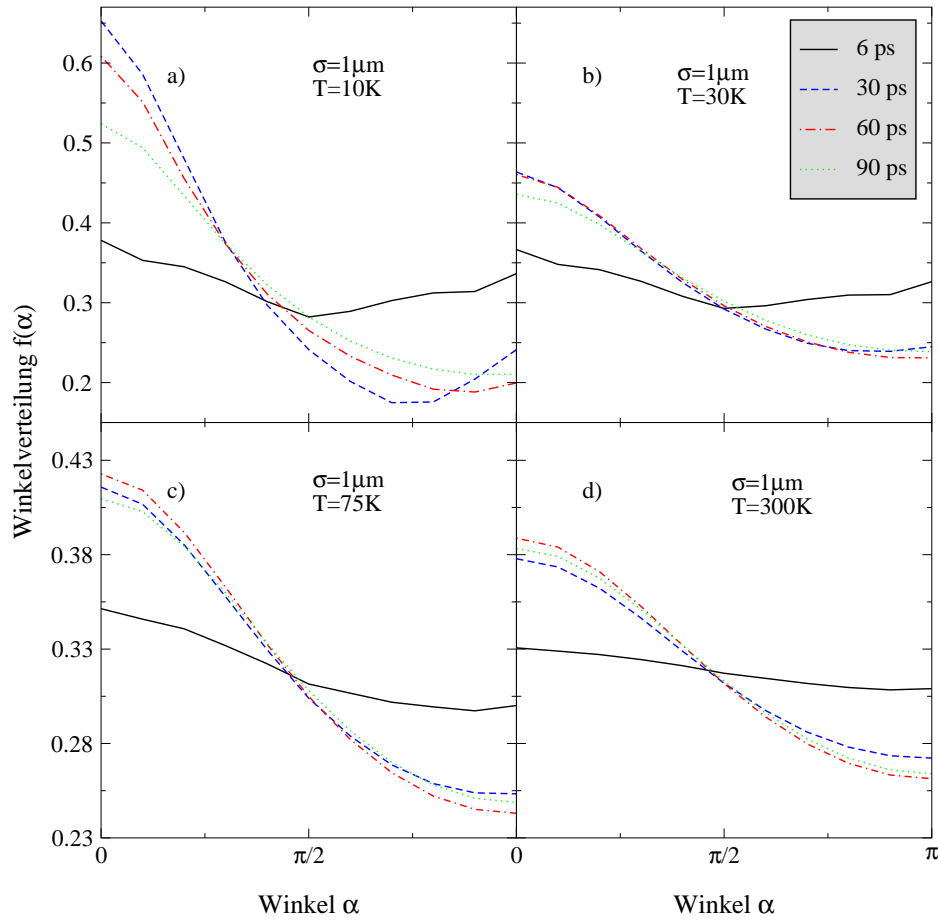


Abbildung 3.16: Winkelverteilung der inkohärenten Exzitonendichte in geordneten Systemen. Zu sehen sind die mittleren Winkel zwischen der Propagationsrichtung der Exzitonen und dem Radialvektor des Anregungsgebietes für Temperaturen von 10K bis 300K.

Lebensdauer der Exzitonen. Die Breite der Verteilung wird dabei maßgeblich durch die Bose-Einstein Verteilung der Phononen bestimmt. Ebenfalls wird mehr Exzitonendichte im gleichen Zeitraum aus der Polarisation generiert, wodurch der Anstieg der Exzitonendichte stärker wird.

Das Resultat ist nicht nur das nichtmonotone Verhalten des Maximums der inkohärenten Exzitonendichte, sondern auch das Verhältnis des kohärenten (bedingt durch den Zerfall der Polarisation) zum inkohärenten Anteil verändert sich dementsprechend. Im Folgenden soll nun geklärt werden, welchen Einfluß die bisher gefundenen Mechanismen auf die raum-zeitliche Dynamik haben. Dabei ist zur vollständigen Charakterisierung der räumlichen Dynamik neben der Kenntnis der Verteilung der Relativimpulse auch die der zugehörigen Winkel notwendig.

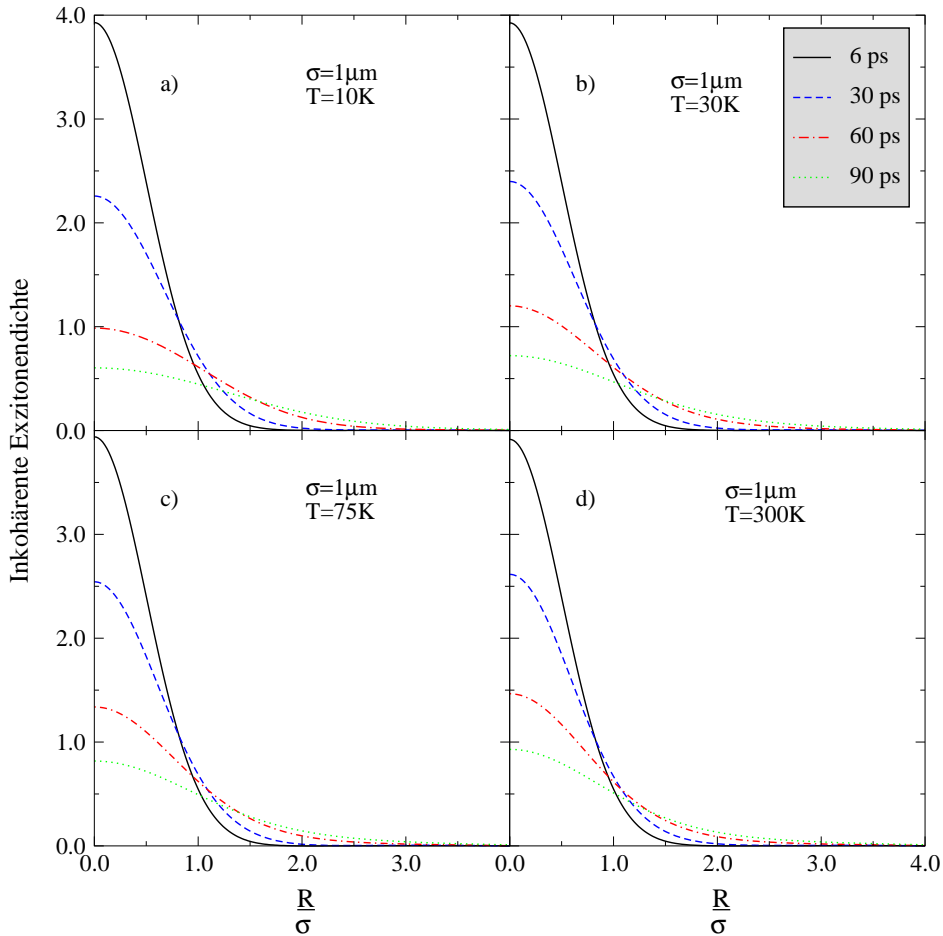


Abbildung 3.17: Ortsverteilung der inkohärenten Exzitonendichte für $T=10\text{K}$ (a), $T=30\text{K}$ (b), $T=75\text{K}$ (c) und $T=300\text{K}$ (d) zu unterschiedliche Zeiten. Erkennbar ist eine langsamere Propagation mit zunehmender Temperatur.

In Abb. 3.16.a-d) sind diese Informationen für die gleichen Temperaturen wie bei den Relativimpulsverteilungen, Abb. 3.15.a-d), zu sehen. Erkennbar sind:

- Zu Beginn ($t < 6\text{ps}$) weist die Verteilung Maxima bei den Winkeln 0 und π auf. Dies ist umso ausgeprägter, je geringer die Temperatur ist. Das entspricht einer bevorzugten Propagation der Exzitonen (anti)parallel zum Radialvektor. Auf diesen Zeitskalen ist die phononenassistierte Generation der Exzitonen dominant, so daß diese die Ursache für diese Eigenart in der Verteilung sein muß.
- Auf längeren Zeitskalen betrachtet (ca. 30-60ps), verändert sich die Verteilung, indem diese nun vom Winkel 0 zum Winkel π kontinuierlich abnimmt. Dabei wird die Differenz zwischen Maximum ($\alpha = 0$) und Minimum ($\alpha = \pi$)

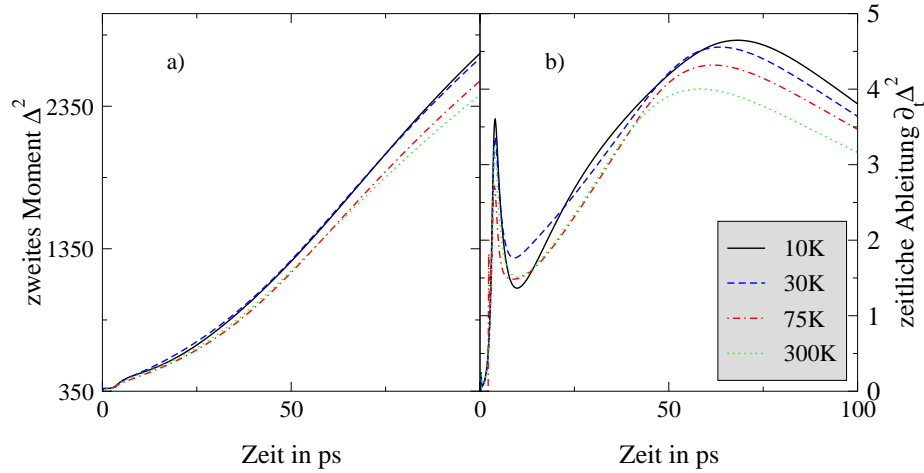


Abbildung 3.18: Zweites Moment der inkohärenten Exzitonendichte a) und dessen Zeitableitung b) für unterschiedliche Temperaturen. Erkennbar ist eine langsamere Wellenpaketdynamik mit zunehmender Temperatur. Anhand der Zeitableitung wird deutlich, daß eine Klassifizierung des Transportregimes wie in bisherigen Arbeiten [9, 19, 22, 6] nicht mehr möglich ist.

mit zunehmender Temperatur immer kleiner. Physikalisch entspricht diese Umverteilung einer bevorzugten Propagation aus dem Anregungsgebiet hinaus, wobei bei hohen Temperaturen diese Richtungsauswahl weniger ausgeprägt ist. Dies ist eine direkte Konsequenz der durch höhere Temperaturen verkürzten freien Weglänge der Exzitonen. Die damit einhergehende größere Anzahl von Streuprozessen führt zu einer Gleichverteilung der Winkel („Random Walk“). Im Grenzfall verschwindender Exziton-Phonon Streuung würde die freie Propagation vorliegen und die Spitze beim Winkel 0 immer stärker und schärfer werden.

- Zu noch späteren Zeiten (60-90ps) erfolgt eine Art „Rückentwicklung“, d.h. die Winkelverteilung wird flacher. Damit ist eine langsamere Propagation der Wellenpakete verbunden. Die Ursache liegt in der Strukturierung der Relativimpulsverteilung. Bei großen Zeiten ist die Polarisation irgendwann zerfallen und der Anteil der neu generierten Exzitonendichte wird immer kleiner. Damit verschiebt sich die Relativimpulsverteilung über Streuprozesse, was wiederum zur Änderung der Winkelverteilung führt.

Der Einfluß der Winkel- und Relativimpulsverteilung auf die Wellenpaketdynamik der inkohärenten Exzitonendichte im Ortsraum ist in Abb. 3.17 dargestellt. Die Wellenpaketdynamik findet dabei bei niedrigen Temperaturen, Abb. 3.17.a), auf wesentlich kürzeren Zeitskalen statt als bei hohen, Abb. 3.17.d), wobei die anfängliche Gaußstruktur der Verteilung erhalten bleibt. Als Kriterium für das

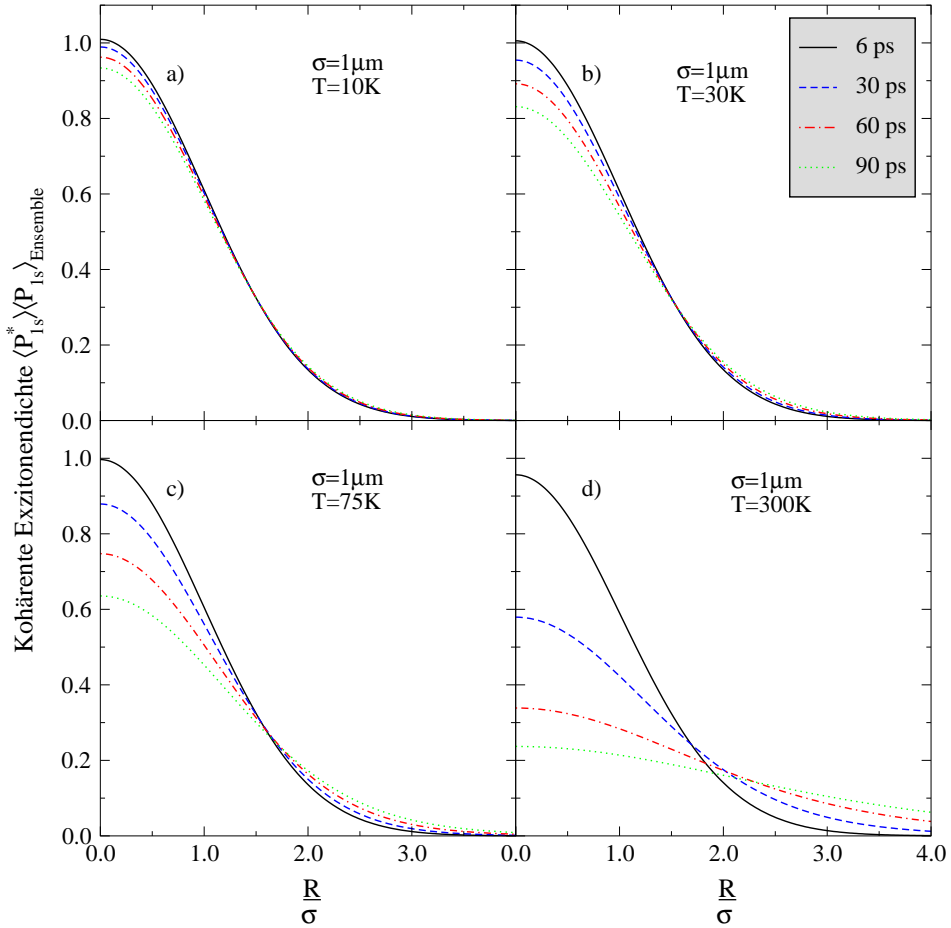


Abbildung 3.19: Zeitentwicklung des kohärenten Anteils $\left| \left\langle P(\vec{R}) \right\rangle_E \right|^2$ der Exzitonendichte. Zu sehen ist die räumliche Verteilung zu unterschiedlichen Zeiten und Temperaturen von 10K bis 300K.

Transportregime wurde bisher stets das zweite Moment der Verteilung, Glg. (3.6), herangezogen. Betrachtet man diese Größe bzw. deren Zeitableitung in der hier vorliegenden Situation, Abb. 3.18, so erkennt man, daß nunmehr weder ein parabelförmiger noch ein linearer Verlauf in der Zeitableitung erkennbar ist. Eine Einteilung in ballistisches oder diffusives Regime ist daher nicht mehr möglich.

Die Dynamik der inkohärenten Exzitonendichte erfolgt im Fall höherer Temperaturen langsamer als bei niedrigen Temperaturen, zu sehen in dem langsameren Anstieg des zweiten Momentes in Abb. 3.18.a). Die Zeitableitung in Abb. 3.18.b) zeigt die zeitlichen Änderungen jedoch noch viel deutlicher. Die Spitze bei kleinen Zeiten fällt zeitlich mit dem optischen Puls zusammen. Der anschließende Anstieg der Zeitableitung ist uneinheitlich und spiegelt die gegenläufigen Prozesse bei der Generation, dem Zerfall, freier Propagation und Streuung an Phononen

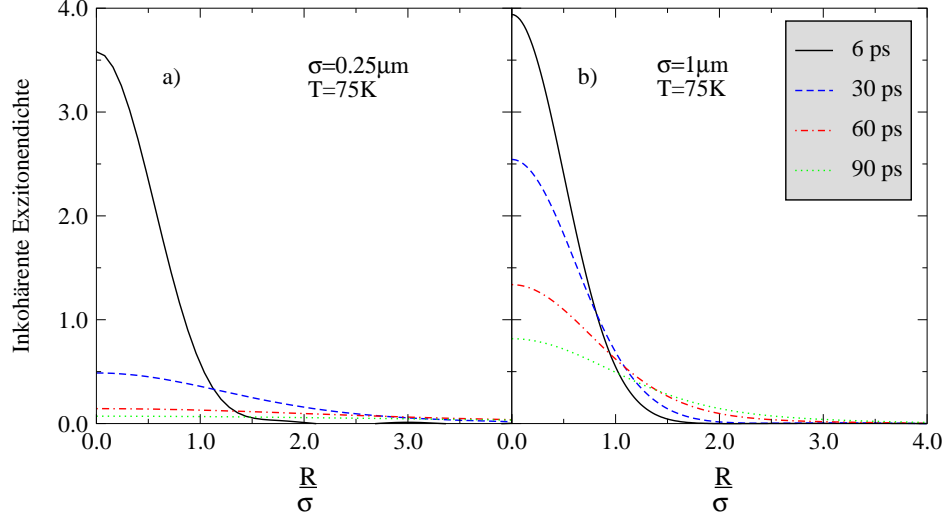


Abbildung 3.20: Inkohärente Exzitonendichte bei unterschiedlichen Fokussierungen. Im Vergleich sind die räumlichen Verteilungen für $\sigma = 0.25\mu m$ (a) und $\sigma = 1\mu m$ (b) bei der Temperatur von $T=75K$ und zu gleichen Zeiten.

wieder. Der anschließende Abfall läßt sich dagegen der „Rückentwicklung“ in der Winkelverteilung zuordnen. Dieser Rückgang ist in Übereinstimmung mit der Winkelverteilung bei niedrigen Temperaturen am stärksten und setzt auch bei der niedrigsten Temperatur zuletzt ein, da hier die Polarisation, deren Zerfall diesen Prozeß in Gang setzt, am langsamsten abnimmt, vgl. Abb. 3.11.

Betrachtet man den kohärenten Anteil der Exzitonendichte

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{P}_{1s}^* \rangle_E \langle \mathcal{P}_{1s} \rangle_E (\vec{R}) &= \sum_{\vec{Q}, \vec{q}} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \left\langle \mathcal{P}_{1s}^* \left(\vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2} \right) \right\rangle_E \left\langle \mathcal{P}_{1s} \left(\vec{q} + \frac{\vec{Q}}{2} \right) \right\rangle_E \\
 &= \left| \left\langle \mathcal{P}_{1s}(\vec{R}) \right\rangle_E \right|^2, \tag{3.116}
 \end{aligned}$$

so ist festzustellen, daß unterschiedliche Temperaturen ebenfalls eine Auswirkung auf diese Anteile haben. Dabei ändert sich die räumliche Breite bei 10K (Abb. 3.19.a)) zur wenig, während diese Effekte bei höheren Temperaturen (Abb. 3.19.d)) immer stärker werden. Auffallend ist allerdings, daß hier der entgegengesetzte Effekt wie bei dem inkohärenten Anteil beobachtet werden kann, d.h. die Verteilung verbreitert sich mit zunehmender Temperatur immer schneller. Anhand der Gleichung (2.115) ist erkennbar, daß der Ausstreuterm durch die Phononen als einziger temperaturabhängiger Anteil die Ursache ist. In Abb. 3.21 sind dazu die Dispersionsrelationen der Phononen und der 1s-Exzitonen, einmal mit $Q = 0$ und einmal mit $Q > 0$, gezeigt. Die Phononengerade mit negativer Steigung entspricht dem Anteil der Phononenemission. Bei schwacher Fokussierung $\sigma = 1\mu m$ sind die Schwerpunktsimpulse der Polarisation auf $Qa_0 < 0.1$

begrenzt. Nimmt man diesen Grenzwert, dann sind Streuprozesse nur für $q \geq q_1$ aufgrund von Phononabsorption möglich. Mit erhöhter Temperatur erfolgt diese bei großen Impulsen bevorzugt ablaufende Streuung schneller, was zu einem schnelleren Zerfall der Polarisation bei großen Impulsen führt. Die Verteilung wird daher durch die Streuung an Phononen im Impulsraum schmaler, was einer Verbreiterung im Ortsraum entspricht.

Um beurteilen zu können, welchen Einfluß die räumliche inhomogene Situation auf die Ergebnisse hat, werden die einzelnen Größen noch einmal in Abhängigkeit der Größe des Anregungsgebietes betrachtet. Begonnen wird mit der Ortsver-

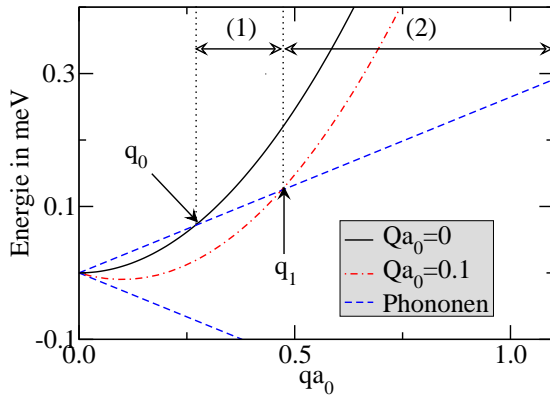


Abbildung 3.21: Dispersionsrelation bei schwach fokussierter Anregung $\sigma = 1\mu m$. Im homogenen Fall ($Q = 0$) läuft Phononabsorption im Bereich (1+2) ab. Bei $Q > 0$ werden die möglichen Impulse eingeschränkt (2).

teilung der inkohärenten Exzitonendichte. In Abb. 3.20.a) ist deutlich zu erkennen, daß mit einer Fokussierung von $\sigma = 0,25\mu m$ die Wellenpaketpropagation sehr viel schneller abläuft als bei $\sigma = 1\mu m$ Abb. 3.20.b). Die Ursache der schnelleren Dynamik sind:

1. Da das Anregungsgebiet bei stärkerer Fokussierung kleiner ist, können die Exzitonen es auch eher bei gleichen Impulsen verlassen. Aufgrund der Normierung der Abszisse auf σ , verbreitert sich die Verteilung daher wesentlich schneller.
2. Mit stärkerer Fokussierung wird ein größerer Photonenimpuls auf die Exzitonen übertragen, der in der Folge wieder zu einer breiteren Schwerpunktsimpulsverteilung führt. Damit erfolgt auch die Propagation der Exzitonen schneller.

