

# Mikroskopische Theorie der optischen Eigenschaften indirekter Halbleiter-Quantenfilme

von der Fakultät für Naturwissenschaften der Technischen Universität  
Chemnitz genehmigte Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium  
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt  
von Dipl.-Phys. Sebastian Imhof

geboren am 24. Januar 1984 in Marburg

eingereicht am 12.10.2011

Gutachter: Prof. Dr. Angela Thränhardt  
Prof. Dr. Hans Christian Schneider

Tag der Verteidigung: 19.12.2011



## Bibliographische Beschreibung

Sebastian Imhof, *Mikroskopische Theorie der optischen Eigenschaften indirekter Halbleiter-Quantenfilme*, Dissertation, Fakultät der Naturwissenschaften, Technische Universität Chemnitz (2011)

## Referat

Indirekte Halbleiter, wie beispielsweise Silizium, zählen bei technischen Anwendungen zu den wichtigsten halbleitenden Materialien. Die indirekte Bandstruktur führt jedoch dazu, dass diese Materialien schlechte Lichtemitter sind. Die theoretische Beschreibung der optischen Eigenschaften dieser Materialien wurde in früheren Betrachtungen über phänomenologische Ansätze verfolgt. In dieser Arbeit wird eine mikroskopische Theorie, basierend auf den Heisenberg-Bewegungsgleichungen, entwickelt, um die Prozesse im Bereich der indirekten Energielücke zu beschreiben.

Nach Herleitung der relevanten Gleichungen wird im ersten Anwendungskapitel die Absorption und optische Verstärkung im thermischen Gleichgewicht diskutiert. Bei der Diskussion wird insbesondere auf den Unterschied zu direkten Halbleitern eingegangen. Es zeigt sich, dass sich die optische Verstärkung in indirekten Halbleitern fundamental von denen in direkten unterscheidet. Im Gegensatz zum direkten Halbleiter kann die maximale optische Verstärkung eines indirekten Übergangs die maximale Absorption um Größenordnungen übertreffen.

Im zweiten Anwendungsteil werden Nichtgleichgewichtsphänomene diskutiert. Durch starke optische Anregung kann eine hohe Elektronenkonzentration am  $\Gamma$ -Punkt erzeugt werden. Da das globale Bandstrukturminimum aber am Rand der Brillouinzone liegt, verweilen die Elektronen nicht lange dort, sondern streuen in das Leitungsbandminimum. Dieser Prozess der sogenannten Intervalley-Streuung wird im Hinblick auf Gedächtniseffekte diskutiert. Nach dem Streuprozess der Elektronen besitzt das System eine Überschussenergie, die sich in einem Aufheizen der Ladungsträger zeigt. Das zweite Nichtgleichgewichtsphänomen ist das Abkühlen des Lochsystems, welches aufgrund der Trennung der Elektronen und Löcher in indirekten Halbleiter auch im Experiment getrennt untersucht werden kann. Mithilfe eines Experiment-Theorie-Vergleichs wird ein schneller Elektron-Loch-Streuprozess nachgewiesen, der dazu führt, dass in indirekten Halbleitern das Thermalisieren und Equilibrieren der Elektronen und Löcher auf der gleichen Zeitskala stattfindet.

## Schlagwörter

Mikroskopische Theorie, Indirekte Halbleiter, Germanium, Silizium, optische Eigenschaften, Halbleiter-Bloch-Gleichungen, Quantenfilme, phononassistierte Absorption, 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie, Nicht-Gleichgewichtseigenschaften, Silizium-Photonik