Die Verteilung der Relativimpulse, Abb. 3.22, wird durch die stärkere Fokussierung ebenfalls beeinflusst. Dabei ist bei $\sigma = 0,25\mu m$ der Beitrag der Schwerpunktsimpulse in der energierhaltenden δ -Distribution in den Phononen-Streuratzen, vgl. Glg. (3.50),

$$\delta \left(\frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\vec{q} \pm \frac{\vec{Q}}{2} \right)^2 - \left(\vec{k} + \vec{q} \pm \frac{\vec{Q}}{2} \right)^2 \right] \pm \hbar\omega_{kk_z} \right) \quad (3.117)$$

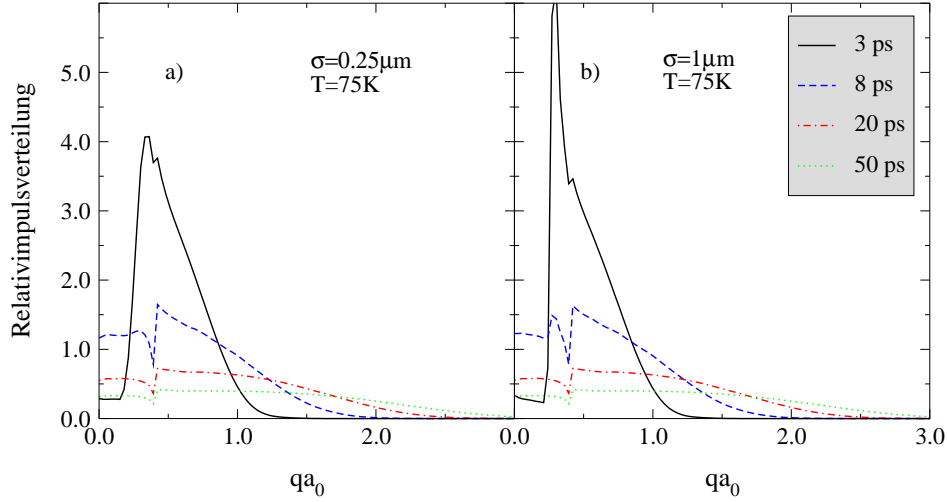


Abbildung 3.22: Inkohärente Exzitonendichte bei unterschiedlichen Fokussierungen. Verglichen werden die Relativimpulsverteilungen für $\sigma = 0.25\mu\text{m}$ (a) und $\sigma = 1\mu\text{m}$ (b) bei der Temperatur von $T=75\text{K}$ und zu gleichen Zeiten.

nicht mehr vernachlässigbar und führt zu einem Ausschmieren der scharfen Kante beim Generationsprozeß wie auch beim strahlenden Zerfall.

Der Einfluß der stärkeren räumlichen Fokussierung ist auch deutlich in der Winkelverteilung, Abb. 3.23, zu sehen. Während bei $\sigma = 1\mu\text{m}$, Abb. 3.23.b) bei kleinen Zeiten die Bevorzugung der Winkel $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi$ noch relativ schwach war, ist sie bei $\sigma = 0.25\mu\text{m}$, Abb. 3.23.a) sehr deutlich ausgeprägt. Mit zunehmender Zeit ist dabei deutlich zu sehen, wie sich die Verteilung zugunsten des Winkels $\alpha = 0$ ändert. Die Differenz zwischen Maximum und Minimum der Verteilung ist dabei ebenfalls ein wenig größer als bei der schwach fokussierten Situation.

Die Ortsverteilung des kohärenten Anteils der Exzitonendichte, Abb. 3.24, liefert ein weiteres unerwartetes Resultat. So ist bei kleinen Anregungsgebieten offensichtlich eine Verringerung der räumlichen Breite zu beobachten. Dieser Effekt kann wiederum anhand der Dispersionsrelationen erklärt werden. In Abb. 3.25 ist die nun typische Situation dargestellt. Aufgrund der starken Fokussierung ist die Schwerpunktsimpulsverteilung wesentlich breiter als zuvor. Die Größenordnung der Schwerpunktsimpulse erreicht nun den Wert $Qa_0 \approx 1$. Damit laufen neben den Absorptions- auch Emissionsprozesse ab. Letztere (2) ermöglichen jedoch die Streuung und damit den Zerfall der Polarisation bei kleinen Impulsen. Die prinzipiell möglichen Prozesse der Absorption (1) werden allerdings durch die Exziton - Wellenfunktionen im Matrixelement, welche für Impulse $qa_0 > 1 \approx 0$ ist, stark unterdrückt. Effektiv wird daher bei starker Fokussierung die Streuung an Phononen und der damit verbundene Zerfall der Polarisation bei kleinen Im-

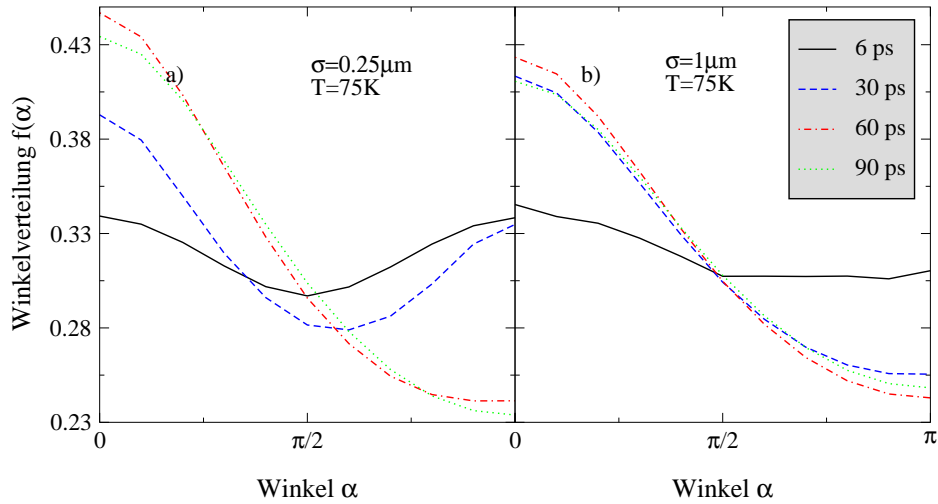


Abbildung 3.23: Inkohärente Exzitonendichte bei unterschiedlichen Fokussierungen. Zu sehen sind die Winkelverteilungen für $\sigma = 0.25\mu\text{m}$ (a) und $\sigma = 1\mu\text{m}$ (b) bei der Temperatur von $T=75\text{K}$ und zu gleichen Zeiten.

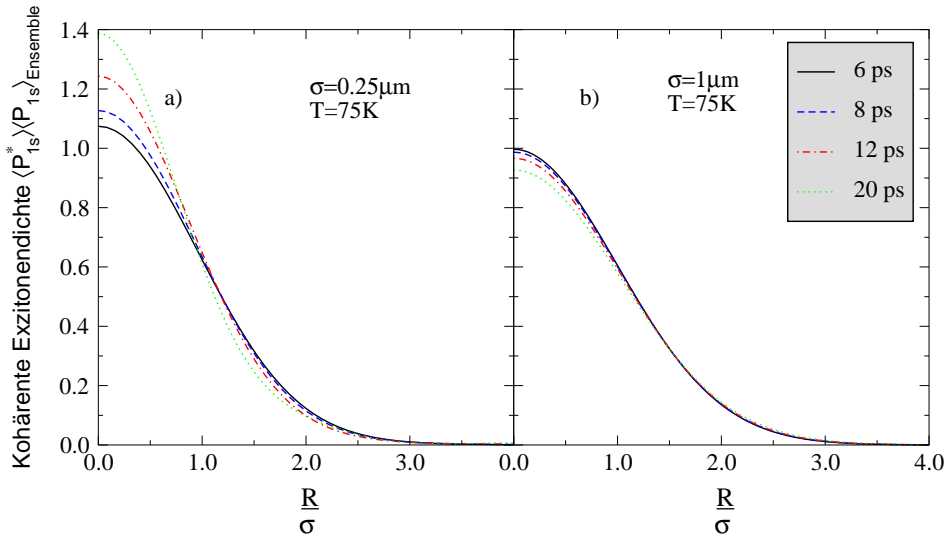


Abbildung 3.24: Kohärente Exzitonendichte bei unterschiedlichen Fokussierungen. Im Vergleich sind die Ortsverteilungen für $\sigma = 0.25\mu\text{m}$ (a) und $\sigma = 1\mu\text{m}$ (b) bei der Temperatur von $T=75\text{K}$ und zu gleichen Zeiten.

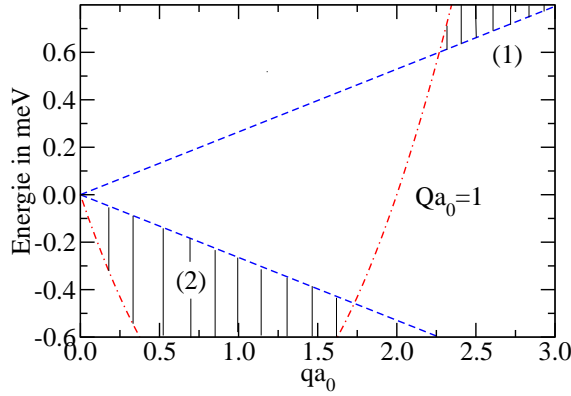


Abbildung 3.25: Dispersionsrelation bei stark fokussierter Anregung $\sigma = 0.25\mu\text{m}$. Im schraffierten Bereich (1) läuft Phononabsorption, im Bereich (2) Phononemission ab.

pulsen bevorzugt. Die dadurch verursachte breitere Schwerpunktsverteilung führt zu einer Verschmälerung im Ortsraum.

Zusammenfassend läßt sich für geordnete Systeme also sagen, daß die bisher bekannten Resultate für gaußförmige Anfangsverteilungen durch den Generationsprozeß maßgeblich modifiziert werden.

- Die Stärke der Exziton-Phononwechselwirkung bestimmt die Zeitskalen, auf denen die Propagation abläuft. Dabei wird mit zunehmender Temperatur die inkohärente Exzitonendichte langsamer und die kohärente schneller.
- Die Änderung der räumlichen Fokussierung verursacht eine Änderung in der Wellenpaketdynamik. Die inkohärente Exzitonendichte propagiert dadurch schneller, während sich der kohärente Anteil „räumlich zusammenzieht“.
- Der phononenassistierte Generationsprozeß verursacht die Strukturierung der der Relativimpulsverteilung der inkohärenten Exzitonendichte, welche nur oberhalb der Relativimpulse $q_{\parallel} \geq q_{\text{phon}}$ erzeugt wird. Mit zunehmender Fokussierung des einfallenden Lasers verschmiert diese scharfe Grenze.

3.4.2.2 Ungeordnete Systeme bei $T=0$

Weist das System zusätzlich noch Unregelmäßigkeiten in der Geometrie auf, so kommt diese Symmetriebrechung als weitere Wechselwirkung ins Spiel. Da sich hier auf die 1s-Zustände beschränkt wird, kann die Unordnungskorrelationsfunktion, Glg. (2.50), direkt angegeben werden:

$$\begin{aligned} \langle U_{exz}^{1s1s}(k)U_{exz}^{1s1s}(k') \rangle_E &= \frac{\pi^5 \hbar^4 \alpha^2 \beta^2}{L_z^6 A} e^{-\frac{k^2 \beta^2}{4}} \delta_{-k,k'} \\ &\times \left[\frac{1}{m_e^z} \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{m_{hh} a_0 k}{4M}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{1}{m_{hh}^z} \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{m_e a_0 k}{4M}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} \right]^2 \end{aligned} \quad (3.118)$$

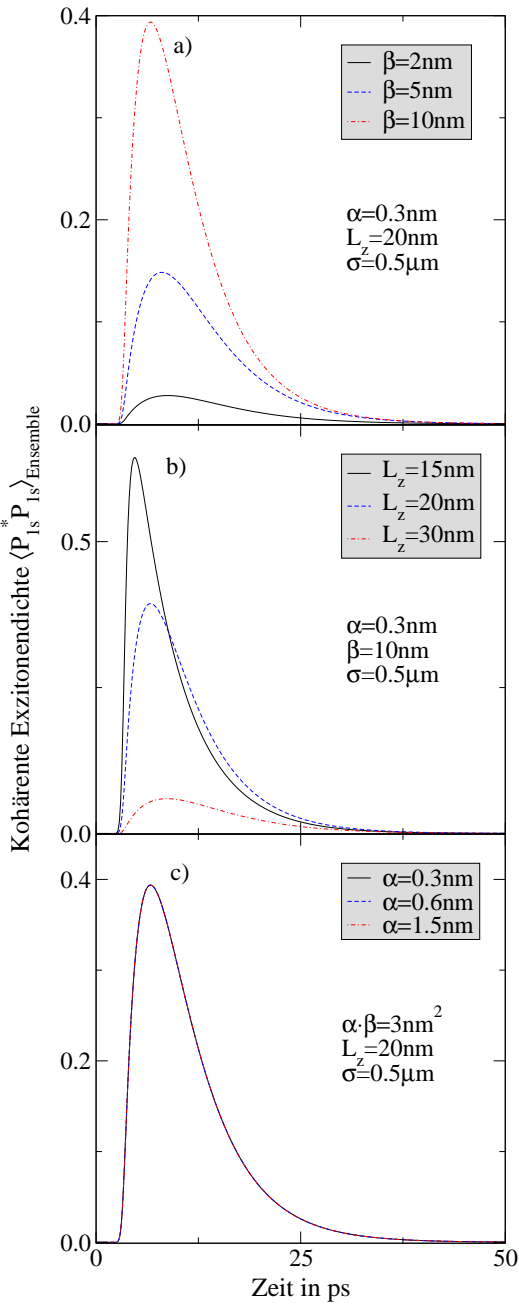


Abbildung 3.26: Zeitentwicklung der kohärenten Exzitonendichte für verschiedene Unordnungsconfigurations. Zu sehen sind Vergleiche, wobei entweder β (a), L_z (b) oder α und β simultan verändert wurden (c).

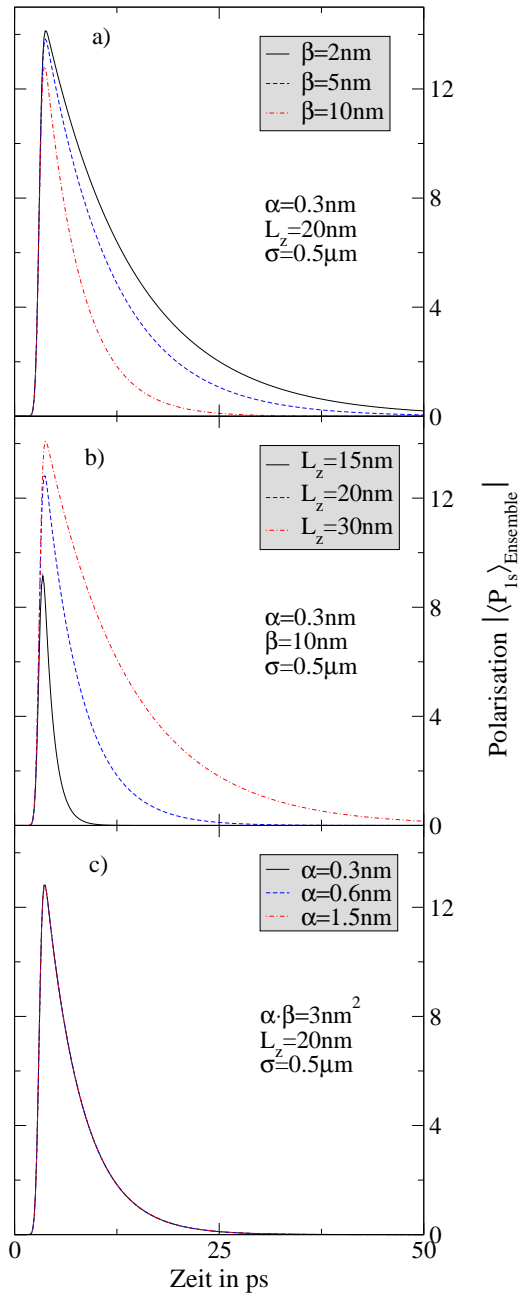


Abbildung 3.27: Zeitentwicklung der Polarisation für verschiedene Unordnungsconfigurations. Zu sehen sind Vergleiche, wobei entweder β (a), L_z (b) oder α und β simultan verändert wurden (c).

Dabei wird zunächst der Fall $T = 0$, d.h. kein Wärmebad, behandelt. Bei dieser Annahme kann keine inkohärente Exzitonendichte erzeugt werden und die Anregung verbleibt vollständig in den kohärenten Anteilen, d.h. der Polarisation $\langle \mathcal{P}_{1s} \rangle_E$ und der kohärenten Exzitonendichte $\langle \mathcal{P}_{1s}^* \mathcal{P}_{1s} \rangle_E$. Die räumliche Fokussierung wurde zur Verstärkung der vorhandenen Effekte auf $\sigma = 0.5 \mu m$ reduziert. Bezugnehmend auf die Parameter, die hier für die Korrelationsstärke α und -länge β der Unordnung gewählt werden, ist zu sagen, daß $\alpha = 0.3 nm$ im Bereich einer Monolagenfluktuation von GaAs entspricht und β „physikal sinnvoll“ gewählt wurde. Letzteres bedarf einiger Erläuterungen und hängt mit der Art des verwendeten Modells zusammen.

Da die Gleichungen für die unordnungsgemittelten Größen gelten sollen, darf die Korrelationslänge u.a. nicht größer als der Exzitonen-Bohrradius sein. Andernfalls lägen Exzitonen in unterschiedlichen tiefen Potentialtöpfen vor, welche man anhand verschiedener Absorptionslinien sehen müßte. Diese Situation soll *nicht* betrachtet werden. Andererseits darf die Korrelationslänge auch nicht zu klein werden, denn im Rahmen der Herleitung muß noch immer gelten, daß die Unordnung über einer Einheitszelle nur schwach variieren darf. Kleine Korrelationslängen erfordern dann eine Theorie, welche über die Dipolnäherung, Glg. (2.5), hinausgeht. Der Bereich von β ist so auf $1 - 10 nm$ eingeschränkt. Damit liegen im Prinzip 3 unabhängige Parameter vor, welche variiert werden können, nämlich Korrelationslänge α , -stärke β und die Quantenfilmbreite L_z . Allerdings wird sich herausstellen, daß diese Parameter nicht unabhängig voneinander sind, so daß nicht alle möglichen Kombinationen untersucht werden müssen.

In Abb. 3.26 und 3.27 sind die Zeitentwicklungen der kohärenten Gesamtexzitonendichte \mathcal{K} und der Gesamtpolarisation \mathcal{P} dargestellt. Dabei wurden die Parameter α , β und die Quantenfilmbreite L_z variiert. Anhand der Darstellungen 3.26.c) und 3.27.c) ist ersichtlich, daß das System mit den hier gewählten Parametern offensichtlich nur von dem Produkt $\alpha \cdot \beta$, nicht jedoch von α oder β allein beeinflusst wird.⁶ Daher ist es ausreichend, bei festgehaltener Quantenfilmbreite und Korrelationslänge sich die Änderungen bei wechselnder Korrelationsstärke anzuschauen.

Der zweite relevante Parameter ist die variierende Breite L_z der Heterostruktur. Deren Einfluß ist in den Abbildungen 3.26.b) und 3.27.b) zu erkennen. Da dieser Parameter mit der sechsten Potenz im Nenner des Exziton-Unordnungsmatrixelementes steht, verursacht eine Variation primär eine Änderung der Stärke der Wechselwirkung. Die dazu korrespondierenden Streuzeiten werden dementsprechend mit schmalere Strukturen immer kürzer. Die Konsequenz ist, daß die Polarisation schneller zur kohärenten Exzitonendichte hingestreut wird. Sichtbar wird dies in der Abnahme des Maximums der Polarisation bei gleichstarkem Anstieg sowie in dem schnelleren Dephasieren, Abb. 3.27.b). Da in dem momentan

⁶Hier nicht gezeigt, aber trotzdem geprüft wurde natürlich auch, ob dies auch in Bezug auf die Orts- oder Energieverteilungen zutrifft.

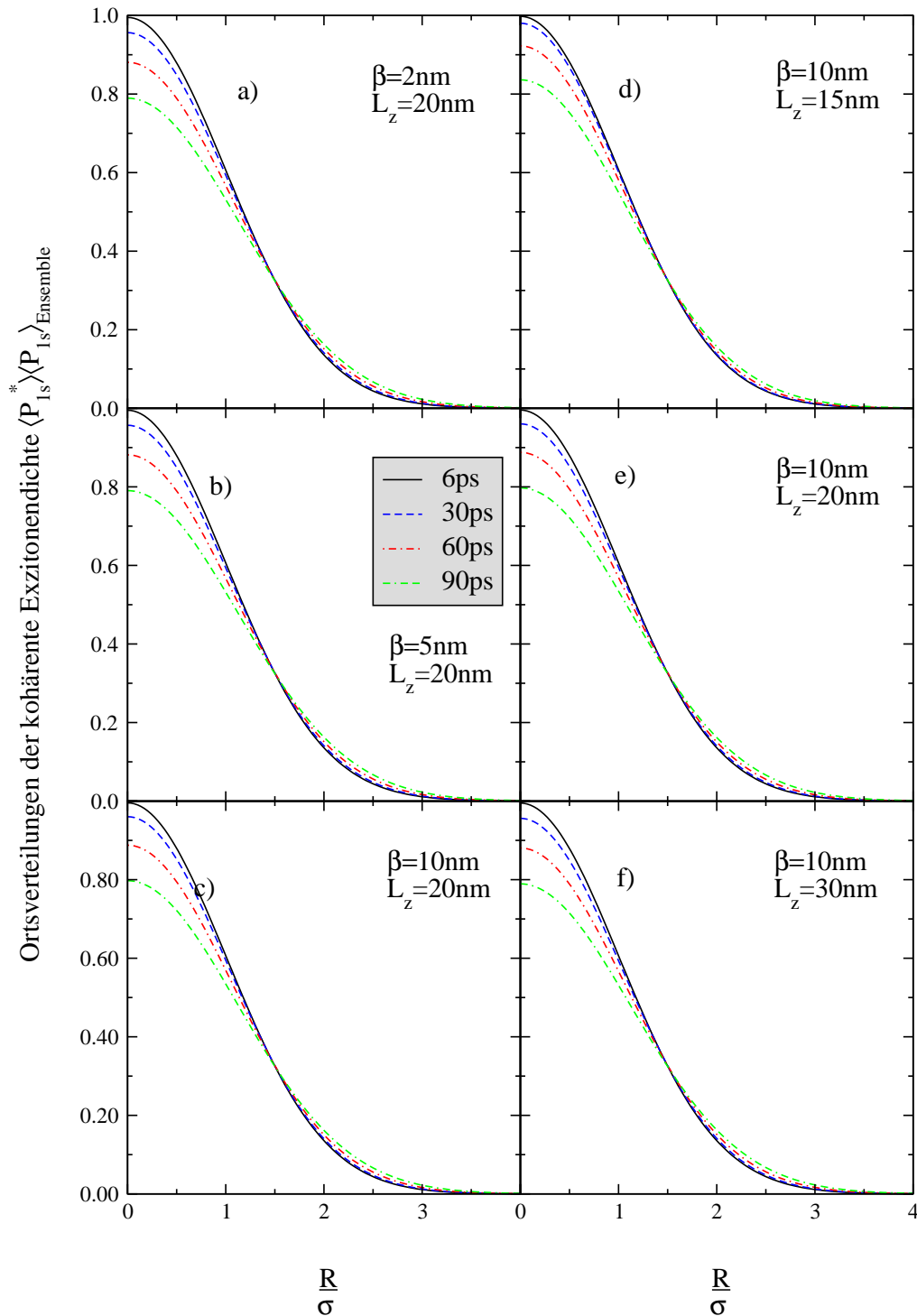


Abbildung 3.28: Zeitentwicklung der Polarisation. Zu sehen ist die Ortsverteilung bei variabler Korrelationslänge β ($\alpha = 0.3\text{nm}$, $L_z = 20\text{nm}$), a-c), und die Abhängigkeit von der Quantenfilmbreite L_z ($\alpha = 0.3\text{nm}$, $\beta = 10\text{nm}$), d-f).

betrachteten System die Unordnung die einzige Möglichkeit darstellt, kohärente Exzitonendichte zu erzeugen, ist verständlich, daß mit stärkerer Wechselwirkung auch die kohärente Exzitonendichte schneller ansteigen muß, vgl. Abb. 3.26.b). Im Gegensatz zu den Phononen und der inkohärenten Exzitonendichte bildet sich hier jedoch *kein* nichtmonotones Verhalten in Bezug auf den Maximalwert aus. Da die Ursache dazu in der Umverteilung der Relativimpulse zu finden war, ist hier also eine andere Dynamik zu erwarten.

In qualitativer Übereinstimmung dazu ist der Einfluß der Korrelationslänge, Abb. 3.27.a) und 3.26.a). Auch hier bedingt die Zunahme der Korrelationslänge β vorrangig die Verkürzung der Streuzeiten, vgl. Glg. (3.118). Allerdings geht β nur quadratisch in den Vorfaktor des Matrixelementes ein, so daß die Effekte nicht so stark ausfallen wie bei einer Reduktion der Filmbreite.

Die Ortsverteilung des Polarisationsanteils, Abb. 3.28, zeigt eine sehr schwache Abhängigkeit von den Unordnungsparametern. Dabei bewirkt eine Verbreiterung des Quantenfilmes, Abb. 3.28.d) bis Abb. 3.28.f), eine schnellere Propagation der Polarisation. Dieser Einfluß der Unordnung kann mit Hilfe der Exponentialfunktion im Matrixelement, Glg. (3.118), erklärt werden. Da im Fall der Unordnung prinzipiell alle Impulse gestreut werden können, legt primär das Matrixelement Einschränkungen fest. Dabei ist ersichtlich, daß kleine Impulse bevorzugt gestreut werden, wodurch die Polarisation dort auch schneller zerfällt. Dadurch resultiert eine verbreiterte Verteilung der Polarisation in den Schwerpunktsimpulsen, was wiederum zu einer schmaleren Verteilung im Ortsraum führt. Damit verursacht die Exziton-Unordnungsstreuung eine langsamere Dynamik des Wellenpaketes. Eine Bestätigung des Effektes ist bei der Variation der Korrelationslänge zu sehen. Vergrößert man diese, Abb. 3.28.a) bis Abb. 3.28.c), so fällt die Exponentialfunktion im Matrixelement schneller ab, was wiederum zu einer Bevorzugung kleiner Impulse bei Streuprozessen führt. Da jedoch die Exziton-Wellenfunktionen in Matrixelement ebenfalls die Impulse nach oben begrenzen, ist der Effekt nur sehr schwach ausgeprägt.

Die nächste Größe, welche betrachtet wird, ist die Relativimpulsverteilung, Abb. 3.29. Wiederum wurden die Korrelationslänge (a-c) und die Quantenfilmbreite (d-f) variiert. Allerdings scheinen die Unordnungsparameter keinerlei Einfluß auf die Zeitentwicklung dieser Verteilung zu besitzen. Allen Konfigurationen gemeinsam ist eine langsame Verschmälerung der gaußförmigen Struktur, und zwar auf den gleichen Zeitskalen. Dieser Effekt beruht auf der unordnungsassistierten Generation aus der Polarisation. Betrachtet man dazu die entsprechenden Anteile der Bewegungsgleichung (2.118), so lauten diese für die Relativimpulsverteilung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{K}(\vec{q}, t) &\sim \int d^2k |\mathcal{P}_{1s}(k, t)|^2 |U(\vec{k} + \vec{q})|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2}{2M} [k^2 - q^2]\right) \\ &\sim |\mathcal{P}_{1s}(q, t)|^2 h(\vec{q}) \end{aligned} \quad (3.119)$$

Dabei ist erkennbar, daß die Schwerpunktsimpulsverteilung der Polarisation di-

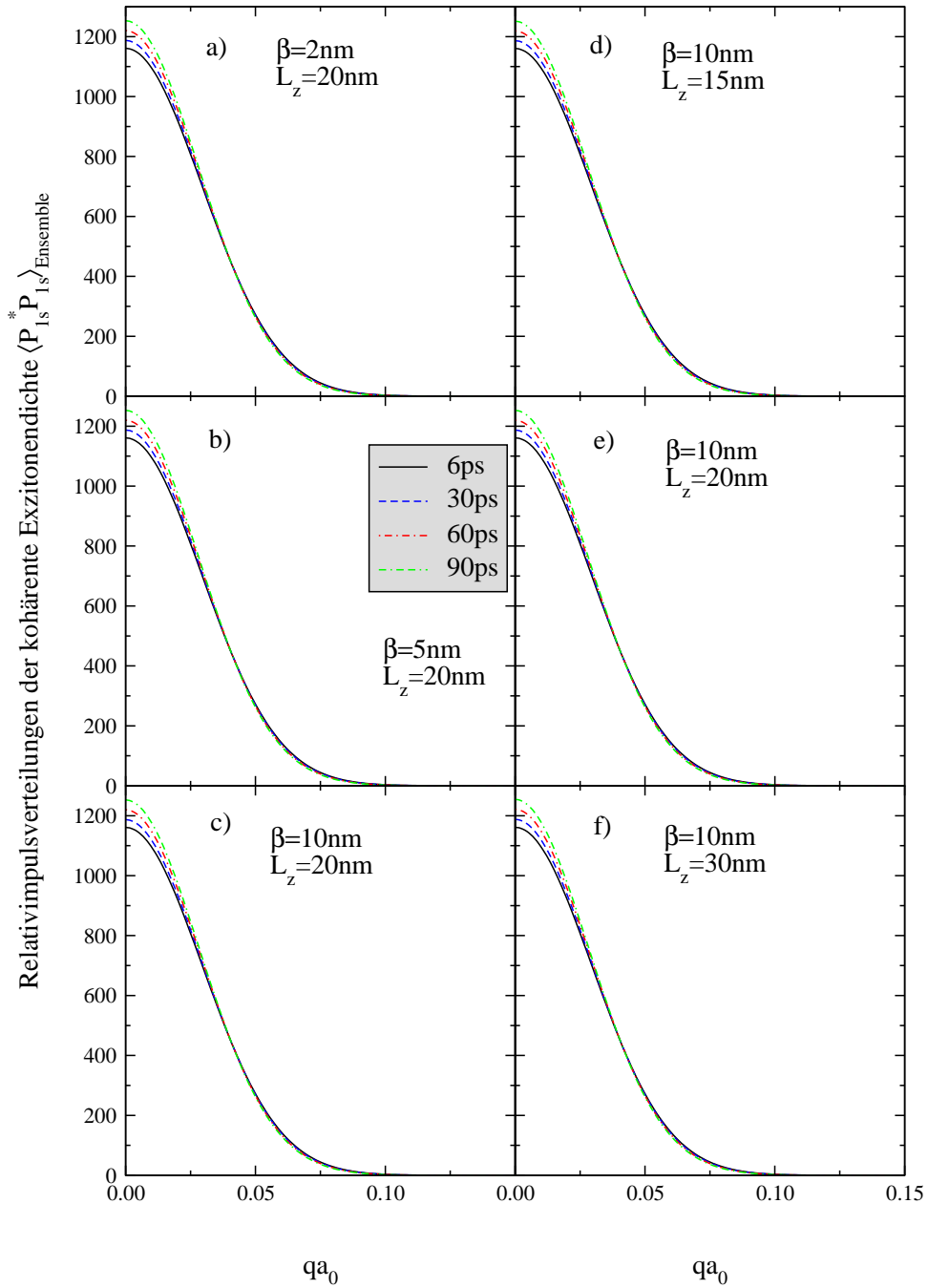


Abbildung 3.29: Dynamik der Relativimpulse des kohärenten Anteils der Exzitonendichten für verschiedene Unordnungsparameter. In den Abbildungen a-c) variiert die Korrelationslänge β bei festgehaltener Korrelationsstärke $\alpha = 0.3\text{nm}$ und Quantenfilmbreite $L_z = 20\text{nm}$. In den Abbildungen d-f) ist der zeitliche Verlauf bei konstantem $\beta = 10\text{nm}$ und $\alpha = 0.3\text{nm}$, wobei die Quantenfilmbreite geändert wird, zu sehen.

rekt als Quelle der Relativimpulsverteilung der kohärenten Exzitonendichte ein- geht. Die Polarisation verbreitert sich jedoch im Ortsraum aufgrund der Frei- Teilchenanteile in deren Bewegungsgleichung, vgl. Glg. (2.115) und Abb. 3.28, so daß die zugehörige Schwerpunktsverteilung schmaler wird. In der Folge ist dieses Verhalten ebenfalls in der kohärenten Exzitonendichte beobachtbar. Eine weitere Konsequenz ist die Größe der Relativimpulse, welche hier um eine Größenord- nung kleiner sind als im Fall der phononenassistierten Generation inkohärenter Exzitonendichte, vgl. Abb. 3.15.

Für das Verständnis der Dynamik im Ortsraum werden wie im Fall der in- kohärenten Exzitonendichte nun zunächst die Winkelverteilungen der kohärenten Exzitonendichte $\langle P_{1s}^* P_{1s} \rangle_E$, Abb. 3.31, untersucht. Im Gegensatz zu den Relati- vimpulsen sind hier zum einen eine deutliche Dynamik wie auch Abhängigkeiten von den Unordnungsparametern feststellbar. Zu sehen sind die Zeitentwicklungen für zunehmende Korrelationslänge β (a-c) und wachsende Quantenfilmbreite L_z (d-f). Es sind mehrere Auffälligkeiten feststellbar:

- Die unordnungsassistierte Generation sorgt für eine starkes Maximum beim Winkel $\alpha = \pi/2$ (zu sehen in allen Verteilungen.). Das bedeutet, daß auf kurzen Zeitskalen die Exzitonpropagation senkrecht zum Radialvektor erfolgt, vgl. Abb. 3.30. Anschaulich bedeutet das, daß sich die kohärenten Exziton kreisförmig um das Zentrum des Anregungsgebietes bewegen. Ei-

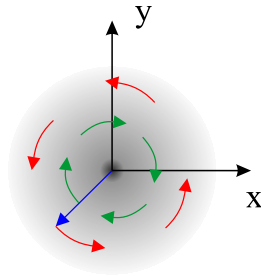


Abbildung 3.30: Darstellung der kreisförmigen Bewegung der Exzitonen.

ne räumliche Verbreiterung des Wellenpaketes kann dadurch *nicht* erfolgen. Da jedoch die Verteilung auch bei anderen Winkeln Besetzung vorweisen kann, wird die Stärke dieses Effektes dadurch bestimmt, wie dominant das Maximum im Vergleich zur restlichen Verteilung ist.

- Zu späteren Zeiten spaltet sich das Maximum auf und die beiden neuen Spitzen in der Verteilung wandern zu den Winkeln $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi$, deutlich zu sehen in Abb. 3.31.a) bei 60ps bis 90ps. Die ringförmige Bewegung wird damit zugunsten einer parallelen und antiparallelen Richtung zum Ra- dialvektor aufgegeben. Auch diese Unorientierung allein führt noch nicht zu

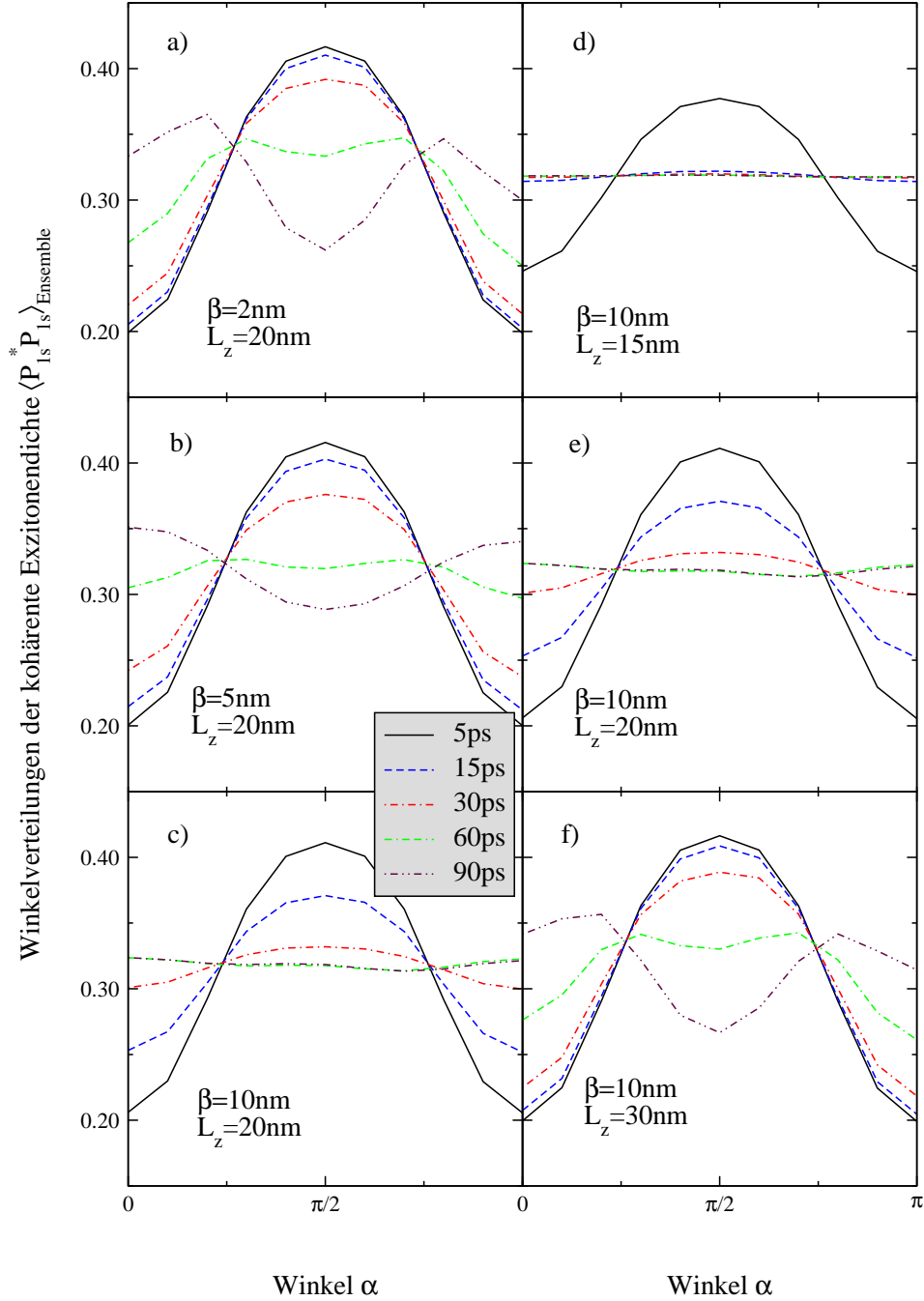


Abbildung 3.31: Winkelverteilungen des kohärenten Anteils der Exzitonendichten für verschiedene Unordnungsparameter. In den Abbildungen a-c) sind die Dynamiken für variierende Korrelationslänge β bei festgehaltener Korrelationsstärke $\alpha = 0.3\text{nm}$ und Quantenfilmbreite $L_z = 20\text{nm}$ aufgetragen. Die Abbildungen d-f) zeigen den zeitlichen Verlauf bei konstantem $\beta = 10\text{nm}$ und $\alpha = 0.3\text{nm}$, wobei die Quantenfilmbreite geändert wird.

einer schnelleren Propagation aus dem Anregungsgebiet hinaus, da sich bei vorhandener Symmetrie beide Komponenten gegenseitig aufheben.

- Die Symmetrie der Verteilung wird jedoch gestört, was in Abb. 3.31.f) bei 90ps am deutlichsten gesehen werden kann. Diese Asymmetrie resultiert natürlich sofort in einer Veränderung der räumlichen Breite der Anregung und da die Verteilung bei kleineren Winkeln stärkere Beiträge hat, bedeutet dies letztendlich eine schnellere räumliche Propagation. Die Ursache der Symmetriebrechung dürfte in den Frei-Teilchenanteilen zu suchen sein, welche zu einer stärkeren Gewichtung kleiner Winkeln führen.
- Die Winkelverteilung strebt einer Gleichgewichtsverteilung entgegen, welche durch nahezu gleichmäßige Anteile aller Winkel gekennzeichnet ist, vgl. Abb. 3.31.d). Die freie Propagation wird dabei allerdings nach wie vor dafür sorgen, daß die Verteilung bei kleinen Winkeln stärker besetzt ist. Dabei erfolgt dieser Übergang umso schneller, je stärker die Unordnung ist.
- Die Kurven zu unterschiedlichen Zeiten scheinen offenbar durch gemeinsame *Knotenpunkte* laufen. Diese resultieren vermutlich aus der Symmetrie in der energieerhaltenden Deltadistribution und der daher auch vorhandenen Symmetrie in den Exziton-Unordnungsstreuprozessen.

Anhand der Winkel- und Relativimpulsverteilung soll nun die Dynamik der kohärenten Exzitonendichte im Ortsraum erklärt werden. Die zugehörigen Verteilungen sind für verschiedene Unordnungsanordnungen in Abb. 3.32 dargestellt. Zu erkennen sind gaußförmige Kurven mit einer halben Breite von ungefähr 0.5. Die Änderungen in der räumlichen Breite sind dabei über 90ps gesehen ziemlich groß, wobei auffällt, daß stärkere Unordnung eine schnellere räumliche Propagation bewirkt. Im Gegensatz zur Dynamik inkohärenter Exzitonendichte sprechen hier jedoch zwei Gründe gegen eine Eigendynamik:

1. Die zugehörige Winkelverteilung, Abb. 3.31, ist nahezu symmetrisch um $\alpha = \pi/2$. Damit kann effektiv so gut wie keine Wellenpaketdynamik stattfinden.
2. Die Relativimpulse sind eine Größenordnung kleiner als die der inkohärenten Exzitonendichte. Da beide Anteile die gleichen Frei-Teilchenenergien in ihren Bewegungsgleichungen aufweisen, ist die Dynamik der kohärenten Exzitonendichte ebenfalls eine Größenordnung langsamer, also im 100ps bis 1ns Bereich.

Der Grund der beobachteten räumlichen Ausdehnung muß daher im unordnungsassistierten Generationsprozeß liegen. Da die Polarisation selber einer räumlichen Verbreiterung unterliegt, überträgt sich diese auch auf die kohärente Exzitonendichte. Da mit stärkerer Unordnung die Generation verstärkt wird, ist daher auch eine stärkere Verbreiterung zu beobachten.

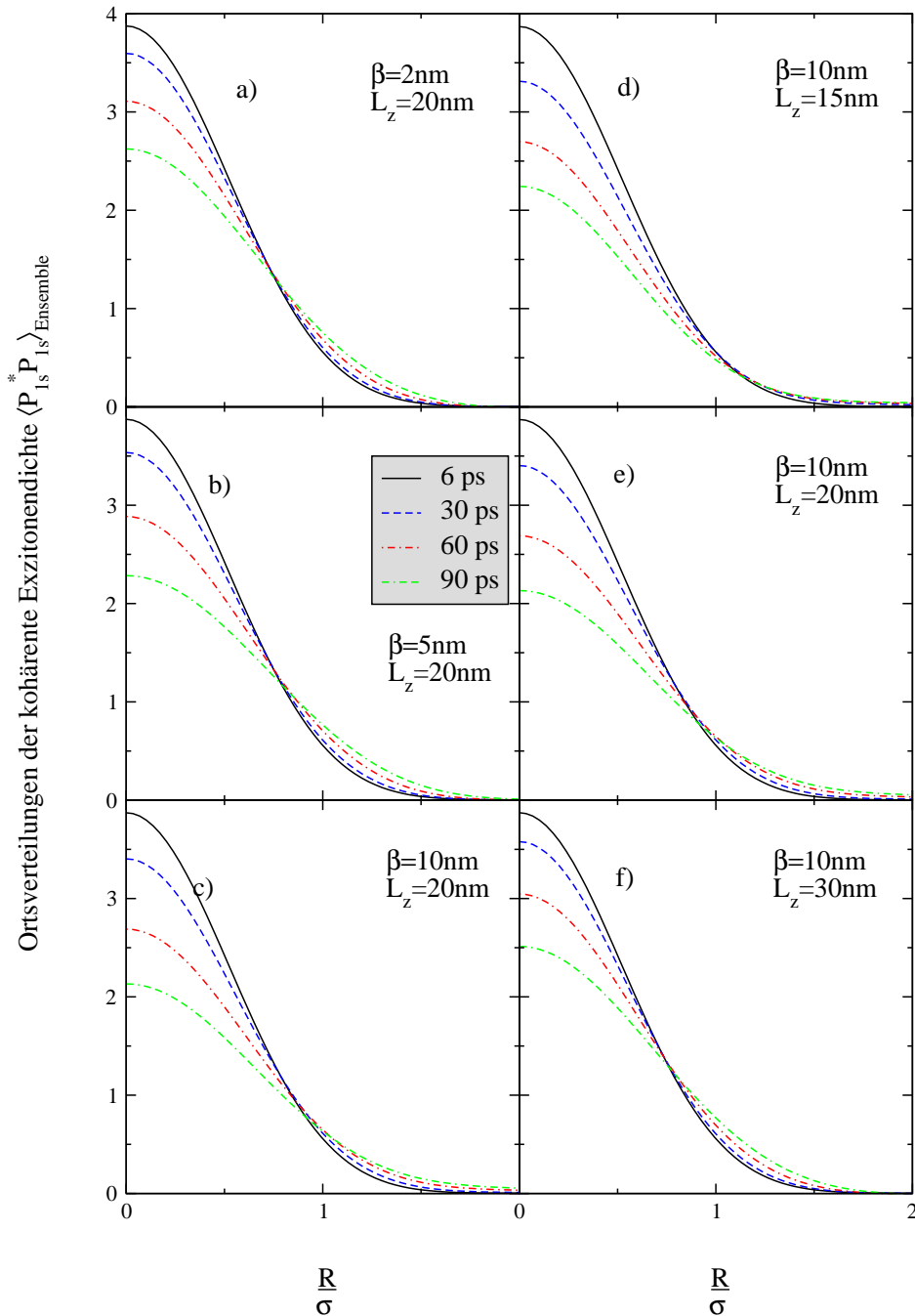


Abbildung 3.32: Ortsverteilung des kohärenten Anteils der Exzitonendichte für verschiedene Unordnungsparameter. In den Abbildungen a-c) sind die Dynamiken für variierende Korrelationslänge β bei festgehaltener Korrelationsstärke $\alpha = 0.3\text{nm}$ und Quantenfilmbreite $L_z = 20\text{nm}$ aufgetragen. Die Abbildungen d-f) zeigen den zeitlichen Verlauf bei konstantem $\beta = 10\text{nm}$ und $\alpha = 0.3\text{nm}$, wobei die Quantenfilmbreite geändert wird.