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2. Grundlagen</b>	<b>13</b>
2.1. Festkörper-Hamilton-Operator	13
2.1.1. Elektronischer Anteil	14
2.1.1.1. Quasizweidimensionale Quantenfilmstrukturen	16
2.1.1.2. 30-Band-k·p-Theorie für Volumenhalbleiter	18
2.1.1.3. 30-Band-k·p-Theorie für Quantenfilme	21
2.1.2. Gitteranteil und Phononen in Germanium und Silizium	23
2.1.3. Elektron-Phonon Wechselwirkung	26
2.1.3.1. Optische Deformationspotentialstreuung	27
2.1.3.2. Intervalleystreuung	28
2.2. Heisenberg-Bewegungsgleichungen	29
2.2.1. Unendliche Hierarchie und Clusterentwicklung	29
2.2.2. Halbleiter-Bloch-Gleichungen	30
2.2.3. Phononassistierte Gleichungen	36
2.2.3.1. Phononassistierte Polarisation	38
2.2.3.2. Phononassistierte Dichte	39
2.2.4. Markov-Näherung	40
2.2.5. Numerischer Aufwand	41
<b>3. Absorption und Gewinn indirekter Halbleiter</b>	<b>43</b>
3.1. Modellannahmen	44
3.2. Vereinfachtes Ratengleichungsmodell	45
3.3. Lineare Absorption im Bereich der indirekten Bandkante	48
3.3.1. Bedeutung der Zustandsdichte für die Absorption	49
3.3.2. Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung	52
3.3.3. Abhängigkeit von der Phononenergie	54
3.3.4. Temperaturabhängigkeit	55
3.3.5. Einfluss anisotroper Bandstruktur	56
3.4. Phononassistierter Gewinn	58
<b>4. Nichtgleichgewichtseigenschaften von Ge/SiGe-Quantenfilmheterostrukturen</b>	<b>63</b>
4.1. Probenstruktur und Materialparameter	63
4.2. Experimentelles Vorgehen	68
4.3. Intervalleystreuung von Elektronen	69
4.3.1. Experimenteller Nachweis von optischer Verstärkung	71
4.3.2. Markov-Näherung	72
4.3.3. Lösung unter Berücksichtigung von Gedächtniseffekten	74
4.4. Phononassistiertes Abkühlen von heißen Löchern	77
4.4.1. Experimenteller Befund	78
4.4.2. Experiment-Theorie-Vergleich	80

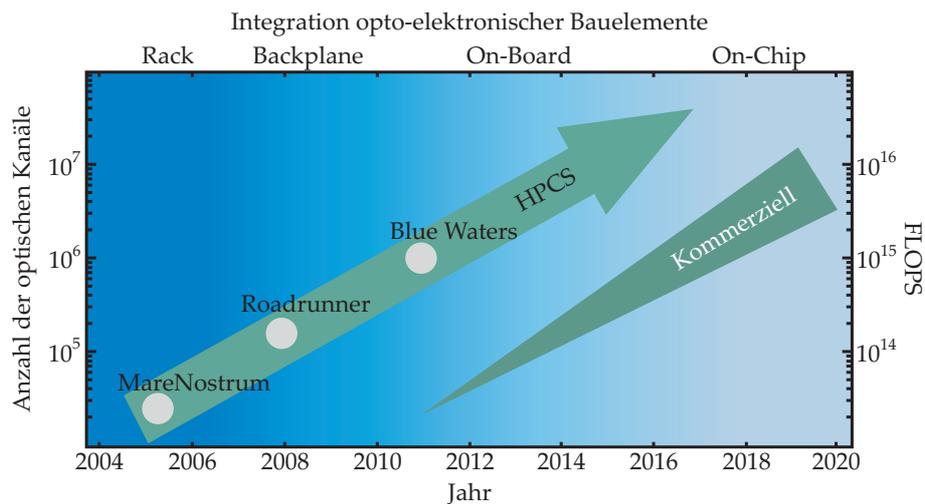
<b>5. Zusammenfassung</b>	<b>87</b>
<b>A. Rotating Wave Approximation (RWA)</b>	<b>91</b>
A.1. RWA der mikroskopischen Polarisation . . . . .	91
A.2. RWA der phononassistierten Polarisation . . . . .	92
<b>B. Materialparameter</b>	<b>95</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>97</b>

# 1. Einleitung

Luminous beings are we, not  
this crude matter!

(Yoda, *Star Wars: Episode V -  
The Empire Strikes Back*)

Silizium ist eines der wichtigsten Materialien für die Herstellung integrierter Schaltkreise. Die Entwicklung immer leistungsfähiger Computer führt dazu, dass die Gesamtleistungsfähigkeit nicht mehr durch die Taktfrequenz des Prozessors, sondern durch den Datentransfer zwischen dem Prozessor (oder den Prozessoren) und der Umgebung limitiert wird [1]. Es ist daher seit langem Ziel, elektronische und optische Bauteile auf einem Siliziumsubstrat zu einem opto-elektronischem Bauelement zu verschmelzen [2, 3]. In der Computertechnik werden schon seit längerem Informationen auf optischem Weg



**Abbildung 1.1.:** Die von IBM prognostizierte Entwicklung opto-elektronischer Bauelemente. Durch die Integration optischer Kanäle auf dem Chip selbst sollen Hochleistungsrechner bis zum Jahr 2020 eine Geschwindigkeit von  $10^{17}$  FLOPS erreichen [4].