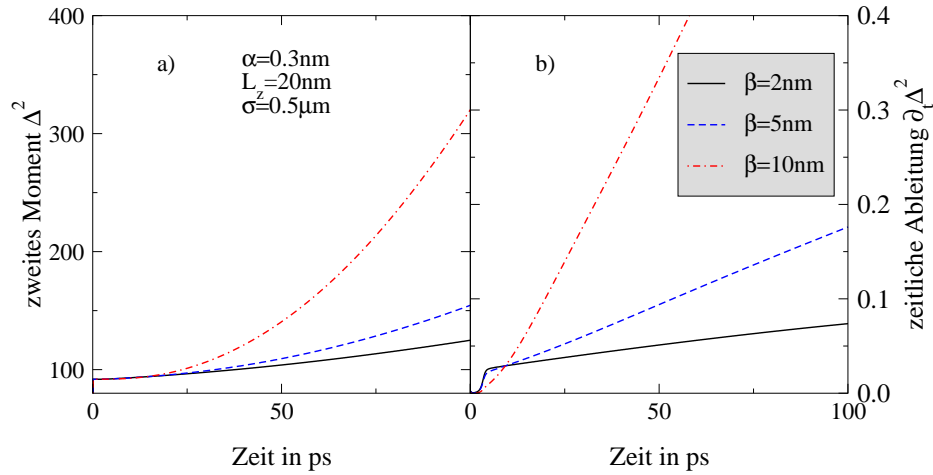


Abbildung 3.33: Zweites Moment a) und dessen Zeitableitung b) der kohärenten Exzitonendichte. Verglichen werden die Situationen bei unterschiedlichen Korrelationslängen bei einer Quantenfilmbreite von $L_z = 20\text{nm}$ und einer Korrelationsstärke von $\alpha = 0.3\text{nm}$.

Eine Bestätigung dieser Theorie ist in der Betrachtung des zweiten Momentes der Verteilung, Abb. 3.33 und Abb. 3.34, zu sehen. Zum einen ist deutlich zu erkennen, daß das zweite Moment (a) der kohärenten Exzitonendichte die gleiche charakteristische Dynamik aufweist, wie die Polarisation, d.h. sie wird schneller mit zunehmender Korrelationslänge und abnehmender Quantenfilmbreite. Darüber hinaus ist anhand der Zeitableitung (b) zu erkennen, daß das zweite Moment offensichtlich eine quadratische Zeitabhängigkeit besitzt. Vermutlich sind die Auswirkungen der Unordnung auf die Ortsraumdynamik der Polarisation zu schwach, um hier noch wahrnehmbar zu sein, so daß primär die freie Propagation sichtbar wird.

Werden nun die Ortsverteilungen aller kohärenten Beiträge zusammen betrachtet, so ist dabei Folgendes zu beachten:

1. Die Verteilung der Polarisation ist annähernd doppelt so breit wie die der kohärenten Exzitonendichte, vgl. Abb. 3.28 und Abb. 3.32.
2. Die Ortsraumdynamik von Polarisation und kohärenter Exzitonendichte erfolgt in weiten Parameterbereichen entgegengesetzt, d.h. während sich mit zunehmender Quantenfilmbreite die Polarisation stetig schneller verbreitert, kann die Dynamik der kohärenten Exzitonendichte langsamer werden.
3. Beide Verteilungen sind normiert. Damit lassen sich so erst einmal keinerlei Aussagen über die Beiträge beider Anteile zur gemeinsamen Dynamik aller kohärenten Komponenten treffen. Anhand von Abb. 3.26 und 3.27

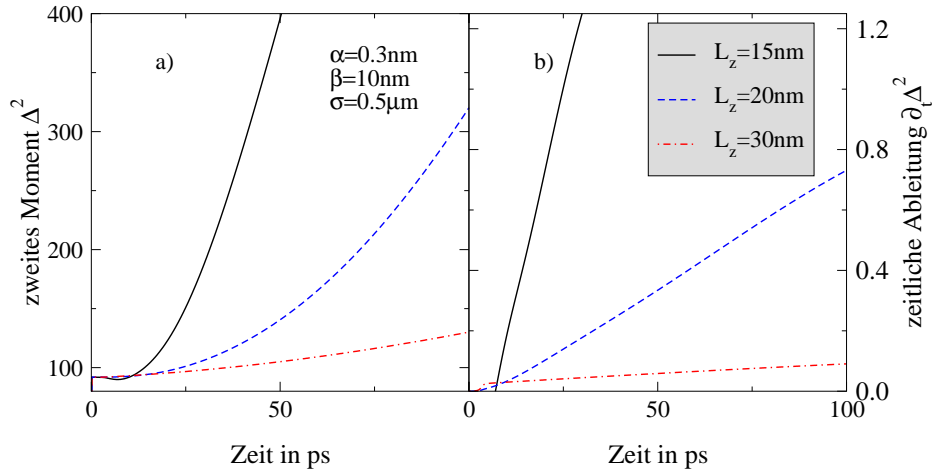


Abbildung 3.34: Zweites Moment a) und dessen Zeitableitung b) der kohärenten Exzitonendichte. Zu sehen sind die Zeitentwicklungen für unterschiedlich breite Quantenfilme bei einer Korrelationslänge $\beta = 10\text{nm}$ und -stärke $\alpha = 0.3\text{nm}$.

ist ersichtlich, daß bei großen Zeiten die Exzitonendichte dominieren muß, während auf kurzen Zeitskalen die Polarisation die Hauptanteile liefert.

Damit ist klar, daß die Dynamik aller kohärenten Beiträge sich nicht einfach durch die beiden separaten Betrachtungen beschreiben läßt. Dieses ist in Abb. 3.35 zu sehen. Die wesentlichen Punkte sind dabei:

- Die Dynamik wird im Fall starker Unordnung durch die kohärente Exzitonendichte bestimmt, vgl. Abb. 3.35.d) und 3.32.d).
- Je schwächer die Unordnung wird (größere Quantenfilmbreite in Abb. 3.35.e) und f) oder kleinere Korrelationslänge in Abb. 3.35.a) und b)), desto stärker wird der Beitrag der Polarisation. Zu sehen ist dies aufgrund
 - der zunehmenden räumlichen Verbreiterung bei gleichen Zeiten, gleichbedeutet mit einer Abnahme des Maximums durch die Normierung der Verteilung,
 - dem nichtmonotonen Verhalten in der Zeitentwicklung (Zuerst wird die Verteilung räumlich schmäler und anschließend wieder breiter, z.b. in Abb. 3.35.e) oder 3.35.b)) - ein deutlicher Hinweis auf entgegengerichtete zeitabhängige Prozesse.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Situation mit Einführung von struktureller Unordnung wesentlich komplizierter geworden ist. Desweiteren dürfte es experimentell schwierig werden, die kohärenten Anteile getrennt zu detektieren. Die Kombination von Polarisation und kohärenter Exzitonendichte führt je nach

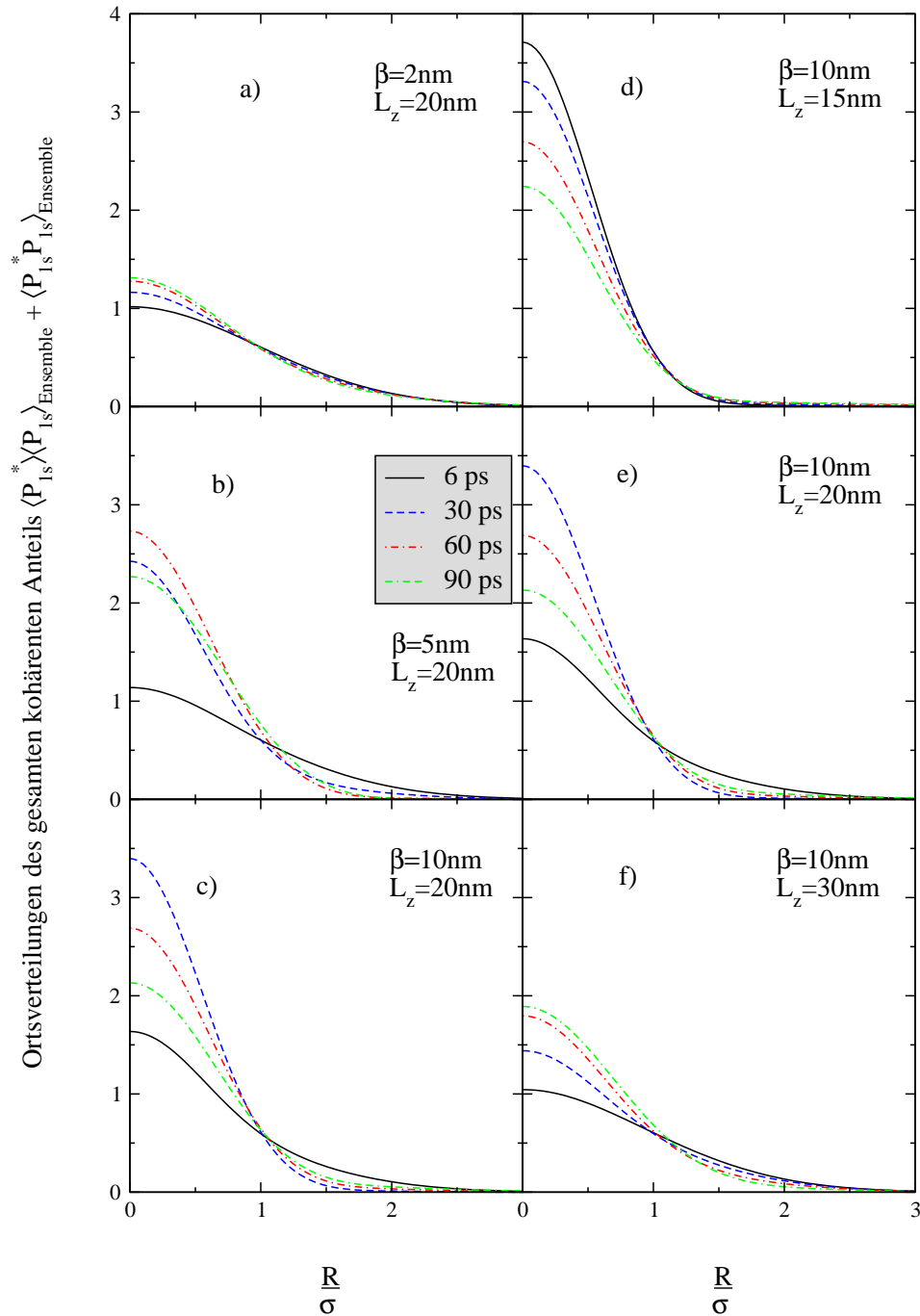


Abbildung 3.35: Dynamik der Ortsverteilungen aller kohärenten Anteile. Gegenübergestellt werden die Verläufe bei sich ändernder Korrelationslänge β bei fester Korrelationsstärke $\alpha = 0.3\text{nm}$ und Quantenfilmbreite $L_z = 20\text{nm}$, a-c), sowie die Entwicklung unterschiedlich breiter Quantenfilme bei sonst gleichen Bedingungen ($\alpha = 0.3\text{nm}$, $\beta = 10\text{nm}$), d-f).

Parameterwahl zu einem nichtmonotonen Verhalten in der räumlichen Propagation. Selbst wenn es gelänge, beide Anteile getrennt zu betrachten, kann so doch das zweite Moment der Verteilung nicht als Kriterium genommen werden, ob nun ballistischer Transport vorliegt oder nicht, da sich das Zeitverhalten in Anwesenheit von Unordnung qualitativ nicht von dem der völlig ungestörten Propagation unterscheidet. In beiden Fällen ist eine quadratische Abhängigkeit von der Zeit zu finden. Problematisch ist allerdings ebenfalls, daß durch die Normierung der Eindruck entsteht, als läge die gesamten 100ps über eine Verteilung mit konstanter Gesamtdichte vor. Dem ist aber nicht so, so daß effektiv die Messungen wohl auf eine kleinere Zeitskala beschränkt bleiben werden. Letztendlich ist es ebenfalls unmöglich, ohne Phononen zu messen. In wieweit diese allerdings das Ergebnis beeinflussen, wird im nächsten Abschnitt untersucht.

3.4.2.3 Ungeordnete Systeme im Wechselspiel mit einem Wärmebad

Nachdem die Auswirkungen der strukturellen Unordnung und der Phononen als einzelne Wechselwirkungsprozesse bekannt sind, soll nun der kombinierte Einfluß auf die Exzitonendynamik untersucht werden. Anhand der schematischen Darstellung, Abb. 2.2, wird ersichtlich, daß damit einige neue Mechanismen ins Spiel kommen:

1. Die kohärente Polarisation weist nun einen neuen Zerfallskanal auf, da die Streuung an Phononen zur Umwandlung von kohärenter zu inkohärenter Exzitonendichte führt.
2. Die inkohärente Exzitonendichte unterliegt nun nicht nur der Phononenstreuung, sondern auch der Unordnungsstreuung.

Damit gibt es zwei Möglichkeiten, inkohärente Exzitonendichte mit Hilfe von Phononen zu generieren – zum einen aus der Polarisation und andererseits aus kohärenten Exzitonen. Da jedoch kohärente Exzitonendichte \mathcal{K} nur über die Wechselwirkung mit der Unordnung entsteht, kann über Variation der Unordnungsparameter direkt das Verhältnis geändert werden, mit dem die inkohärente Exzitonendichte aus der Polarisation und aus der kohärenten Exzitonendichte erzeugt wird. Im Folgenden wird daher die Temperatur bei $T = 30K$ konstant gehalten und die Stärke der Unordnung über die Variation der Quantenfilmbreite modifiziert.

Die Arbeiten in Zusammenhang mit Sekundäremission [30, 2, 3], welche den selben Mechanismus in räumlich homogener Situation betrachteten, haben gezeigt, daß die Anteile der Phononen- und Unordnungsstreuung nichtadditiv sind. Dieses Verhalten ist hier natürlich ebenfalls zu sehen, so daß ein interessantes Wechselspiel zu erwarten ist.

In Abbildung 3.36 ist die Zeitentwicklung für die Gesamtpolarisation \mathcal{P} und die Gesamtexzitonendichte des kohärenten \mathcal{K} und inkohärenten Anteils \mathcal{N} zu

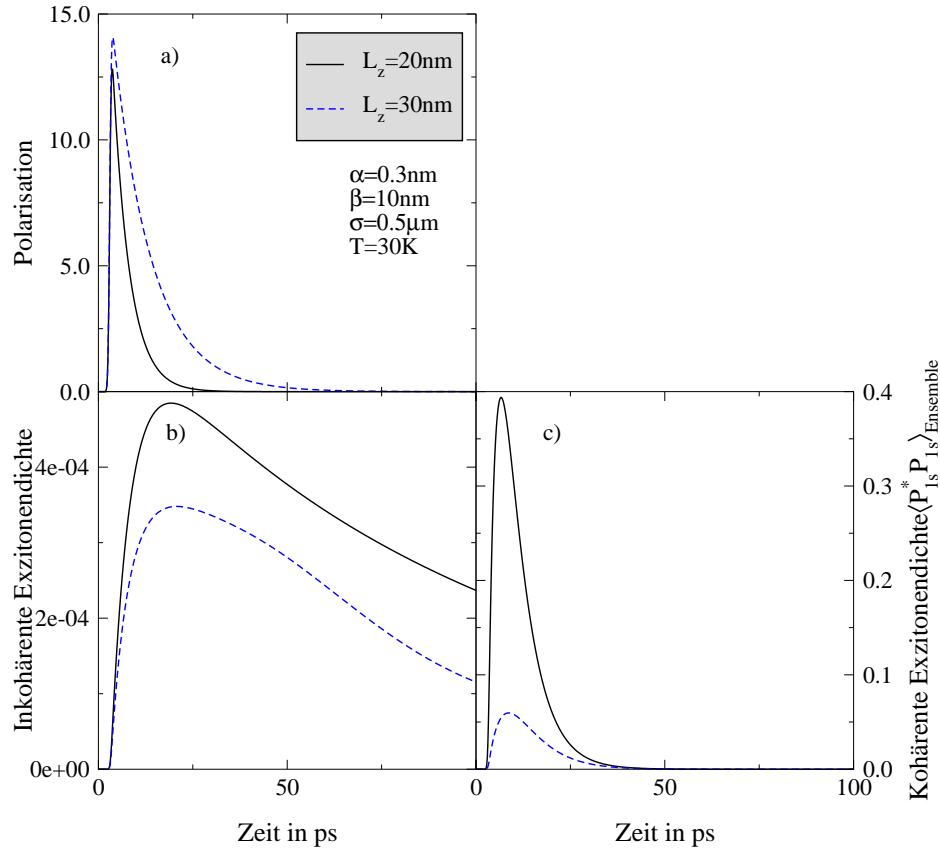


Abbildung 3.36: Zeitentwicklung der Polarisierung (a), der kohärenten (c) und inkohärenten Exzitonendichte (b) bei einer Temperatur von $T=30\text{K}$, einer Fokussierung von $\sigma = 0.5\mu\text{m}$, Korrelationsstärke $\alpha = 0.3\text{nm}$ und einer Korrelationslänge von $\beta = 10\text{nm}$. Verglichen werden jeweils zwei verschiedene Quantenfilmbreiten.

sehen. Die Polarisierung, Abb. 3.36.a), fällt aufgrund der nun zwei vorhandenen Zerfallskanäle etwas schneller ab als in den Fällen alleiniger Wechselwirkung mit Phononen oder Unordnung. Der Effekt ist jedoch nur sehr schwach aufgrund der niedrigen Temperatur. Mit größerer Quantenfilmdicke kann dabei ein schnellerer Zerfall beobachtet werden. Dieser schnelleren Zerfall ist die Folge einer verstärkten unordnungsassistierten Generation von kohärenter Exzitonendichte aus der Polarisierung, ebenfalls zu sehen im Zeitverlauf der kohärenten Exzitonendichte, Abb. 3.36.c). Je schmaler die Heterostruktur wird, umso stärker ist das Maximum und umso kürzer ist die Anstiegszeit.

Die inkohärente Exzitonendichte, Abb. 3.36.b), wird mit Hilfe von Phononen erzeugt, wobei sowohl Anteile aus der Polarisierung, wie auch aus der kohärenten Exzitonendichte stammen. Bei schmalen Strukturen ist der Einfluß der Unordnung jedoch stärker, so daß mehr kohärente Exzitonendichte erzeugt wird als bei

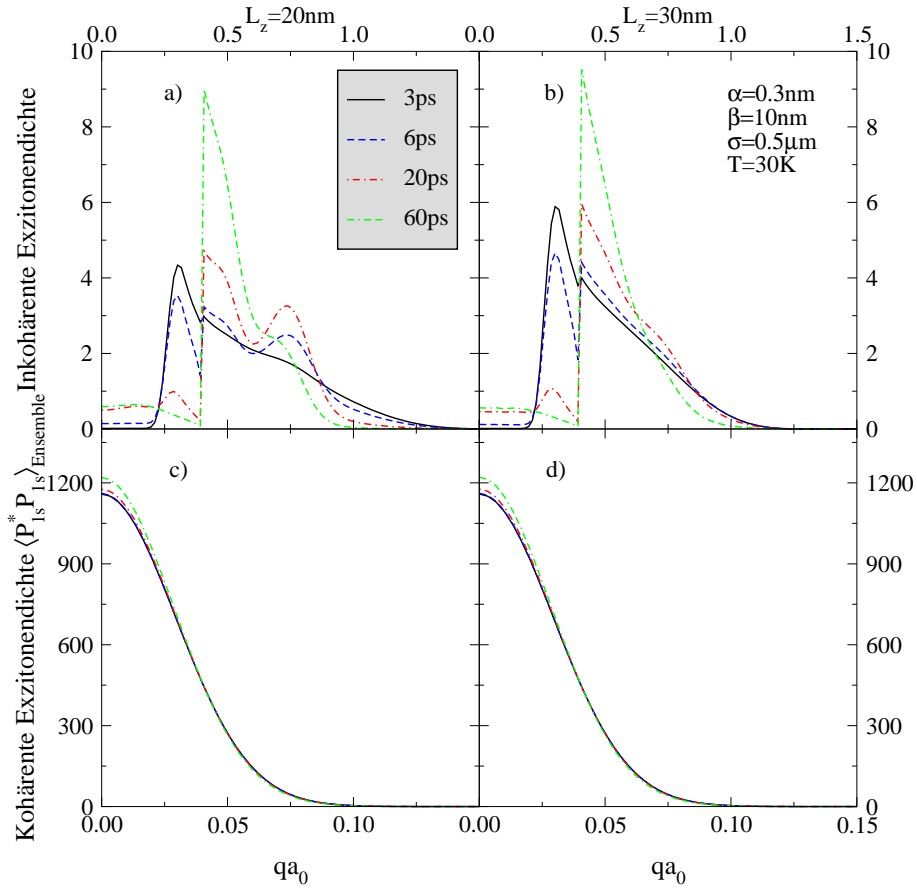


Abbildung 3.37: Relativimpulsverteilung für die kohärente (c, d) und inkohärente Exzitonendichte (a, b) zu unterschiedlichen Zeiten und Heterostrukturen von 20nm und 30nm Breite.

breiten Strukturen. Die verstärkte Unordnungsstreuung führt andererseits zu einer schnelleren Abnahme der Polarisierung, welches in Folge die phononenassistierte Generation von inkohärenter Exzitonendichte aus der Polarisierung herabsetzt. Abhängig von der Parameterwahl kann durch die beiden gegensätzlichen Prozesse die phononenassistierte Generation der inkohärenten Exzitonendichte zu-, aber auch abnehmen. In der hier betrachteten Situation bewirkt das Verschmälern des Quantenfilms eine verstärkte Generation der inkohärenten Anteile.