übertragen, doch handelt es sich hierbei noch um eine geringe Anzahl von Kanälen, die die Informationen meist über größere Distanzen transportieren. Durch die Entwicklung optischer Verbindungen auf einem Chip, wodurch Informationen zwischen den verschiedenen Prozessorkernen einer CPU ausgetauscht werden sollen, erwartet man eine mögliche Rechenleistung von Hochleistungscomputerclustern (HPCS) im Bereich eines ExaFLOPS [4]. Die Entwicklung opto-elektronischer Schaltkreise und die daraus resultierende Rechengeschwindigkeit der jüngeren Vergangenheit und eine Prognose<sup>1</sup> für die nächsten Jahre von IBM ist in Abbildung 1.1 gezeigt.

<sup>1</sup>IBM beendete den Vertrag mit der Universität von Illinois über den geplanten PetaFLOP-HPC *Blue Waters* am 06. August 2011 [5]. Die Universität von Illinois gibt an, sie sei zuversichtlich, dass das Projekt dennoch rechtzeitig fertig gestellt werden könne.

Ungünstigerweise ist kristallines Silizium ein schlechter Lichtemitter, weshalb die Realisierung opto-elektronischer Bauelemente weiterhin eine Herausforderung darstellt und Gegenstand heutiger Forschung ist [6]. Dennoch konnten in kristallinem Silizium Quanteneffizienzen von über 10% nachgewiesen werden [7]. Um eine höhere Lichtausbeute siliziumbasierter Bauelemente zu erreichen, wurden verschiedene Ansätze verfolgt, wie beispielsweise über poröses Silizium [8], Si/SiO<sub>2</sub>-Heterostrukturen [9] oder nanokristallines Silizium [10]. Auch für die Entwicklung von Lasern auf Silizium gibt es eine Reihe von Ansätzen, für die optische Verstärkung nachgewiesen werden konnte, wobei man hier nicht mit elementarem Silizium auskommt, sondern sich meist auf klassische Lasermaterialien verlässt. Hierbei spielte die Verbindung von III-V-Halbleitermaterialien mit Siliziumsubstraten eine wichtige Rolle, wie beispielsweise mit den klassischen Halbleiterheterostrukturen GaInAsP [11], GaN [12] oder auch GaNAsP [13]. Daneben werden aber auch ungewöhnlichere Konzepte verfolgt, wie die Verwendung von InGaAs-Quantenpunkten [14] oder Eu dotierten GaN-Quantenfilmen [15]. Eine ausführliche Übersicht über die verschiedenen Konzepte mit Details zu den optischen Eigenschaften der Laser kann A. J. Steckl et al. [1] entnommen werden.

Die Hauptursache, warum Silizium sich nur schwer zum Emittieren von Licht bringen lässt, liegt an der indirekten Bandstruktur. Hier befinden sich Leitungsbandminimum und Valenzbandmaximum nicht bei derselben Wellenzahl des reziproken Raums. Die Emission von Licht durch die direkte Rekombination eines Elektrons aus dem Leitungsband und eines Lochs aus dem Valenzband kann aber nur stattfinden, wenn beide Teilchen dieselbe Wellenzahl besitzen<sup>2</sup>. Durch die Trennung der Ladungsträger im reziproken Raum ist dieser Übergang jedoch verboten. Neben Silizium gibt eine Reihe von Materialien, die eine indirekte Bandstruktur aufweisen. Germanium ist das zweite, für diese Arbeit wichtige, halbleitende Gruppe-IV-Element mit einer indirekten Bandstruktur. Daneben existieren noch indirekte III-V-Halbleiter wie beispielsweise AlAs oder GaP. Das Hauptaugenmerk in dieser Arbeit liegt auf den unären Materialien Germanium und Silizium, jedoch lassen sich viele der hier vorgestellten Konzepte auch auf binäre Materialien übertragen. Dies erfordert aber möglicherweise noch die Betrachtung weiterer Wechselwirkungen, da die Kristalle binärer Materialien polar sind.