Als nächstes soll wieder die Ortsdynamik untersucht werden. Dazu wird zunächst die Zeitentwicklung der Relativimpulse, zu sehen in Abb. 3.37, betrachtet. Es ist zu erkennen, daß die kohärenten (c, d) und inkohärenten Anteile (a, b) der Exzitonendichte eine sehr unterschiedliche Dynamik aufweisen. Beide Verteilungen zeigen dabei ein zum Teil bekanntes Verhalten, jedoch auch neue Aspekte.

Die inkohärente Exzitonendichte besitzt wiederum die Kanten bei $q_{||} = q_{\text{phon}}$ und $q_{||} = q_{\text{phot}}$, welche aus dem phononassistierten Generationsprozeß aus der

Polarisation heraus herrühren. Ebenfalls ist der Effekt der „unscharfen Kanten“ bekannt – er wird durch die Fokussierung $\sigma = 0.5\mu m$ verursacht. Neu ist jedoch die Überhöhung bei $q_{||}a_0 = 0.75$, welche folgende Eigenschaften aufweist:

- Sie ist wesentlich stärker im Fall schmaler Quantenfilme ausgeprägt.
- Sie scheint ein zeitliches Maximum zu besitzen, d.h. sie nimmt im Verhältnis zum Rest der Verteilung bis $t = 20ps$ zu, um danach wieder abzufallen.

Da die Streuung an einem Unordnungspotential zwar eine Umverteilung der Relativimpulse⁷ verursacht, jedoch diese Streuung nur in der Winkelverteilung zu beobachten ist, muß die Ursache in der phononenassistierten Generation inkohärenter aus der kohärenten Exzitonendichte liegen. Dazu werden die korrespondierenden Einstreuterme aus der Polarisation \mathcal{P} und aus der kohärenten Exzitonendichte \mathcal{K} betrachtet.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{N}(q, t) &\sim \int_0^{2\pi} d\phi_q \int d^3k \left[\mathcal{K}(\vec{Q} = 0, \vec{k}) + |\mathcal{P}(\vec{k})|^2 \right] \\ &\times \sum_{\sigma=\pm 1} \left(n_{|\vec{k}-\vec{q}|} + \frac{\sigma + 1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2M} [k^2 - q^2] - \sigma \hbar \omega_{|\vec{k}-\vec{q}|} \right) \end{aligned} \quad (3.120)$$

Einerseits sind die beiden Deltadistributionen für beide Anteile gleich. Andererseits ist die Relativimpulsverteilung der kohärenten Exzitonendichte direkt mit der Polarisation über Gleichung (3.119) korreliert, welche den Quellterm aufgrund der Unordnungsstreuung beschreibt. Damit unterscheiden sich die Relativverteilung der kohärenten Exzitonendichte und die Schwerpunktsverteilung der Polarisation nicht voneinander. Da die Polarisation nur vom Betrag

$$\mathcal{P}(\vec{k}) = \mathcal{P}(|\vec{k}|),$$

die kohärente Exzitonendichte jedoch ebenfalls noch vom zugehörigen Winkel des Impulses abhängt, muß das, da es der einzige Unterschied ist, die Ursache dieser Überhöhung sein. Damit werden bei der Integration über alle Winkel im Fall der kohärenten Exzitonendichte die gestreuten Impulse noch winkelabhängig gewichtet, während dies bei der Polarisation nicht vorkommt.

Die Relativimpulse der kohärenten Exzitonendichte werden durch die zusätzlich stattfindende Phononenstreuung offensichtlich kaum beeinflusst, vgl. Abb. 3.37.c,d). Wie bisher ist eine leichte Verschmälerung der Verteilung in der Zeit aufgrund Relation (3.119) erkennbar. Da bei den gewählten Parametern die Unordnung dominant ist, vgl. auch das Verhältnis von kohärenter zu inkohärenter Exzitonendichte in Abb. 3.36, ist der Einfluß auf die Relativimpulsverteilung der kohärenten Exzitonendichte praktisch nicht sichtbar.

⁷Gilt nur in Markovnäherung!

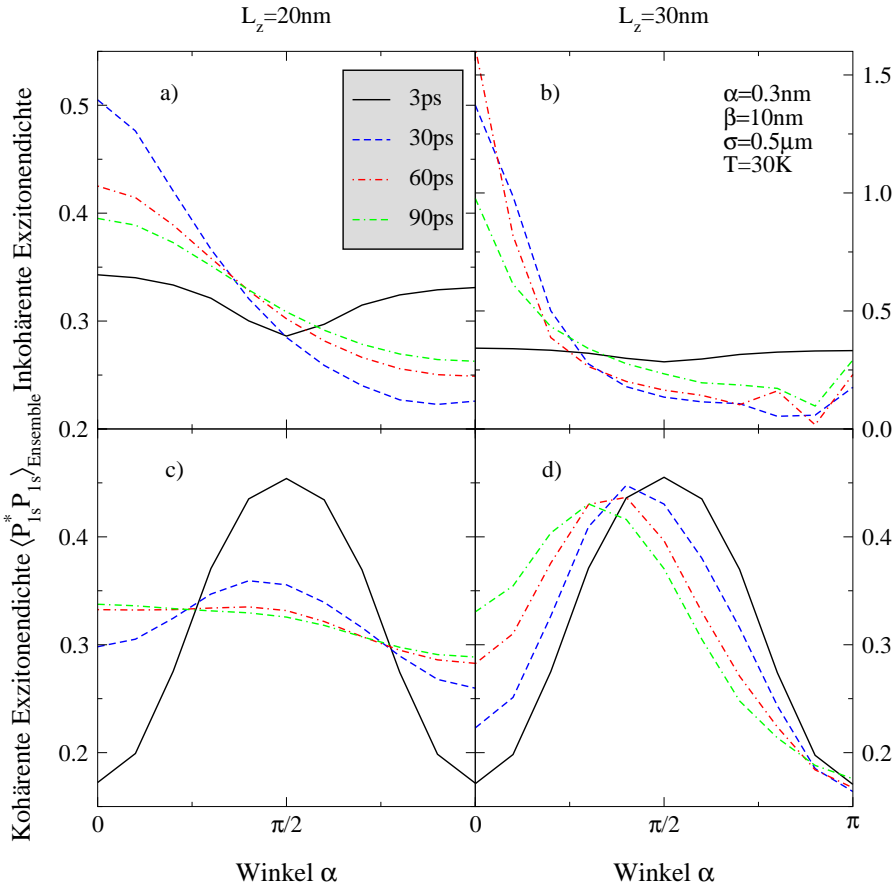


Abbildung 3.38: Zeitliche Dynamik der Winkelverteilungen der kohärenten (c, d) und inkohärenten Exzitonendichte (a, b) zu unterschiedlichen Zeiten und bei verschiedenen breiten Quantenfilmstrukturen.

Die für die räumliche Dynamik maßgebliche Verteilung der Winkel ist für die inkohärente, wie auch für die kohärente Exzitonendichte in Abb. 3.38.a,b) bzw. 3.38.c,d) zu sehen. Dabei kann man erkennen, daß sich die Verteilungen von denen ausschließlicher Exziton-Phonon bzw. Exziton-Unordnungs Wechselwirkung unterscheiden. Die inkohärente Exzitonendichte weist dabei folgendes Verhalten auf:

- Zu kleinen Zeiten werden bevorzugt Winkel um $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi$ angenommen, wobei die Verteilung um $\pi/2$ symmetrisch ist. (Man beachte die Skalierung der Achsen bei der Beurteilung der Stärke des Effektes!)
- Zu größeren Zeiten wird die Verteilung asymmetrisch, indem sich bei $\alpha = 0$ ein Maximum herausbildet, welches die Propagation aus dem Anregungsgebiet hinaus beschreibt. Das Maximum ist im Fall der schmalen Quantenfilmstrukturen, Abb. 3.38.a), weniger stark ausgeprägt.

- Bei großen Zeiten erfolgt die bereits aus der Exziton-Phononstreuung bekannte „Rückentwicklung“ der Verteilung zu einer mehr abgeflachten Form. Die Zacken bei großen Zeiten werden numerischen Artefakten zugeordnet.

Die Beobachtungen lassen sich mit dem Einfluß der Unordnung erklären. Zum einen wirkt die Unordnungsstreuung selber der freien Propagation entgegen und bewirkt eine Gleichverteilung der Winkel. Starke Unordnung (schmale Quantenfilme), Abb. 3.38.a), verursacht somit eine flachere Winkelverteilung als schwache (breite Quantenfilme), Abb. 3.38.b). Die Rückentwicklung hängt wiederum mit der Umverteilung der Relativimpulse der inkohärenten Exzitonendichte nach dem Zerfall der Quellen, also in diesem Fall der Polarisierung und der kohärenten Exzitonendichte zusammen.

Die Winkeldynamik der kohärenten Exzitonen zeigt dagegen folgendes Verhalten:

- Im Fall starker Unordnung (20nm), Abb. 3.38.c), ist die Verteilung fast identisch zu dem Fall $T=0$, d.h. zu Beginn ist die Verteilung um das Maximum bei $\alpha = \pi/2$ zentriert und flacht später ab. Allerdings werden kleine Winkeln stärker bevorzugt.
- Bei schwacher Unordnung (30nm), Abb. 3.38.d), sind eindeutig Abweichungen zum bisherigen Verhalten feststellbar. Die Winkelverteilung ist zwar zu Beginn wiederum stark um den Winkel $\alpha = \pi/2$ zentriert, allerdings flacht sie danach nur unwesentlich ab. Stattdessen ist eine deutliche Verschiebung zu kleinen Winkeln zu beobachten, einhergehend mit einer langsamen Abnahme des Maximums.

Die Ursache der Verschiebung muß in dem phononenassistierten Zerfallsprozeß als einzig neue Möglichkeit liegen. Dabei stört die Phononenstreuung die in den reinen Unordnungsanteilen vorhandene Symmetrie, welche bisher zu den *Knotenpunkten* in den Verteilungen führten. Das phononenassistierte Dephasieren der kohärenten Exzitonendichte scheint dabei stark selektiv in Bezug auf die Winkel zu erfolgen, so daß die Verschiebung im Fall schwächerer Unordnung, $L_z = 30nm$, stärker hervortritt. Bei schmalen Quantenfilmstrukturen wird dieser Effekt offensichtlich durch die dann dominante Unordnung kompensiert, d.h. die Winkelstreuung durch die Exziton-Unordnungswechselwirkung ist so stark, daß die Verschiebung nicht mehr beobachtbar ist.

Durch die teilweise erheblichen Modifikationen in den Relativimpuls- und Winkelverteilungen ergeben sich natürlich einige Konsequenzen für die räumliche Propagation. Dabei werden jeweils die Dynamiken der Polarisierung, der kohärenten und inkohärenten Exzitonendichte bei 20nm und 30nm breiten Quantenfilmen gegenübergestellt, siehe Abb. 3.39. Die inkohärente Exzitonendichte wird durch eine gaußförmige Verteilung beschrieben, welche sich mit der Zeit verbreitert. Die Verbreiterung findet bei einem breiten Quantenfilm, Abb. 3.39.d) aller-

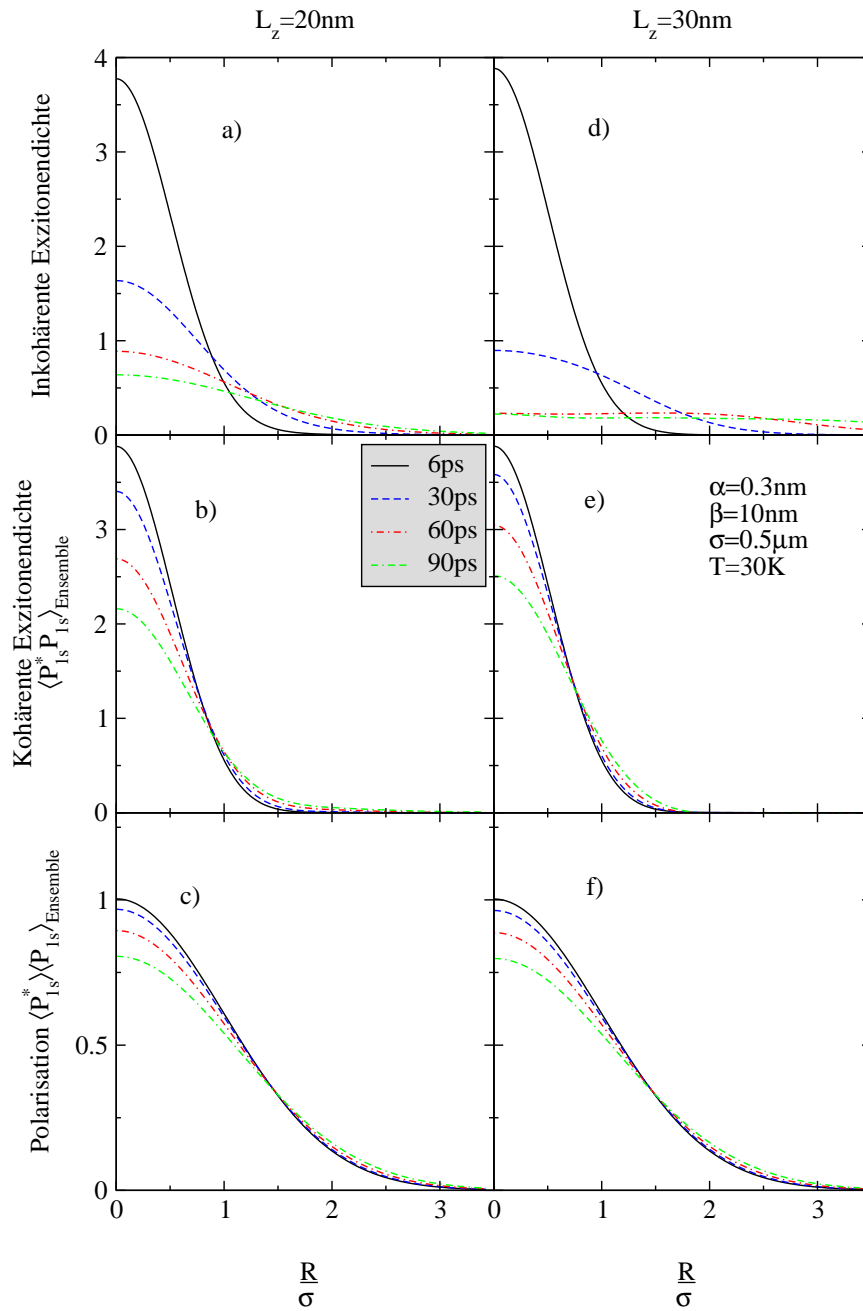


Abbildung 3.39: Ortsverteilungen in verschiedenen breiten Quantenfilmen. Gegenübergestellt werden die inkohärente (a, d) und kohärente Exzitonendichte (b, e) sowie die räumliche Dynamik der Polarisation (c, f) zu unterschiedlichen Zeiten.

dings wesentlich schneller statt als bei einem schmalen, Abb. 3.39.a). Verursacht wird dies durch zwei Aspekte:

1. Die Winkelverteilung, Abb. 3.38, ist in schmalen Strukturen wesentlich flacher. Damit ist eine ungerichteterer Ladungsträgerbewegung verbunden, welche zu einer langsameren Wellenpaketpropagation führt.
2. Die Relativimpulsverteilung, Abb. 3.37, zeigt in schmalen Quantenfilmen nicht die starke Überhöhung. Damit liegt ein kleinerer mittlerer Relativimpuls und damit eine geringere Geschwindigkeit der Ladungsträger vor. Auch dies führt zu einer langsameren Propagation.

Der Effekt der Winkelstreuung dominiert jedoch, wie bereits aus dem Fall elektronischer Wellenpakete mit Phononen bekannt ist [8, 6].

Die Dynamik der kohärenten Exzitonendichte, Abb. 3.39.b,e), kann wie im Fall ausschließlicher Unordnung erklärt werden, vgl. auch Abschnitt 3.4.2.2. Hauptursache ist wiederum die Dynamik der Polarisation, welche durch die kohärente Exzitonendichte wiedergespiegelt wird. Aufgrund der praktisch nicht vorhandenen Eigendynamik (sehr kleine Relativimpulse der kohärenten Exzitonendichte) ist der Einfluß der Winkelverteilung ebenfalls nicht sichtbar. Kompliziert würde die Situation jedoch im Fall noch stärkerer Fokussierung, wenn nämlich die Schwerpunktsimpulse die gleiche Größenordnung erreichen würden wie die Relativimpulse. Dann wäre die Eigendynamik der kohärenten Exzitonendichte durchaus sichtbar und auch deren Winkelverteilung wäre somit eine relevante Größe.

Zur Polarisation selber, Abb. 3.39.c,f) ist zu sagen, daß kein Unterschied in den beiden verschiedenen breiten Quantenfilmen sichtbar ist. In beiden Fällen ist eine sich verbreiternde Gaußkurve erkennbar. Dazu tragen im Wesentlichen drei Anteile bei:

- Die Frei-Teilchenanteile sind unabhängig von der Unordnungsconfiguration und können daher keine Unterschiede in der Dynamik produzieren.
- Die Streuung mit akustischen Phononen sorgt zwar für eine schnellere Dynamik, aber da hier die Temperatur konstant ist, spielt dies ebenfalls keine Rolle.
- Die Exziton-Unordnungsstreuung hat, wie in Abschnitt 3.4.2.2 gezeigt wurde, nur einen extrem schwachen Einfluß auf die Propagationsgeschwindigkeit.

Die beobachtete Dynamik ist also nicht weiter verwunderlich.

Bei einer Betrachtung des zweiten Momentes der kohärenten und inkohärenten Exzitonendichte, Abb. 3.40, wird schnell ersichtlich, daß eine Klassifizierung des Transportregimes anhand dieser Größe nicht länger sinnvoll ist. Dabei ist zu beachten, daß für Zeiten größer als 20-30ps die Ortsverteilungen bereits so breit

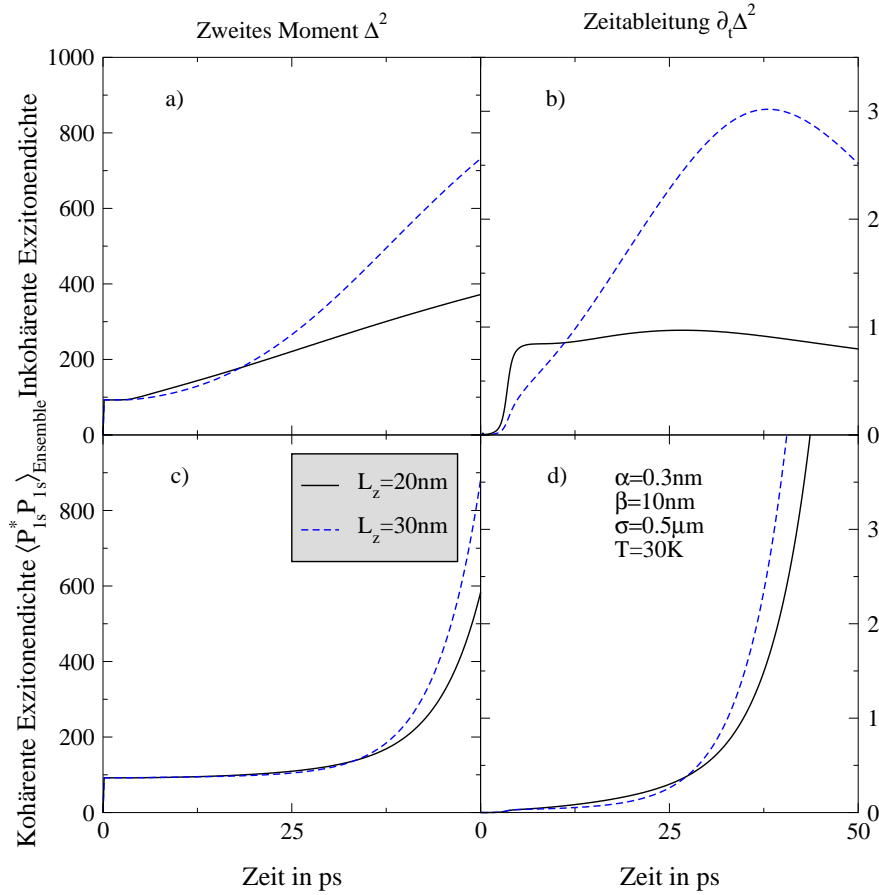


Abbildung 3.40: Die Zeitentwicklung des zweiten Momentes sowie deren zeitliche Ableitung für die inkohärente (a, b) und kohärente Exzitonendichte (c, d). Gegenübergestellt werden verschieden breite Quantenfilme.

geworden sind, daß die berechneten und im Diagramm gezeigten Werte zu klein sind und daher in der Diskussion nicht berücksichtigt werden. Doch abgesehen von dieser Einschränkung ist folgendes Verhalten erkennbar:

- Das zweite Moment der inkohärenten Exzitonendichte, Abb. 3.40.a), zeigt eine kontinuierliche Zunahme, wobei diese im Fall der breiteren Struktur wesentlich stärker ist. Dies ist noch in Übereinstimmung damit, daß im breiteren Quantenfilm die Unordnungstreuung schwächer ist und somit die räumliche Propagation schneller ablaufen kann. Betrachtet man jedoch die Zeitableitung des zweiten Momentes, Abb. 3.40.b), so ist ein linearer Anstieg erkennbar, was auf ein ballistisches Transportregime hinweisen würde. Ballistik liegt hier jedoch auf keinen Fall vor!
- Im Fall der kohärenten Exzitonendichte, Abb. 3.40.c,d), war bei $T = 0$

ein ballistisches Verhalten zu sehen, welches maßgeblich durch die Polarisationsdynamik bestimmt wurde. Eine endliche Temperatur modifiziert das zweite Moment derart, daß die Zeitabhängigkeit nun stärker als t^2 ist, vgl. Abb. 3.40.d). Dieses Verhalten wäre schneller als die Frei-Teilchen Dynamik und widerlegt jeden Versuch einer Klassifizierbarkeit. Erklärbar ist dieses Verhalten dennoch. Da das zweite Moment und dessen Zeitableitung wesentlich empfindlicher in Bezug auf die sehr kleinen Beiträge der Eigendynamik der kohärenten Exzitonendichte sind, verursachten diese möglicherweise das beobachtete Verhalten. Da die Winkelverteilung als bestimmende Größe eine schnellere Dynamik bei endlichen Temperaturen voraussagt, kann so das „schneller als ballistische“ Verhalten erklärt werden. Da in breiteren Strukturen die Winkelverteilung eine stärkere Verschiebung zu kleinen Winkeln zeigt, ist auch hier eine schnellere Propagation zu erwarten.