Die Formulierung einer mikroskopischen Theorie für die Beschreibung der optischen Eigenschaften direkter Halbleiter hat maßgeblich sowohl zum Verständnis der physikalischen Prozesse in Halbleiter-Bauelementen als auch zu der Entwicklung neuer Materialsysteme beigetragen. Die Halbleiter-Bloch-Gleichungen ermöglichen die Beschreibung der Reaktion eines Halbleiters auf eine optische oder elektrische Anregung unter Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten im kohärenten und inkohärenten Regime [16]. Die Fähigkeit zur Vorhersage von optischen Eigenschaften, wie die optische Verstärkung, ermöglicht es, optische Bauelemente mithilfe von Simulationen zu optimieren [17–19]. Durch die Erweiterung um eine quantenmechanische Beschreibung des Lichtfelds lassen sich dann beispielsweise Effekte wie spontane Emission von Licht in Quantenpunkten [20] oder auch Einflüsse elektrischer Felder auf die Photolumineszenz in GaN-basierten Quantenfilmen [21] berechnen. Die ständige Weiterentwicklung dieser, auf den Heisenberg-Bewegungsgleichungen basierenden, Theorie ermöglicht die Beschreibung einer immer größer werdenden Zahl an Effekten in den unterschiedlichsten Materialsystemen unabhängig von der Dimensionalität der Struktur [22, 23].

---

<sup>2</sup>Bei einer klassischen Beschreibung des Lichtfelds stimmt diese Aussage exakt. In einer quantenmechanischen Beschreibung besitzt das Photon zwar einen endlichen Impuls, der aber im Vergleich zu den hier diskutierten Wellenzahlen vernachlässigbar klein ist.

Die Theorie optischer Eigenschaften von indirekten Halbleitern ist im Vergleich zu der Theorie von direkten Halbleitern noch nicht so weit fortgeschritten. Der Grund hierfür liegt daran, dass die Absorption oder Emission von Licht nicht direkt erfolgen kann, sondern dass für die Elektron-Loch-Rekombination oder Erzeugung noch ein zusätzliches Teilchen, meist ein Phonon, benötigt wird. Durch die indirekte Bandstruktur befinden sich Elektron und Loch nicht am selben Ort des reziproken Raums. Der optische Übergang kann aber nur stattfinden, wenn die Gesamtwellenzahl erhalten bleibt. Um diese Bedingung zu erfüllen, erfolgt der optische Übergang über die zusätzliche Absorption oder Emission eines Phonons. Man spricht in diesem Fall von phononassistierter Absorption bzw. Emission. Bisherige Ansätze stellten meist phänomenologische Ratenvergleichungsmodelle dar, die diesen Vielteilchenprozess als effektiven Einteilchenprozess beschreiben [24–26].

Durch die Entwicklung einer mikroskopischen Theorie für die Beschreibung der optischen Eigenschaften indirekter Halbleiter soll Aufschluss über die physikalischen Prozesse gegeben werden und verschiedene Effekte, wie beispielsweise die stimulierte phononassistierte Emission, beschrieben werden. Dabei werden die Ergebnisse mit denen aus Ratenvergleichungsmodellen oder auch Experimenten verglichen, um die Unterschiede zwischen Ein- und Vielteilchenprozessen und die Gültigkeit der Theorie zu untersuchen.