Betrachtet man die Wirkung von Unordnung und akustischen Phononen simultan, so taucht als nächstes Problem auf, daß man zur Beobachtung der bisher beschriebenen Effekte eigentlich die Polarisation, die kohärente und inkohärente Exzitonendichte separat detektieren müßte. Im Allgemeinen wird dies jedoch nicht möglich sein, sondern man kann entweder nur den kohärenten und den inkohärenten Anteil ermitteln oder vielleicht auch nur die volle Exzitonendichte. Da alle Verteilung stets auf Eins normiert sind, lassen sich daraus nur schlecht die Dynamiken der Kombinationen ableiten. Aus diesem Grund werden diese zum Schluß noch untersucht, um zu sehen, wann und ob man eventuell einen der Anteile vernachlässigen kann bzw. ob die räumliche Propagation der Kombinationen überhaupt noch Aussagen in Bezug auf die einzelnen Anteile zulassen.

An Abb. 3.41 werden dazu die inkohärente Exzitonendichte, alle kohärenten Beiträge sowie die volle Exzitonendichte miteinander verglichen. Die inkohärenten Anteile, Abb. 3.41.a,d), wurden soeben betrachtet, so daß an dieser Stelle keine weitere Diskussion erfolgen soll.

Die kohärenten Beiträge, also kohärente Exzitonendichte und Polarisation gemeinsam weisen nun jedoch ein Verhalten auf, welches schon aus dem Fall verschwindender Temperatur bekannt ist. Da ist zum einen zuerst die räumliche Verschmälerung und anschließend wieder eine Verbreiterung zu sehen, wobei das nichtmonotone Verhalten bei der schmalen Heterostruktur, Abb. 3.41.b) stärker hervortritt. Dabei erstreckt sich der Einfluß der akustischen Phononen primär auf die Polarisationsdynamik. Da jedoch die Dynamik der kohärenten Exzitonendichte maßgeblich durch die Polarisation bestimmt wird, betrifft die Wechselwirkung beide Größen im selben Maße. Die Unterschiede können daher allein mit Hilfe der Ergebnisse bei $T = 0$ verstanden werden.

Die volle Exzitonendichte, also die Summe aus der Polarisation, kohärenter und inkohärenter Exzitonendichte, wurde bisher jedoch noch nicht betrachtet. Zu sehen ist eine Überlagerung der kohärenten und der inkohärenten Anteile mit zeitlich unterschiedlichen Gewichtungen, Abb. 3.41.c,d). Im Vergleich der beiden

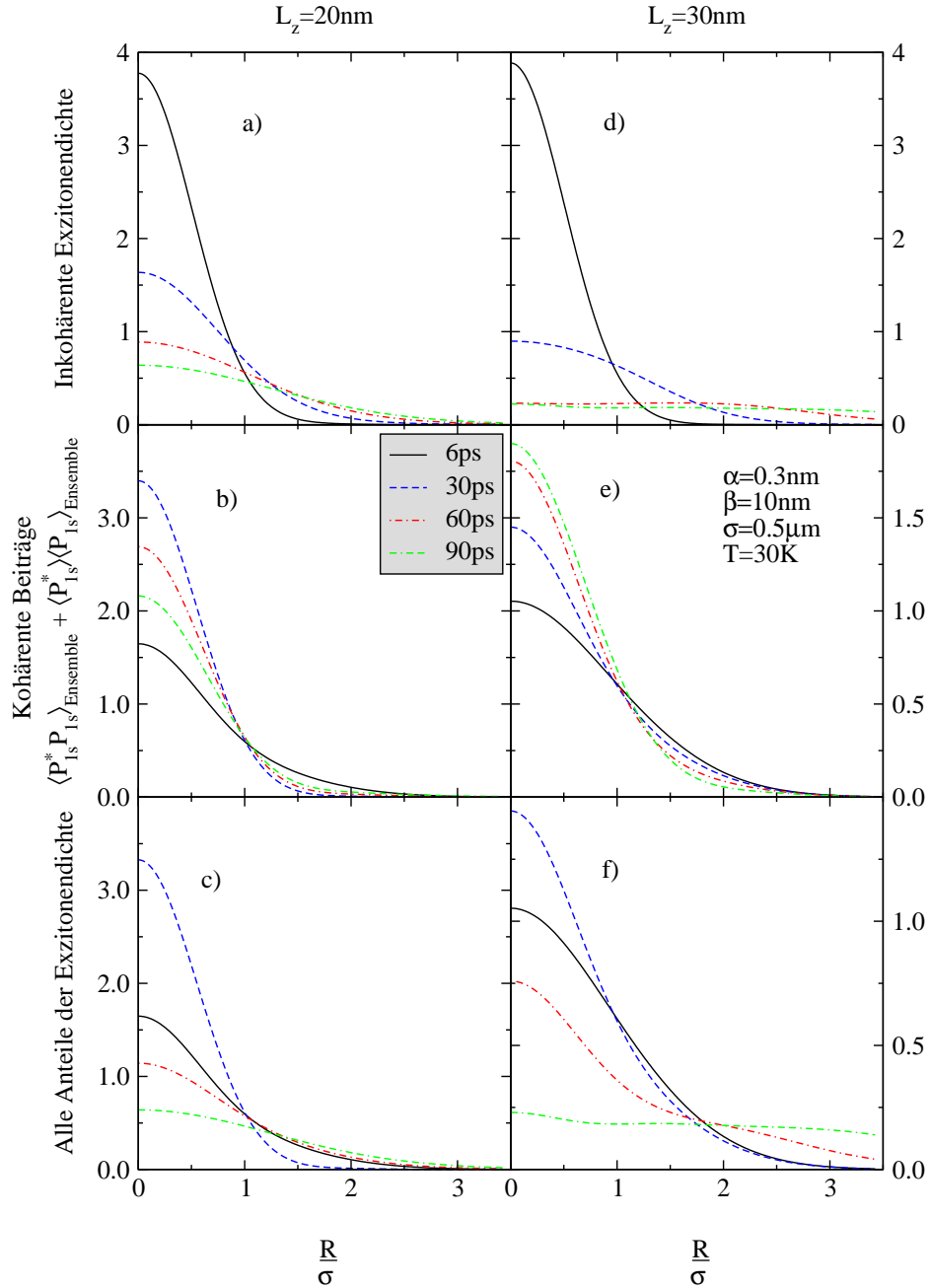


Abbildung 3.41: Gegenüberstellung der räumlichen Dynamik der inkohärenten (a, d), kohärenten (b, e) und aller Beiträge (c, f) zur „vollen“ Exzitonendichte.

unterschiedlich breiten Quantenfilme sind dabei erkennbar:

1. Die Verteilung weist ein zeitlich gesehen nicht-monotones Verhalten auf. Sie wird dabei zunächst räumlich schmaler und verbreitert sich anschließend wieder. Wie schmal die Verteilung wird, hängt dabei von der Quantenfilmbreite ab, wobei eine schmalere Heterostruktur ($L_z = 20nm$) ein stärkeres räumliches „Zusammenziehen“ vorweisen kann.⁸
2. Die Verteilung verliert ihre gaußförmige Gestalt und zeigt einen flachen Ausläufer bei größeren Zeiten, Abb. 3.41.d)

Erklärt werden kann die Zeitentwicklungen durch eine Kombination bereits bekannter Ortsraumdynamiken und der Zeitentwicklung der Gesamtpolarisation, Abb. 3.36.a), der gesamten kohärenten, Abb. 3.36.c), und der gesamten inkohärenten Exzitonendichte, Abb. 3.36.b). Zum einen ist das Verhältnis von Polarisation bzw. kohärenter Exzitonendichte zur inkohärenten Exzitonendichte bei Zeiten bis zu 20ps sehr groß. Allerdings fällt die inkohärente Exzitonendichte wesentlich langsamer ab. Daher ist die Ortsraumdynamik zu großen Zeiten schon einmal durch die inkohärente Exzitonendichte gegeben. Variiert man nun die Stärke der Unordnung, indem man die Quantenfilmbreite reduziert, so dephasiert die Polarisation wesentlich schneller. Die räumliche Breite der Polarisation war jedoch anfangs doppelt so groß wie bei der kohärenten und inkohärenten Exzitonendichte. In der Dynamik aller Beiträge ist daher eine Verschmälerung zu sehen, wobei der Effekt bei schmalen Strukturen stärker wird.

Ist die Unordnung geeignet gewählt, kann zusätzlich Folgendes passieren. Da die Dynamik der kohärenten Exzitonendichte durch die Dynamik der Polarisation bestimmt wird, zeigt die kohärente Exzitonendichte zum einen selber eine räumliche Verbreiterung. Zum anderen kann sie in die gleiche Größenordnung wie die inkohärente Exzitonendichte geraten, wobei dann die Überlagerung beider Verteilungen durch einen flachen Ausläufer direkt sichtbar wird. In dem hier vorliegenden Fall wird der flache Anteil durch die inkohärente Exzitonendichte beschrieben.

⁸Man beachte die unterschiedlichen Skalen!

Kapitel 4

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Bemühungen, die Dynamik räumlich lokaler, optischer Anregungen zu beschreiben, fortgeführt. Dabei wurden die Gleichungen entwickelt, welche die Beschreibung sowohl elektronischer wie auch exzitoni-scher Dichten unter dem Einfluß von Phononen, Materie-Feldwechselwirkung und struktureller Unordnung erlauben. Die Spezialisierung der Gleichungen erlaubte dann die Untersuchung kohärenter elektronischer Dichten wie auch kohärenter und inkohärenter Exzitonendichte. Im Fall der elektronischen Wellenpakete wur-den folgende Erkenntnisse erzielt.

- Die Dynamik läßt sich in das Problem der Schwerpunkts- und Relativbe-wegung separieren. Die Schwerpunktsbewegung wird dabei lediglich durch die Masse des Elektron-Lochpaares und der Größe des Anregungsgebietes bestimmt. Alle anderen Parameter, wie auch die konkrete Form der Wel-lenfunktionen, gehen in die Relativbewegung ein.
- Betrachtet man spektral schmale Anregungen am 1s-Exziton oder innerhalb des Bandes, so kann die Dynamik der Wellenpake näherungsweise durch die ausschließliche Betrachtung des 1s-Exzitons bzw. ebener Wellen beschrieben werden.
- Die Anregung an der Bandkante zeigt, daß hier ein kompliziertes Wech-selspiel der verschiedenen angeregten Zustände vorliegt. Zu sehen ist dies in Interferenzen, welche sich zum einen in zeitlich fluktuierenden Elektron-Lochabständen, wie auch in Oszillationen des zweiten Momentes der Orts-verteilungen zeigen. Die Vernachlässigung der gebundenen Zustände führt dabei zu einer qualitativ falschen Beschreibung.
- Die Berücksichtigung der Wechselwirkung scheint jedoch das prinzipielle Zeitverhalten des zweiten Momentes nichtwechselwirkender Teilchen ($\sim t^2$) selbst bei Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung nicht zu beeinflus-sen.

Dabei wurden die Untersuchungen auf die kohärenten Anteile der Elektron- und Lochdichte beschränkt. Ebenfalls wurde noch immer nicht die kombinierte Wirkung von aller Wechselwirkungen untersucht. Die Berücksichtigung von Phononen, Unordnung, Elektron-Feld- und Coulombwechselwirkung hätte einen numerischen Aufwand zur Folge, der mindestens in der gleichen Größenordnung wie die Rechnungen zur 1s-Exzitonendynamik liegt. Von theoretischer Seite ist dieses Problem jedoch bereits durch die Herleitung der entsprechenden Bewegungsgleichungen gelöst worden. Die Erweiterung der Untersuchungen auf diese Ebene ist im Moment noch die am ehesten machbare Fortführung der Arbeit.

Anhand der Untersuchung exzitonischer Wellenpaketdynamik wurden folgende Resultate erhalten.

- Die Charakterisierung der Dynamik kohärenter oder auch inkohärenter Exzitonendichte anhand des zweiten Momentes ist nun nicht länger sinnvoll. Verursacht wird dies zum einen durch die beiden verschiedenen Möglichkeiten der Generation inkohärenter Exzitonendichte, wie auch durch die Nichtgleichgewichtssituation durch den strahlenden Zerfall.
- Die Überlagerung von Polarisation, kohärenter und inkohärenter Exzitonendichte im Ortsraum kann zu einem nichtmonotonen Verhalten bezüglich der Verbreiterung des Wellenpaketes, wie auch zu Deformationen führen.
- Die Art und Weise, wie die Generationsprozesse ablaufen, führen dazu, daß für die kohärenten Anteile eine durch Wechselwirkungsprozesse beschleunigte Dynamik stattfinden kann. Die Ursache hierfür liegt in den Matrixelementen und Energiedispersionen der Exziton, Phononen und der Unordnung.

Die Berücksichtigung der Anregungsprozesse macht deutlich, daß diese das Zeitverhalten des zweiten Momenten erheblich modifizieren. Um eine qualitativ richtige Beschreibung zu erhalten, können diese bei der Betrachtung exzitonischer Dichten nicht vernachlässigt werden.

Die Situation bei Betrachtung von Nichtgleichgewichtssystemen ist damit wesentlich komplizierter wurde. Es ist nun nicht nur die Möglichkeit verlorengegangen, das Transportregime anhand des zweiten Momentes zu klassifizieren, sondern eine Auswertung dieser Größe ist regelrecht irreführend.

Einschränkungen stellen hier sicherlich die verwendete Markov- und Bornnäherung bezüglich der Unordnung dar. Damit fehlt die Möglichkeit der Beschreibung von Lokalisierung. Weiterhin resultiert aus der Energieerhaltung bei den Streuprozessen eine um Größenordnungen schmalere energetische Relativimpulsverteilung der kohärenten Anteile, was vor allem bei einem Vergleich mit den „weak-memory“-Rechnungen von [3, 4] deutlich wird. Diese Beschränkungen, wie auch die ausschließliche Verwendung von 1s-Exziton sind eine Folge der momentan verfügbaren Rechnerkapazitäten, welche keine bessere Beschreibung zulassen. Ob

die beobachteten Phänomene nun eine Folge der Näherungen sind oder auch bei einer „qualitativ besseren“ Beschreibung auftreten, läßt sich daher nur bedingt beurteilen.

Anhang A

Modellparameter

In den Rechnungen wurden die folgenden Parameter verwendet:

Elektronenmasse	$0.0672m_0$
Lochmasse in Quantenfilmebene	$0.112m_0$
Lochmasse in z-Richtung	$0.377m_0$
E_0	4.2meV
Bohrradius	14.69nm
GaAs-Brechungsindex	3.61
$\epsilon(\omega \rightarrow 0)$	13.74
$\epsilon(\omega \rightarrow \infty)$	10.9
GaAs-Bandlückenenergie	1.5eV
c_{LA}	$5905.3\frac{\text{m}}{\text{s}}$
Elektronenmasse m_0	$9.1095 \cdot 10^{-31}\text{kg}$

Tabelle A.1: Modellparameter in den numerischen Rechnungen

Anhang B

Spezielle Funktionen, Integrale und Differentialgleichungen

B.1 Transversale Deltafunktion

$$\begin{aligned}\vec{f}(\vec{r}) &= \sum_k \vec{f}(\vec{k}) e^{-\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ \vec{f}(\vec{k}) &= \frac{1}{L^d} \int d^d r \vec{f}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

Es gilt:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{f}(\vec{r}) = -i \sum_k \vec{k} \cdot \vec{f}(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{B.2})$$

und da der transversale Anteil divergenzfrei ist, haben wir einen Ausdruck für den longitudinalen Anteil von $\vec{f}(\vec{r})$ gefunden. Nun läßt sich $\vec{f}(\vec{r})$ schreiben als:

$$\vec{f}(\vec{r}) = \sum_k \left[\left(\frac{\vec{k}}{k} \cdot \vec{f}(\vec{k}) \right) \frac{\vec{k}}{k} + \left(\vec{f}(\vec{k}) - \left(\frac{\vec{k}}{k} \cdot \vec{f}(\vec{k}) \right) \frac{\vec{k}}{k} \right) \right] e^{-\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{B.3})$$

Nach Glg. (B.2) kann man nun direkt durch Anwenden der Divergenz auf Glg. (B.3) zeigen, daß der transversale Anteil gegeben ist durch:

$$\begin{aligned}\vec{f}^T(\vec{r}) &= \sum_k \left[\vec{f}(\vec{k}) - \left(\frac{\vec{k}}{k} \cdot \vec{f}(\vec{k}) \right) \frac{\vec{k}}{k} \right] e^{-\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ &= \sum_k \left[\left(Id - \frac{\vec{k}\vec{k}^t}{k^2} \right) \frac{1}{L^d} \int d^d r' \vec{f}(\vec{r}') \right] e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ &= \int d^d r' \delta^T(\vec{r} - \vec{r}') \vec{f}(\vec{r}') e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\end{aligned}\quad (\text{B.4})$$

Man erhält so für die Matrix der transversalen Deltafunktion

$$\delta^T(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{L^d} \sum_k \left(Id - \frac{\vec{k}\vec{k}^t}{k^2} \right) e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (\text{B.5})$$

B.2 Die hypergeometrische Funktion

Die Definition der Funktionen wurde dem Tabellenwerk von Gradstein und Rys-hik entnommen [31], der Vollständigkeit halber werden hier aber noch einmal die Definitionen, einige Funktionalgleichungen, sowie die zugehörige Differentialgleichung angegeben. Die Definition der konfluenten hypergeometrischen Reihe ist durch das Bildungsgesetz

$${}_1F_1(a, b; z) = 1 + \frac{a}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{b(b+1)(b+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots \quad (\text{B.6})$$

und die Kummersche Funktion durch

$$\Psi(a, b; z) = \frac{\Gamma(1-b)}{\Gamma(a-b+1)} {}_1F_1(a, b; z) + \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b} {}_1F_1(a-b+1, 2-b; z) \quad (\text{B.7})$$

definiert. Beides sind Lösungen der Differentialgleichung

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (b-z) \frac{dF}{dz} - aF = 0, \quad (\text{B.8})$$

welche die linear unabhängigen Lösungen

$${}_1F_1(a, b; z) \quad (\text{B.9})$$

$$\text{und} \quad (\text{B.10})$$

$$z^{1-b} {}_1F_1(a-b+1, 2-b; z) \quad (\text{B.11})$$

besitzt. Von den vielen Funktionalgleichungen sollen an dieser Stelle nur drei angegeben werden.

$$\frac{d}{dz} {}_1F_1(a, b; z) = \frac{a}{b} {}_1F_1(1+a, 1+b; z) \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{z}{b} {}_1F_1(1+a, 1+b; z) = {}_1F_1(1+a, b; z) - {}_1F_1(a, b; z) \quad (\text{B.13})$$

$${}_1F_1(a, b; z) = e^z {}_1F_1(b-a, b; -z) \quad (\text{B.14})$$

B.3 Exziton-Wellenfunktionen

Die Exzitonwellenfunktionen sind im Zweidimensionalen durch

$$\Psi_{k,m}(\vec{r}) = \frac{(i2kr)^{|m|}}{(2|m|)!} \sqrt{\frac{\pi k}{\mathcal{R}(1/4 + |\lambda|^2) \cosh(\pi|\lambda|)}} \sqrt{\prod_{j=0}^{|m|} \left[\left(j - \frac{1}{2} \right)^2 + |\lambda|^2 \right]}$$

$$\times \exp\left(\frac{\pi|\lambda|}{2} - ikr\right) \frac{\exp(im\phi)}{\sqrt{2\pi}} F\left(|m| + \frac{1}{2} + i|\lambda|; 2|m| + 1; 2ikr\right) \quad (\text{B.15})$$

$$(\text{B.16})$$

und den Energien ebener Wellen

$$\epsilon_{k,m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$$

gegeben[20]. Gebundene Zustände können mit Hilfe von Laguerre Polynomen $L_{n+|m|}^{2|m|}(\rho)$ berechnet werden:

$$\Psi_{n,m}(\rho) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^2 (n+0.5)^3} \frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} \rho^m e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+|m|}^{2|m|}(\rho) e^{im\phi}$$

mit $\rho = \frac{2r}{(n+0.5)a_0}$ (B.17)

Die zu diesen Zuständen zugehörigen Energien

$$\epsilon_n = -E_0 \frac{1}{(n+0.5)^2} \quad \text{mit } n = 0, 1, \dots, \quad (\text{B.18})$$

werden mit Hilfe der dreidimensionalen Exziton-Bindungsenergie $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_r a_0^2}$ ausgedrückt.