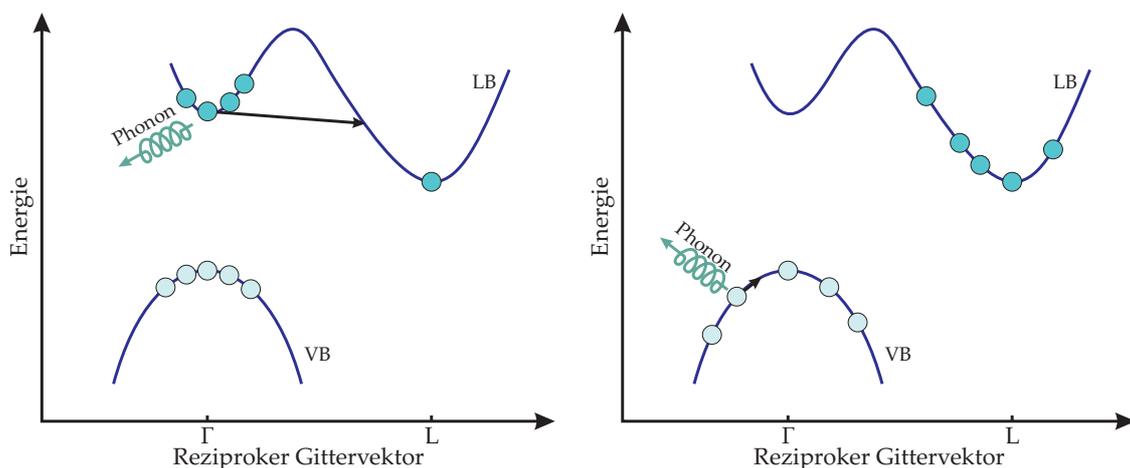
Im Kapitel 2 wird zunächst das verwendete Festkörpermodell vorgestellt, wobei im Besonderen auf die Eigenschaften von Silizium und Germanium eingegangen wird. Die Einteilchenenergien und Wellenfunktionen der elektronischen Zustände werden entweder mit einer effektiven Massetheorie oder mit einer 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie beschrieben, wobei auf die Besonderheiten von Quantenfilmheterostrukturen und auf den Einfluss von Verspannungen eingegangen wird. Die Licht-Materie-Wechselwirkung wird klassisch behandelt, wodurch Prozesse wie die Absorption oder die stimulierte Emission beschrieben werden können. Die Photolumineszenz und andere quantenelektrodynamische Prozesse, wie sie oben erwähnt wurden, sind nicht Gegenstand dieser Arbeit und bedürfen einer gesonderten Behandlung. Als Vielteilchenwechselwirkung werden die Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung behandelt.

Mithilfe des Festkörper-Hamiltonoperators werden auf der Basis der Heisenberg-Bewegungsgleichungen die Halbleiter-Bloch-Gleichungen, die die Grundlage für die Berechnung der optischen Antwort darstellen, hergeleitet. Damit auch indirekte optische Übergänge berechnet werden können, werden die phononassistierten Gleichungen, die wiederum an die Halbleiter-Bloch-Gleichungen koppeln, entwickelt. Aufgrund der Vielteilchenwechselwirkungen kann das Problem nicht exakt gelöst werden, und deshalb werden Näherungsmethoden diskutiert und die Gleichungen an geeigneter Stelle approximiert. Das Vernachlässigen von Gedächtniseffekten in der sogenannten Markov-Näherung spielt hierbei eine besondere Rolle, da sie bei der Beschreibung direkter Halbleiter häufig anwendbar ist. Trotz der Näherungen lässt sich das Gleichungssystem nicht analytisch lösen und wird stattdessen numerisch gelöst.

Der Anwendungsteil der hier vorgestellten Theorie ist in zwei Kapitel unterteilt. Im Kapitel 3 werden die optischen Eigenschaften unter der Voraussetzung eines thermischen Gleichgewichts der Ladungsträger diskutiert. Durch diese Annahme können zunächst grundlegende Einflüsse auf die indirekten optischen Übergänge untersucht werden. Es wird hierbei der Frage nachgegangen, wie stark intrinsische Parameter wie die elektronische und phononische Bandstruktur die Form und Stärke der indirekten Absorption

beeinflussen. Da in direkten Halbleitern die Coulomb-Wechselwirkung für die theoretische Beschreibung der optischen Eigenschaften von elementarer Bedeutung ist, wird der Einfluss dieses Vielteilcheneffekts auf den indirekten Übergang in einem weiteren Schritt untersucht. Zuletzt werden die Reaktionen des indirekten Materials auf extrinsische Parameter wie die Gittertemperatur und die durch externe Anregung erzeugte Ladungsträgerdichten analysiert. Hierbei zeigt sich, dass sich die stimulierte Emission der indirekten Übergänge fundamental von der des direkten Übergangs unterscheidet. In einem direkten Halbleiter kann die maximale optische Verstärkung nicht die maximale Absorption übersteigen. Bei indirekten Übergängen kann zum einen optische Verstärkung stattfinden, obwohl keine Ladungsträgerinversion vorliegt, und zum anderen kann die maximale optische Verstärkung die maximale Absorption um Größenordnungen übertreffen.