Anhang C

Bewegungsgleichungen

C.1 Bewegungsgleichungen der unfaktorierten Größen

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{12} &= (\epsilon_1 - \epsilon_2) \sigma_{12} \\
&+ \sum_{3q\lambda} (U_{31}(q\lambda) \sigma_{32} - U_{23}(q\lambda) \sigma_{13}) \\
&+ \sum_{345} (W(3451) \sigma_{3452} - W(2345) \sigma_{1345}) \\
&+ \sum_{34} (\Gamma(3441) \sigma_{32} - \Gamma(2443) \sigma_{13}) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left(D_{31}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{32} \rangle - D_{23}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left(F_{31}(q\lambda) \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{32} \rangle - F_{23}(q\lambda) \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle \right)
\end{aligned} \tag{C.1}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{1234} &= (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4) \sigma_{1234} \\
&+ \sum_{5q\lambda} (U_{51}(q\lambda) \sigma_{5234} + U_{52}(q\lambda) \sigma_{1534} \\
&\quad - U_{35}(q\lambda) \sigma_{1254} - U_{45}(q\lambda) \sigma_{1235}) \\
&+ \sum_{56} (W(3456) \sigma_{1256} - W(5612) \sigma_{5634}) \\
&+ \sum_{567} (W(4567) \sigma_{125367} + W(5367) \sigma_{125467})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +W(5617)\sigma_{562734} + W(5672)\sigma_{561734}) \\
& + \sum_{56} (\Gamma(3556)\sigma_{1246} - \Gamma(4556)\sigma_{1236} \\
& \quad \Gamma(5661)\sigma_{5234} - \Gamma(5662)\sigma_{5134}) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left(D_{51}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{5234} \rangle + D_{52}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1534} \rangle \right. \\
& \quad \left. - D_{35}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1254} \rangle - D_{45}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1235} \rangle \right) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left(F_{51}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{5234} \rangle + F_{52}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1534} \rangle \right. \\
& \quad \left. - F_{35}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1254} \rangle - F_{45}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1235} \rangle \right)
\end{aligned} \tag{C.2}$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{l\nu} \rangle = -\hbar\Omega_{l\nu} \langle a_{l\nu} \rangle - \sum_{12} F_{12}(l\nu)\sigma_{12} \tag{C.3}$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{l\nu} \rangle = -\hbar\omega_{l\nu} \langle b_{l\nu} \rangle - \sum_{12} D_{12}(l\nu)\sigma_{12} \tag{C.4}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu} a_{l\nu} \rangle & = -(\hbar\Omega_{m\mu} + \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu} a_{l\nu} \rangle \\
& - \sum_{12} [F_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle + F_{12}(-m\mu) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle]
\end{aligned} \tag{C.5}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu}^\dagger a_{l\nu} \rangle & = (\hbar\Omega_{m\mu} - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu}^\dagger a_{l\nu} \rangle \\
& - \sum_{12} [F_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle + F_{12}(m\mu) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle]
\end{aligned} \tag{C.6}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{m\mu} b_{l\nu} \rangle & = -(\hbar\omega_{m\mu} + \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{m\mu} b_{l\nu} \rangle \\
& - \sum_{12} [D_{12}(-l\nu) \langle b_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle + D_{12}(-m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle]
\end{aligned} \tag{C.7}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle & = (\hbar\omega_{m\mu} - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle \\
& - \sum_{12} [D_{12}(-l\nu) \langle b_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle - D_{12}(m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle]
\end{aligned} \tag{C.8}$$

assistierte Größen

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle &= (\epsilon_1 - \epsilon_2 - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle \\
&+ \sum_{3q\lambda} (U_{31}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - U_{23}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle) \\
&+ \sum_{345} (W(3451) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{3452} \rangle - W(2345) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1345} \rangle) \\
&+ \sum_{34} (\Gamma(3441) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - \Gamma(2443) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left(D_{31}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - D_{23}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \\
&- \sum_{34} D_{34}(-l\nu) (\sigma_{14} \delta_{23} - \sigma_{1324}) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left(F_{31}(q\lambda) \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - F_{23}(q\lambda) \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle \right)
\end{aligned} \tag{C.9}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle &= (\epsilon_1 - \epsilon_2 - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle \\
&+ \sum_{3q\lambda} (U_{31}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - U_{23}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle) \\
&+ \sum_{345} (W(3451) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{3452} \rangle - W(2345) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1345} \rangle) \\
&+ \sum_{34} (\Gamma(3441) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - \Gamma(2443) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left(D_{31}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - D_{23}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left(F_{31}(q\lambda) \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle - F_{23}(q\lambda) \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \\
&- \sum_{34} F_{34}(-l\nu) (\sigma_{14} \delta_{23} - \sigma_{1324})
\end{aligned} \tag{C.10}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1234} \rangle &= (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1234} \rangle \\
&+ \sum_{5q\lambda} (U_{51}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle + U_{52}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1534} \rangle \\
&\quad - U_{35}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle - U_{45}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{56} (W(3456)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1256}\rangle - W(5612)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5634}\rangle) \\
& + \sum_{567} (W(4567)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{125367}\rangle + W(5367)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{125467}\rangle \\
& \quad + W(5617)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{562734}\rangle + W(5672)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{561734}\rangle) \\
& + \sum_{56} (\Gamma(3556)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1246}\rangle - \Gamma(4556)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1236}\rangle \\
& \quad \Gamma(5661)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle - \Gamma(5662)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5134}\rangle) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left(D_{51}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle + D_{52}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle \right. \\
& \quad \left. - D_{35}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle - D_{45}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1235}\rangle \right) \\
& - \sum_{56} D_{56}(-l\nu) (\sigma_{1236}\delta_{45} - \sigma_{1246}\delta_{35} + \sigma_{125346}) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left(F_{51}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle + F_{52}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle \right. \\
& \quad \left. - F_{35}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle - F_{45}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1235}\rangle \right) \\
& \hspace{15em} (C.11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
- i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1234}\rangle & = (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1234}\rangle \\
& + \sum_{5q\lambda} (U_{51}(q\lambda)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle + U_{52}(q\lambda)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle \\
& \quad - U_{35}(q\lambda)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle - U_{45}(q\lambda)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1235}\rangle) \\
& + \sum_{56} (W(3456)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1256}\rangle - W(5612)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5634}\rangle) \\
& + \sum_{567} (W(4567)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{125367}\rangle + W(5367)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{125467}\rangle \\
& \quad + W(5617)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{562734}\rangle + W(5672)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{561734}\rangle) \\
& + \sum_{56} (\Gamma(3556)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1246}\rangle - \Gamma(4556)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1236}\rangle \\
& \quad \Gamma(5661)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle - \Gamma(5662)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5134}\rangle) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left(D_{51}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle + D_{52}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle \right. \\
& \quad \left. - D_{35}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle - D_{45}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1235}\rangle \right) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left(F_{51}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle + F_{52}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle \right. \\
& \quad \left. - F_{35}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle - F_{45}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1235}\rangle \right)
\end{aligned}$$

$$- \sum_{56} F_{56}(-l\nu) (\sigma_{1236}\delta_{45} - \sigma_{1246}\delta_{35} + \sigma_{125346}) \quad (\text{C.12})$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu} b_{l\nu} \rangle &= -(\hbar\Omega_{m\mu} + \hbar\omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu} b_{l\nu} \rangle \\ &- \sum_{12} [F_{12}(-m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle + D_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle] \quad (\text{C.13}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle &= (\hbar\Omega_{m\mu} - \hbar\omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle \\ &- \sum_{12} [F_{12}(m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle + D_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle] \quad (\text{C.14}) \end{aligned}$$

C.2 Bewegungsgleichungen der Korrekturen

C.2.1 Faktorisierungen

rein fermionische Korrelationen:

$$\langle c_1^\dagger c_2 \rangle = \langle c_1^\dagger c_2 \rangle^c \quad (\text{C.15})$$

$$\langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle = \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle c_2^\dagger c_4 \rangle + \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \quad (\text{C.16})$$

$$\begin{aligned} \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle &= \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_3^\dagger c_5 \rangle - \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\ &- \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\ &+ \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \right) \\ &+ \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\ &- \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c \\ &+ \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c \\ &- \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle c_3^\dagger c_4 \rangle \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\ &+ \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_5 \rangle^c + \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle^c \quad (\text{C.17}) \end{aligned}$$

rein bosonische Korrelationen:

$$\langle a_1 \rangle = \langle a_1 \rangle^c \quad (\text{C.18})$$

$$\langle a_1 a_2 \rangle = \langle a_1 \rangle \langle a_2 \rangle + \langle a_1 a_2 \rangle^c \quad (\text{C.19})$$

Korrelationen aus fermionischen (c) und bosonischen (a) Operatoren:

$$\langle ac_1^\dagger c_2 \rangle = \langle a \rangle \langle c_1^\dagger c_2 \rangle + \langle ac_1^\dagger c_2 \rangle^c \quad (\text{C.20})$$

$$\begin{aligned} \langle a_1 a_2 c_1^\dagger c_2 \rangle &= \langle a_1 \rangle \langle a_2 c_1^\dagger c_2 \rangle^c + \langle a_2 \rangle \langle a_1 c_1^\dagger c_2 \rangle^c + \langle a_1 a_2 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_2 \rangle \\ &+ \langle a_1 \rangle \langle a_2 \rangle \langle c_1^\dagger c_2 \rangle + \langle a_1 a_2 c_1^\dagger c_2 \rangle^c \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

$$\begin{aligned} \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle &= \langle ac_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle ac_1^\dagger c_3 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \\ &+ \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle ac_2^\dagger c_3 \rangle^c - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle ac_2^\dagger c_4 \rangle^c \\ &+ \langle a \rangle \left(\langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle c_2^\dagger c_4 \rangle + \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \right) \\ &+ \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

$$\begin{aligned} \langle a_1 a_2 c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle &= \langle a_1 a_2 \rangle^c \left(\langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle c_2^\dagger c_4 \rangle + \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \right) \\ &+ \langle a_1 a_2 c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \\ &+ \langle a_1 c_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle a_2 c_2^\dagger c_3 \rangle^c - \langle a_1 c_1^\dagger c_3 \rangle^c \langle a_2 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \\ &+ \langle a_2 c_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle a_1 c_2^\dagger c_3 \rangle^c - \langle a_2 c_1^\dagger c_3 \rangle^c \langle a_1 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \\ &+ \langle a_1 \rangle \langle a_2 c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c + \langle a_2 \rangle \langle a_1 c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \\ &+ \langle a_1 \rangle \langle a_2 \rangle \left(\langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle c_2^\dagger c_4 \rangle + \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c \right) \\ &+ \langle a_2 \rangle \left(\langle a_1 c_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle a_1 c_1^\dagger c_3 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle a_1 c_2^\dagger c_3 \rangle^c - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle a_1 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \right) \\ &+ \langle a_1 \rangle \left(\langle a_2 c_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - \langle a_2 c_1^\dagger c_3 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle a_2 c_2^\dagger c_3 \rangle^c - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle a_2 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \right) \\ &+ \langle a_1 a_2 c_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3 \rangle + \langle a_1 a_2 c_2^\dagger c_3 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \\ &- \langle a_1 a_2 c_1^\dagger c_3 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_4 \rangle - \langle a_1 a_2 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

$$\begin{aligned} \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle &= \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle^c \\ &+ \langle a \rangle \left[\langle c_1^\dagger c_4 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_3^\dagger c_5 \rangle - \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \right. \\ &\quad - \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\ &\quad \left. + \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \right) \right. \\ &\quad \left. + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \right. \\ &\quad \left. - \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c \\
& - \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle c_3^\dagger c_4 \rangle \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\
& + \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_5 \rangle^c + \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle^c \Big] \\
& + \langle ac_1^\dagger c_4 \rangle^c \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_3^\dagger c_5 \rangle - \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\
& - \langle ac_1^\dagger c_5 \rangle^c \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\
& + \langle ac_1^\dagger c_6 \rangle^c \left(\langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \right) \\
& + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \left(\langle ac_2^\dagger c_6 \rangle^c \langle c_3^\dagger c_5 \rangle - \langle ac_2^\dagger c_5 \rangle^c \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\
& - \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \left(\langle ac_2^\dagger c_6 \rangle^c \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle ac_2^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \right) \\
& + \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \left(\langle ac_2^\dagger c_5 \rangle^c \langle c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle ac_2^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \right) \\
& + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle ac_3^\dagger c_5 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle ac_3^\dagger c_6 \rangle^c \right) \\
& - \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle ac_3^\dagger c_4 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle ac_3^\dagger c_6 \rangle^c \right) \\
& + \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \left(\langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle ac_3^\dagger c_4 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle ac_3^\dagger c_5 \rangle^c \right) \\
& + \langle ac_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c - \langle ac_1^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\
& - \langle ac_1^\dagger c_5 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle ac_1^\dagger c_5 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c \\
& + \langle ac_1^\dagger c_6 \rangle^c \langle c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c - \langle ac_1^\dagger c_6 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c \\
& - \langle ac_3^\dagger c_5 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle ac_3^\dagger c_4 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\
& + \langle ac_3^\dagger c_6 \rangle^c \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_5 \rangle^c \\
& + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle ac_2^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \langle ac_1^\dagger c_3^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\
& - \langle c_1^\dagger c_5 \rangle \langle ac_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle c_2^\dagger c_5 \rangle \langle ac_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_6 \rangle^c \\
& + \langle c_1^\dagger c_6 \rangle \langle ac_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c - \langle c_2^\dagger c_6 \rangle \langle ac_1^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 \rangle^c \\
& - \langle c_3^\dagger c_5 \rangle \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_6 \rangle^c + \langle c_3^\dagger c_4 \rangle \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_5 c_6 \rangle^c \\
& + \langle c_3^\dagger c_6 \rangle \langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_5 \rangle^c
\end{aligned} \tag{C.24}$$

C.2.2 Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{12} &= (\epsilon_1 - \epsilon_2) \sigma_{12} \\
&+ \sum_{3q\lambda} (U_{31}(q\lambda) \sigma_{32} - U_{23}(q\lambda) \sigma_{13}) \\
&+ \sum_{345} [W(3451) (\sigma_{32} \sigma_{45} - \sigma_{35} \sigma_{42} + \sigma_{345}^c) \\
&\quad - W(2345) (\sigma_{15} \sigma_{34} - \sigma_{14} \sigma_{35} + \sigma_{1345}^c)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{34} (\Gamma(3441)\sigma_{32} - \Gamma(2443)\sigma_{13}) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left[D_{31}(q\lambda) \left(\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{32} \rangle^c + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \sigma_{32} \right) \right. \\
& \quad \left. - D_{23}(q\lambda) \left(\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{13} \rangle^c + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \sigma_{13} \right) \right] \\
& + \sum_{3q\lambda} \left[F_{31}(q\lambda) \left(\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{32} \rangle^c + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \sigma_{32} \right) \right. \\
& \quad \left. - F_{23}(q\lambda) \left(\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda})\hat{\sigma}_{13} \rangle^c + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \sigma_{13} \right) \right] \\
- i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_{1234}^c & = (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4) \sigma_{1234}^c \\
& + \sum_{5q\lambda} (U_{51}(q\lambda)\sigma_{5234}^c + U_{52}(q\lambda)\sigma_{1534}^c \\
& \quad - U_{35}(q\lambda)\sigma_{1254}^c - U_{45}(q\lambda)\sigma_{1235}^c) \\
& + \sum_{56} [W(3456) (\sigma_{16}\sigma_{25} - \sigma_{15}\sigma_{26} + \sigma_{1256}^c) \\
& \quad - W(5612) (\sigma_{54}\sigma_{63} - \sigma_{53}\sigma_{64} + \sigma_{5634}^c)] \\
& + \sum_{567} \{ (W(4567) - W(4576)) [\sigma_{17}\sigma_{26}\sigma_{53} + \sigma_{17}\sigma_{2536}^c \\
& \quad + \sigma_{26}\sigma_{1537}^c + \sigma_{57}\sigma_{1236}^c] \\
& \quad + (W(5367) - W(5376)) [\sigma_{17}\sigma_{26}\sigma_{54} + \sigma_{17}\sigma_{2546}^c \\
& \quad + \sigma_{26}\sigma_{1547}^c + \sigma_{57}\sigma_{1246}^c] \\
& \quad + (W(5617) - W(6517)) [\sigma_{54}\sigma_{63}\sigma_{27} + \sigma_{54}\sigma_{6273}^c \\
& \quad + \sigma_{63}\sigma_{5274}^c + \sigma_{57}\sigma_{6234}^c] \\
& \quad + (W(5672) - W(6572)) [\sigma_{54}\sigma_{63}\sigma_{17} + \sigma_{57}\sigma_{6134}^c \\
& \quad + \sigma_{63}\sigma_{5174}^c + \sigma_{54}\sigma_{6173}^c] \\
& \quad + W(4567) [\sigma_{53}\sigma_{1267}^c + \sigma_{125367}^c] \\
& \quad + W(5367) [\sigma_{54}\sigma_{1267}^c + \sigma_{125467}^c] \\
& \quad + W(5617) [\sigma_{27}\sigma_{5634}^c + \sigma_{562734}^c] \\
& \quad + W(5672) [\sigma_{17}\sigma_{5634}^c + \sigma_{561734}^c] \} \\
& + \sum_{56} (\Gamma(3556)\sigma_{1246}^c - \Gamma(4556)\sigma_{1236}^c \\
& \quad - \Gamma(5661)\sigma_{5234}^c - \Gamma(5662)\sigma_{5134}^c) \\
& + \sum_{3q\lambda} \left\{ D_{51}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{5234} \rangle^c + D_{52}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1534} \rangle^c \right. \\
& \quad \left. - D_{35}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1254} \rangle^c - D_{45}(q\lambda) \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + D_{51}(q\lambda)\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \sigma_{5234}^c + D_{52}(q\lambda)\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \sigma_{1534}^c \\
& - D_{35}(q\lambda)\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \sigma_{1254}^c - D_{45}(q\lambda)\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \sigma_{1235}^c \\
& + \sigma_{54} \left(D_{51}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c - D_{52}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \\
& - \sigma_{53} \left(D_{51}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c - D_{52}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle \right) \\
& + \sigma_{15} \left(D_{35}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c - D_{45}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle \right) \\
& - \sigma_{25} \left(D_{35}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c - D_{45}(q\lambda)\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \Big\} \\
& + \sum_{3q\lambda} \Big\{ F_{51}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c + F_{52}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{1534} \rangle^c \\
& - F_{35}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c - F_{45}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \\
& + F_{51}(q\lambda)\langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \sigma_{5234}^c + F_{52}(q\lambda)\langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \sigma_{1534}^c \\
& - F_{35}(q\lambda)\langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \sigma_{1254}^c - F_{45}(q\lambda)\langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \sigma_{1235}^c \\
& + \sigma_{54} \left(F_{51}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c - F_{52}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \\
& - \sigma_{53} \left(F_{51}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c - F_{52}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle \right) \\
& + \sigma_{15} \left(F_{35}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c - F_{45}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle \right) \\
& - \sigma_{25} \left(F_{35}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c - F_{45}(q\lambda)\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle \right) \Big\} \\
\end{aligned} \tag{C.25}$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{l\nu} \rangle = -\hbar\Omega_{l\nu} \langle a_{l\nu} \rangle - \sum_{12} F_{12}(l\nu) \sigma_{12} \tag{C.26}$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{l\nu} \rangle = -\hbar\omega_{l\nu} \langle b_{l\nu} \rangle - \sum_{12} D_{12}(l\nu) \sigma_{12} \tag{C.27}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu} a_{l\nu} \rangle^c & = -(\hbar\Omega_{m\mu} + \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu} a_{l\nu} \rangle^c \\
& - \sum_{12} [F_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + F_{12}(-m\mu) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \tag{C.28}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu}^\dagger a_{l\nu} \rangle^c & = (\hbar\Omega_{m\mu} - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu}^\dagger a_{l\nu} \rangle^c \\
& - \sum_{12} [F_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + F_{12}(m\mu) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \tag{C.29}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{m\mu} b_{l\nu} \rangle^c &= -(\hbar\omega_{m\mu} + \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{m\mu} b_{l\nu} \rangle^c \\
&- \sum_{12} [D_{12}(-l\nu) \langle b_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + D_{12}(-m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \quad (\text{C.30})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle^c &= (\hbar\omega_{m\mu} - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle^c \\
&- \sum_{12} [D_{12}(-l\nu) \langle b_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle^c - D_{12}(m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \quad (\text{C.31})
\end{aligned}$$

assistierte Größen

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c &= (\epsilon_1 - \epsilon_2 - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c \\
&+ \sum_{3q\lambda} (U_{31}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c - U_{23}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c) \\
&+ \sum_{345} [W(3451) (\sigma_{32} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{45} \rangle^c + \sigma_{45} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c \\
&\quad - \sigma_{35} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{42} \rangle^c - \sigma_{42} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{35} \rangle^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{3452} \rangle^c) \\
&\quad - W(2345) (\sigma_{34} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c + \sigma_{15} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{34} \rangle^c \\
&\quad - \sigma_{35} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c - \sigma_{14} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{35} \rangle^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1345} \rangle^c) \\
&+ \sum_{34} (\Gamma(3441) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c - \Gamma(2443) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left[D_{31}(q\lambda) \left(\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{32} \right) \right. \\
&\quad \left. - D_{23}(q\lambda) \left(\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{13} \right) \right] \\
&- \sum_{34} D_{34}(-l\nu) [\sigma_{14} \delta_{23} - \sigma_{14} \sigma_{32} - \sigma_{1324}^c] \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left[F_{31}(q\lambda) \left(\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{32} \right) \right. \\
&\quad \left. - F_{23}(q\lambda) \left(\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{13} \right) \right] \quad (\text{C.32})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c &= (\epsilon_1 - \epsilon_2 - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c \\
&+ \sum_{3q\lambda} (U_{31}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c - U_{23}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c) \\
&+ \sum_{345} [W(3451) (\sigma_{32} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{45} \rangle^c + \sigma_{45} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c \\
&\quad - \sigma_{35} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{42} \rangle^c - \sigma_{42} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{35} \rangle^c + \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{3452} \rangle^c) \\
&\quad - W(2345) (\sigma_{34} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c + \sigma_{15} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{34} \rangle^c \\
&\quad - \sigma_{35} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c - \sigma_{14} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{35} \rangle^c + \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1345} \rangle^c) \\
&+ \sum_{34} (\Gamma(3441) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c - \Gamma(2443) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c) \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left[D_{31}(q\lambda) \left(\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{32} \right) \right. \\
&\quad \left. - D_{23}(q\lambda) \left(\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{13} \right) \right] \\
&+ \sum_{3q\lambda} \left[F_{31}(q\lambda) \left(\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{32} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{32} \right) \right. \\
&\quad \left. - F_{23}(q\lambda) \left(\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{13} \right) \right] \\
&- \sum_{34} F_{34}(-l\nu) [\sigma_{14} \delta_{23} - \sigma_{14} \sigma_{32} - \sigma_{1324}^c]
\end{aligned} \tag{C.33}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1234} \rangle^c &= (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \hbar\omega_{l\nu}) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1234} \rangle^c \\
&+ \sum_{5q\lambda} [U_{51}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c + U_{52}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1534} \rangle^c \\
&\quad - U_{35}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c - U_{45}(q\lambda) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c] \\
&+ \sum_{56} [W(3456) (\langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c \sigma_{25} - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \sigma_{26} \\
&\quad + \sigma_{16} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c - \sigma_{15} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1256} \rangle^c) \\
&\quad - W(5612) (\langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \sigma_{63} - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \sigma_{64}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sigma_{54} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{63} \rangle^c - \sigma_{53} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{64} \rangle^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5634} \rangle^c \\
+ \sum_{567} \{ & W(3456) [\langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{125367} \rangle^c \\
& + \sigma_{53} (\sigma_{26} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{17} \rangle^c - \sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c) \\
& - \sigma_{16} (\sigma_{53} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c + \sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c) \\
& + \sigma_{17} (\sigma_{53} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c + \sigma_{26} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c) \\
& - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c \sigma_{2537}^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c \sigma_{1537}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{17} \rangle^c \sigma_{2536}^c - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c \sigma_{1536}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \sigma_{1267}^c - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{56} \rangle^c \sigma_{1237}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{57} \rangle^c \sigma_{1236}^c \\
& - \sigma_{16} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{2537} \rangle^c + \sigma_{26} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1537} \rangle^c \\
& + \sigma_{17} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{2536} \rangle^c - \sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1536} \rangle^c \\
& + \sigma_{53} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1267} \rangle^c - \sigma_{56} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1237} \rangle^c \\
& + \sigma_{57} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1236} \rangle^c] \\
& W(5367) [\langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{125467} \rangle^c \\
& + \sigma_{54} (\sigma_{26} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{17} \rangle^c - \sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c) \\
& - \sigma_{16} (\sigma_{54} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c + \sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c) \\
& + \sigma_{17} (\sigma_{54} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c + \sigma_{26} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c) \\
& - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c \sigma_{2547}^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c \sigma_{1547}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{17} \rangle^c \sigma_{2546}^c - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c \sigma_{1546}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \sigma_{1267}^c - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{56} \rangle^c \sigma_{1247}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{57} \rangle^c \sigma_{1246}^c \\
& - \sigma_{16} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{2547} \rangle^c + \sigma_{26} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1547} \rangle^c \\
& + \sigma_{17} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{2546} \rangle^c - \sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1546} \rangle^c \\
& + \sigma_{54} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1267} \rangle^c - \sigma_{56} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1247} \rangle^c \\
& + \sigma_{57} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1246} \rangle^c] \\
& W(5617) [\langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{562734} \rangle^c \\
& + \sigma_{27} (\sigma_{63} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c - \sigma_{64} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c) \\
& - \sigma_{53} (\sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{64} \rangle^c + \sigma_{64} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c) \\
& + \sigma_{54} (\sigma_{27} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{63} \rangle^c + \sigma_{63} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c) \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{57} \rangle^c \sigma_{6234}^c - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{67} \rangle^c \sigma_{5234}^c \\
& - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \sigma_{6274}^c + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{63} \rangle^c \sigma_{5274}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \sigma_{6273}^c - \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{64} \rangle^c \sigma_{5273}^c \\
& + \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c \sigma_{5634}^c \\
& + \sigma_{57} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{6234} \rangle^c - \sigma_{53} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{6274} \rangle^c \\
& - \sigma_{67} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c + \sigma_{63} \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5274} \rangle^c
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\sigma_{54}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{6273}\rangle^c - \sigma_{64}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5273}\rangle^c \\
& +\sigma_{27}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5634}\rangle^c] \\
W(5672) & [\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{561734}\rangle^c \\
& +\sigma_{17}(\sigma_{63}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c - \sigma_{64}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c) \\
& -\sigma_{53}(\sigma_{17}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{64}\rangle^c + \sigma_{64}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c) \\
& +\sigma_{54}(\sigma_{17}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{63}\rangle^c + \sigma_{63}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c) \\
& +\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{57}\rangle^c\sigma_{6134}^c - \langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{67}\rangle^c\sigma_{5134}^c \\
& -\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c\sigma_{6174}^c + \langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{63}\rangle^c\sigma_{5174}^c \\
& +\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c\sigma_{6173}^c - \langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{64}\rangle^c\sigma_{5173}^c \\
& +\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c\sigma_{5634}^c \\
& +\sigma_{57}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{6134}\rangle^c - \sigma_{53}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{6174}\rangle^c \\
& -\sigma_{67}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5134}\rangle^c + \sigma_{63}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5174}\rangle^c \\
& +\sigma_{54}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{6173}\rangle^c - \sigma_{64}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5173}\rangle^c \\
& +\sigma_{17}\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5634}\rangle^c] \} \\
+ \sum_{56} & (\Gamma(3556)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1246}\rangle^c - \Gamma(4556)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1236}\rangle^c \\
& \Gamma(5661)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c - \Gamma(5662)\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5134}\rangle^c) \\
+ \sum_{5q\lambda} & \left\{ D_{51}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c \right. \right. \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\rangle^c\sigma_{5234}^c \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{23}\rangle^c\sigma_{54} \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{24}\rangle^c\sigma_{53} \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{23}\rangle^c\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{24}\rangle^c\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c \\
& \left. +\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}\rangle\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c \right] \\
& +D_{52}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle^c \right. \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\rangle^c\sigma_{1534}^c \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{14}\rangle^c\sigma_{53} \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})b_{l\nu}\hat{\sigma}_{13}\rangle^c\sigma_{54} \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{14}\rangle^c\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{13}\rangle^c\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c \\
& \left. +\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}\rangle\langle b_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle^c \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -D_{35}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \right. \\
& \quad + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1254}^c \\
& \quad + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \sigma_{25} \\
& \quad - \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \sigma_{15} \\
& \quad + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c \\
& \quad - \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& \quad \left. + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \right] \\
& -D_{45}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \right. \\
& \quad + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1235}^c \\
& \quad + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \sigma_{15} \\
& \quad - \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \sigma_{25} \\
& \quad + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& \quad - \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c \\
& \quad \left. + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \right] \} \\
& - \sum_{56} D_{56}(-l\nu) [\sigma_{1236}^c \delta_{45} - \sigma_{1246}^c \delta_{35} + \sigma_{125346}^c \\
& \quad + \sigma_{16} \sigma_{2534}^c - \sigma_{26} \sigma_{1534}^c \\
& \quad + \sigma_{53} \sigma_{1246}^c - \sigma_{54} \sigma_{1236}^c] \\
& + \sum_{5q\lambda} \left\{ F_{51}(q\lambda) \left[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c \right. \right. \\
& \quad + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{5234}^c \\
& \quad + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \sigma_{54} \\
& \quad - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \sigma_{53} \\
& \quad + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \\
& \quad - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \\
& \quad \left. + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c \right] \\
& + F_{52}(q\lambda) \left[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1534} \rangle^c \right. \\
& \quad + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1534}^c \\
& \quad + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \sigma_{53} \\
& \quad - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \sigma_{54}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \\
& + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c] \\
& - F_{35}(q\lambda) \left[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \right. \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1254}^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \sigma_{25} \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \sigma_{15} \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& \left. + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \right] \\
& - F_{45}(q\lambda) \left[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \right. \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1235}^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \sigma_{15} \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) b_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \sigma_{25} \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c \\
& \left. + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \right] \} \tag{C.34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
- i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1234} \rangle^c & = (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \hbar\Omega_{l\nu}) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1234} \rangle^c \\
& + \sum_{5q\lambda} [U_{51}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c + U_{52}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1534} \rangle^c \\
& \quad - U_{35}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c - U_{45}(q\lambda) \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c] \\
& + \sum_{56} [W(3456) (\langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c \sigma_{25} - \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \sigma_{26} \\
& \quad + \sigma_{16} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c - \sigma_{15} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c + \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1256} \rangle^c) \\
& \quad - W(5612) (\langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \sigma_{63} - \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \sigma_{64} \\
& \quad + \sigma_{54} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{63} \rangle^c - \sigma_{53} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{64} \rangle^c + \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{5634} \rangle^c)] \\
& + \sum_{567} \{ W(3456) [\langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{125367} \rangle^c \\
& \quad + \sigma_{53} (\sigma_{26} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{17} \rangle^c - \sigma_{27} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{16} \rangle^c) \\
& \quad - \sigma_{16} (\sigma_{53} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{27} \rangle^c + \sigma_{27} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c) \\
& \quad + \sigma_{17} (\sigma_{53} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{26} \rangle^c + \sigma_{26} \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{16}\rangle^c\sigma_{2537}^c + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{26}\rangle^c\sigma_{1537}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c\sigma_{2536}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{27}\rangle^c\sigma_{1536}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c\sigma_{1267}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{56}\rangle^c\sigma_{1237}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{57}\rangle^c\sigma_{1236}^c \\
& - \sigma_{16}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{2537}\rangle^c + \sigma_{26}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1537}\rangle^c \\
& + \sigma_{17}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{2536}\rangle^c - \sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1536}\rangle^c \\
& + \sigma_{53}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1267}\rangle^c - \sigma_{56}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1237}\rangle^c \\
& + \sigma_{57}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1236}\rangle^c]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W(5367) & [\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{125467}\rangle^c \\
& + \sigma_{54}(\sigma_{26}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c - \sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{16}\rangle^c) \\
& - \sigma_{16}(\sigma_{54}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{27}\rangle^c + \sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c) \\
& + \sigma_{17}(\sigma_{54}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{26}\rangle^c + \sigma_{26}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c) \\
& - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{16}\rangle^c\sigma_{2547}^c + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{26}\rangle^c\sigma_{1547}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c\sigma_{2546}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{27}\rangle^c\sigma_{1546}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c\sigma_{1267}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{56}\rangle^c\sigma_{1247}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{57}\rangle^c\sigma_{1246}^c \\
& - \sigma_{16}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{2547}\rangle^c + \sigma_{26}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1547}\rangle^c \\
& + \sigma_{17}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{2546}\rangle^c - \sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1546}\rangle^c \\
& + \sigma_{54}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1267}\rangle^c - \sigma_{56}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1247}\rangle^c \\
& + \sigma_{57}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1246}\rangle^c]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W(5617) & [\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{562734}\rangle^c \\
& + \sigma_{27}(\sigma_{63}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c - \sigma_{64}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c) \\
& - \sigma_{53}(\sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{64}\rangle^c + \sigma_{64}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{27}\rangle^c) \\
& + \sigma_{54}(\sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{63}\rangle^c + \sigma_{63}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{27}\rangle^c) \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{57}\rangle^c\sigma_{6234}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{67}\rangle^c\sigma_{5234}^c \\
& - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c\sigma_{6274}^c + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{63}\rangle^c\sigma_{5274}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c\sigma_{6273}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{64}\rangle^c\sigma_{5273}^c \\
& + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{27}\rangle^c\sigma_{5634}^c \\
& + \sigma_{57}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{6234}\rangle^c - \sigma_{53}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{6274}\rangle^c \\
& - \sigma_{67}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c + \sigma_{63}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5274}\rangle^c \\
& + \sigma_{54}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{6273}\rangle^c - \sigma_{64}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5273}\rangle^c \\
& + \sigma_{27}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5634}\rangle^c]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W(5672) & [\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{561734}\rangle^c \\
& + \sigma_{17}(\sigma_{63}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c - \sigma_{64}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c) \\
& - \sigma_{53}(\sigma_{17}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{64}\rangle^c + \sigma_{64}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\sigma_{54}(\sigma_{17}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{63}\rangle^c + \sigma_{63}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c) \\
& +\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{57}\rangle^c\sigma_{6134}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{67}\rangle^c\sigma_{5134}^c \\
& -\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c\sigma_{6174}^c + \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{63}\rangle^c\sigma_{5174}^c \\
& +\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c\sigma_{6173}^c - \langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{64}\rangle^c\sigma_{5173}^c \\
& +\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{17}\rangle^c\sigma_{5634}^c \\
& +\sigma_{57}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{6134}\rangle^c - \sigma_{53}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{6174}\rangle^c \\
& -\sigma_{67}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5134}\rangle^c + \sigma_{63}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5174}\rangle^c \\
& +\sigma_{54}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{6173}\rangle^c - \sigma_{64}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5173}\rangle^c \\
& +\sigma_{17}\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5634}\rangle^c] \} \\
+ & \sum_{56} (\Gamma(3556)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1246}\rangle^c - \Gamma(4556)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1236}\rangle^c \\
& \Gamma(5661)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c - \Gamma(5662)\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5134}\rangle^c) \\
+ & \sum_{5q\lambda} \left\{ D_{51}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c \right. \right. \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\rangle^c\sigma_{5234}^c \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{23}\rangle^c\sigma_{54} \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{24}\rangle^c\sigma_{53} \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{23}\rangle^c\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{24}\rangle^c\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c \\
& \left. +\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}\rangle\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{5234}\rangle^c \right] \\
& +D_{52}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1534}\rangle^c \right. \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\rangle^c\sigma_{1534}^c \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{14}\rangle^c\sigma_{53} \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{13}\rangle^c\sigma_{54} \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{14}\rangle^c\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{53}\rangle^c \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{13}\rangle^c\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{54}\rangle^c \\
& \left. +\langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}\rangle\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle^c \right] \\
& -D_{35}(q\lambda) \left[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{1254}\rangle^c \right. \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\rangle^c\sigma_{1254}^c \\
& +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{14}\rangle^c\sigma_{25} \\
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})a_{l\nu}\hat{\sigma}_{24}\rangle^c\sigma_{15} \\
& \left. +\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda})\hat{\sigma}_{14}\rangle^c\langle a_{l\nu}\hat{\sigma}_{25}\rangle^c \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \Big] \\
& -D_{45}(q\lambda) \Big[\langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \\
& + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1235}^c \\
& + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \sigma_{15} \\
& - \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \sigma_{25} \\
& + \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& - \langle (b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c \\
& + \langle b_{-q\lambda}^\dagger + b_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \Big] \Big\} \\
& + \sum_{5q\lambda} \Big\{ F_{51}(q\lambda) \Big[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{5234}^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \sigma_{54} \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \sigma_{53} \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \\
& + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{5234} \rangle^c \Big] \\
& + F_{52}(q\lambda) \Big[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1534} \rangle^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1534}^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \sigma_{53} \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \sigma_{54} \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{53} \rangle^c \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{54} \rangle^c \\
& + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \Big] \\
& - F_{35}(q\lambda) \Big[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1254}^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \sigma_{25} \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \sigma_{15} \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{14} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{24} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1254} \rangle^c \Big] \\
& - F_{45}(q\lambda) \Big[\langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \rangle^c \sigma_{1235}^c \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \sigma_{15} \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) a_{l\nu} \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \sigma_{25} \\
& + \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{23} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{15} \rangle^c \\
& - \langle (a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda}) \hat{\sigma}_{13} \rangle^c \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{25} \rangle^c \\
& + \langle a_{-q\lambda}^\dagger - a_{q\lambda} \rangle \langle a_{l\nu} \hat{\sigma}_{1235} \rangle^c \Big] \Big\} \\
& - \sum_{56} F_{56}(-l\nu) [\sigma_{1236}^c \delta_{45} - \sigma_{1246}^c \delta_{35} + \sigma_{125346}^c \\
& + \sigma_{16} \sigma_{2534}^c - \sigma_{26} \sigma_{1534}^c \\
& + \sigma_{53} \sigma_{1246}^c - \sigma_{54} \sigma_{1236}^c] \tag{C.35}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
- i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu} b_{l\nu} \rangle^c &= -(\hbar\Omega_{m\mu} + \hbar\omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu} b_{l\nu} \rangle^c \\
& - \sum_{12} [F_{12}(-m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + D_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \tag{C.36}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
- i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle^c &= (\hbar\Omega_{m\mu} - \hbar\omega_{l\nu}) \langle a_{m\mu}^\dagger b_{l\nu} \rangle^c \\
& - \sum_{12} [F_{12}(m\mu) \langle b_{l\nu} \hat{\sigma}_{12} \rangle^c + D_{12}(-l\nu) \langle a_{m\mu}^\dagger \hat{\sigma}_{12} \rangle^c] \tag{C.37}
\end{aligned}$$

C.2.3 Symmetrien in den Korrekturen

$$\langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c = -\langle c_1^\dagger c_3 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \tag{C.38}$$

$$\langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle^c = -\langle c_1^\dagger c_4 c_2^\dagger c_5 c_3^\dagger c_6 \rangle^c \tag{C.39}$$

$$\langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle^c = -\langle ac_1^\dagger c_3 c_2^\dagger c_4 \rangle^c \tag{C.40}$$

$$\langle ac_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4 c_5 c_6 \rangle^c = -\langle ac_1^\dagger c_4 c_2^\dagger c_5 c_3^\dagger c_6 \rangle^c \tag{C.41}$$

Literaturverzeichnis

- [1] S. Kuckenburg, A. Thränhardt, A. Knorr, M. Kira, F. Jahnke, and S.W. Koch, *phys. stat. sol. (a)* **178**, 409 (2000)
- [2] A. Thränhardt, S. Kuckenburg, A. Knorr, T. Meier, and S.W. Koch, *Phys. Rev. B* **62**, 2706 (2000)
- [3] A. Thränhardt, S. Kuckenburg, A. Knorr, P. Thomas, and S.W. Koch, *Phys. Rev. B* **62**, 16802 (2000)
- [4] A. Thränhardt, S. Kuckenburg, A. Knorr, and S.W. Koch, *phys. stat. sol. (b)* **221**, 227 (2000)
- [5] M. Kira, F. Jahnke, W. Hoyer, and S.W. Koch, *Quantum Theory of Spontaneous Emission and Coherent Effects in Semiconductor Microstructures*, *Progress in Quantum Electronics* **23**, 189 (1999)
- [6] A. Knorr et al., *phys. stat. sol. (b)* **206**, 139 (1998)
- [7] P. Kral, and J. Masek, *Acta Physica Polonica A* **82**, 697 (1992)
- [8] F. Steininger et al., *Phys. Rev. Letters* **77**, 550 (1996)
- [9] F. Steininger, A. Knorr, P. Thomas, S.W. Koch, *The influence of electron-phonon scattering on the spatio-temporal dynamics of electronic wavepackets in semiconductor quantum wells* *Z.Phys. B* **103**, 45, 1997
- [10] Ch. Lienau et al., *phys. stat. sol. (b)* **206**, 153 (1998)
- [11] S. Grosse et al., *phys. stat. sol. (b)* **204**, 117 (1997)
- [12] M. Vollmer et al., *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1791 (1999)
- [13] G. von Plessen and P. Thomas, *Phys. Rev. B* **45**, 9185 (1992)
- [14] J. Feldmann et al., *Phys. Rev. B* **46**, 7252 (1992)
- [15] K. Leo, *Sol. State Comm.* **84**, 943 (1992)

- [16] Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press, New York (1981)
- [17] Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, Teubner Verlag Stuttgart
- [18] A. Knorr, *Spatial Effects in the Ultrafast optics and Kinetics of Semiconductors*, Habilitationsschrift, Marburg (1997)
- [19] S. Kuckenburger, *Kohärente Propagationseffekte lokaler Anregungen in Halbleiterstrukturen*, Diplomarbeit, Marburg (1998)
- [20] H. Haug, S.W. Koch, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Hong Kong (1990)
- [21] AG Hall, J. Phys. A: Math. Gen., **8**, 214, 1975
- [22] F. Steiniger, *Theorie raum-zeitlicher Dynamik lokalisierter optischer Anregungen in Halbleitern*, Dissertation, Marburg (1997)
- [23] C. Cohen-Tannoudji, *Quantum Mechanics*, J. Wiley & Sons, New York-London-Sidney-Toronto (1977)
- [24] H. Haug, *Statistische Physik*, Vieweg, Braunschweig-Wiesbaden (1997)
- [25] H. Risken, *The Fokker-Plank Equation*, Springer-Verlag Berlin (1984)
- [26] E. Meister *Partielle Differentialgleichungen*, Akademie Verlag Berlin (1996)
- [27] Bronstein, Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik* B.G Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart, Leipzig und Verlag Nauka Moskau (1991)
- [28] G.M. Murphy *Ordinary Differential Equations and Their Solutions*, D. van Nostrand Company, Inc. Princeton, New Jersey, Toronto, London, New York (1960)
- [29] H. Heuser, *Lehrbuch der Analysis*, B.G. Teubner-Verlag Stuttgart (1993)
- [30] A. Thränhardt, *Exzitonendynamik und Sekundäremission in Halbleiterheterostrukturen – Dissertation*, Verlag: Lehrstuhl für Mikrocharakterisierung, Universität Erlangen-Nürnberg (2000)
- [31] Gradstein, Ryshik, *Tafeln*, Bd. 2, Verlag Harri Deutsch, Thun-Frankfurt (1981)

Eigene Veröffentlichungen

- A. Thränhardt, S. Kuckenburg, A. Knorr, T. Meier, and S.W. Koch,
Quantum theory of phonon-assisted exciton formation and luminescence in semiconductor quantum wells,
Phys. Rev. **B 62**, 2706 (2000)
- A. Thränhardt, S. Kuckenburg, A. Knorr, P. Thomas, and S.W. Koch,
Interplay between Coherent and Incoherent Scattering Quantum Well Secondary Emission,
Phys. Rev. **B 62**, 16802 (2000)
- A. Thränhardt, S. Kuckenburg, A. Knorr, and S.W. Koch,
Coherent and incoherent contributions to secondary emission,
phys. stat. sol. (b) **221**, 227 (2000)
- S. Kuckenburg, A. Thränhardt, A. Knorr, M. Kira, F. Jahnke, and S.W. Koch,
Many-Body Quantum Theory of Spontaneous Emission of Semiconductor Quantum Wells,
phys. stat. sol. (a) **178**, 409 (2000)
- A. Knorr, F. Steininger, H. Hanewinkel, S. Kuckenburg, P. Thomas, S.W. Koch,
Theory of Ultrafast Spatio-Temporal Dynamics in Semiconductor Quantum Wells: Electronic Wavepackets and Near-Field Optics,
phys. stat. sol. (b) **206**, 139 (1998)

Dank an ...

... alle, welche zum Entstehen dieser Arbeit beitrugen. Da wären zunächst die Mitglieder unserer Arbeitsgruppe zu nennen, welche immer für eine angenehme und entspannte Arbeitsatmosphäre sorgten, was die Arbeit wesentlich erleichterte. Insbesondere gebührt Herrn Prof. Dr. P. Thomas als Betreuer dieser Arbeit Dank. Ihm verdanke ich den Einblick in viele Aspekte der Unordnung.

Danken möchte ich ebenfalls Herrn Prof. Dr. S.W. Koch. Er sorgte in zahlreichen Diskussionen dafür, daß ich manche meiner Einfälle in der Folge noch einmal überdachte.

Ebenso möchte ich Herrn Prof. Dr. A. Knorr danken, zum einen für die Einarbeitung in dieses Gebiet und zum anderen für die Betreuung und Hilfestellungen insbesondere in den ersten beiden Jahren. Seine Kritik und Einwände waren sehr hilfreich bei der Beurteilung des eigenen Wissens und Könnens.

Von den Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe will ich besonders Dipl.-Phys. Ralf Eichmann erwähnen, der nicht zögerte, wenn ich mit meinen Extrawünschen in Sachen Parallelrechner zu ihm kam. Ebenso möchte ich hier auch Frau Dr. Angela Thränhardt nennen, mit der ich auf dem Gebiet der Sekundäremission zusammenarbeitete.

Darüber hinaus geht Dank an alle Freunde und Bekannte, welche mir vor allem in der heißen Endphase zur Seite standen.

Ein besonders großes Dankeschön gebührt natürlich meiner Familie, welche mich in jeder erdenklichen Art und Weise unterstützt und gefördert hat.