Im zweiten Anwendungsteil, im Kapitel 4, wird das Verhalten von indirekten Ge/SiGe-Quantenfilmheterostrukturen in Nichtgleichgewichtszuständen untersucht. Dafür werden zuerst die elektronischen Eigenschaften der Struktur mithilfe der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstrukturrechnung beschrieben und die zugehörigen Dipolmatrixelemente berechnet. In der ersten Nichtgleichgewichtssituation befinden sich, beispielsweise nach einer



(a) Die Elektronen im Leitungsband (LB) befinden sich nicht in ihrem globalen Minimum und streuen über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in das Tal um den  $L$ -Punkt.

(b) Durch die Überschussenergie bei der Streuung der Elektronen ins  $L$ -Tal (a) heizen sich die Ladungsträgerdichten stark auf. Durch die Emission von Phononen thermalisieren die Ladungsträger mit dem Kristallgitter.

**Abbildung 1.2.:** Mögliche Nichtgleichgewichtssituationen in einem indirekten Halbleiter mit lokalem am  $\Gamma$ - und globalem Leitungsbandminimum am  $L$ -Punkt der ersten Brillouinzone.

optischen Anregung, die Elektronen des Leitungsbandes im lokalen Minimum am  $\Gamma$ -Punkt der ersten Brillouinzone und nicht im globalen Minimum im  $L$ -Tal (siehe Abbildung 1.2 (a)). Unter Verwendung der in dieser Arbeit vorgestellten mikroskopischen Theorie lässt sich das Equilibrieren der Elektronen durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung quantitativ beschreiben. Hierbei wird im Besonderen auf den Einfluss der Gedächtniseffekte auf die Streuung der Elektronen eingegangen. Durch die Streuung der Leitungsbandelektronen in deren globales Minimum besitzen diese eine Überschussenergie, die sich als Aufheizen der Ladungsträger bemerkbar macht (s. Abbildung 1.2 (b)). Hierdurch entsteht eine zweite Nichtgleichgewichtssituation, da das Lochsyste-

tem im Valenzband jetzt eine andere Ladungsträgertemperatur besitzt als die Elektronen. Es findet hierdurch zunächst ein Thermalisieren beider Ladungsträgersysteme untereinander und in einem zweiten Schritt mit dem Gittersystem statt. Mithilfe eines Experiment-Theorie-Vergleichs wird ein schneller Energieaustausch zwischen Elektron- und Lochsystem nachgewiesen, der auf der gleichen Zeitskala wie das Equilibrieren der Elektronen stattfindet, während das Thermalisieren der Ladungsträger mit dem Gitter um Größenordnungen langsamer verläuft.



## 2. Grundlagen

Dieses Kapitel gliedert sich in zwei Teile und präsentiert die wesentlichen Gleichungen, die für die späteren Berechnungen verwendet werden. Im ersten Teil wird ein Modell zur Beschreibung von Festkörpern vorgestellt, wobei insbesondere auf die Eigenschaften der untersuchten Materialien von Germanium und Silizium eingegangen wird. Es werden die relevanten Ein- und Vielteilcheneffekte unter Verwendung des Formalismus der *zweiten Quantisierung* diskutiert. Für eine ausführlichere Diskussion und detailliertere Herleitungen des Hamilton-Operators empfehlen sich die Werke [23, 27, 28].

Der zweite Teil beschäftigt sich mit der Herleitung der benötigten Gleichungen unter Verwendung der Heisenberg-Bewegungsgleichung, welche eine effektive und für direkte Halbleiter gut erprobte Methode zur Beschreibung optischer Eigenschaften darstellt. Alternative Zugänge für die Behandlung quantenmechanischer Vielteilchenprobleme werden nicht diskutiert und können Lehrbüchern wie beispielsweise [28] entnommen werden.

### 2.1. Festkörper-Hamilton-Operator

Für die Berechnung der optischen Eigenschaften von Festkörpern müssen alle beteiligten (Quasi-)Teilchen und deren Wechselwirkungen berücksichtigt werden. Der Festkörper-Hamilton-Operator

$$H = H_e + H_p + H_{e-p}, \quad (2.1)$$

wobei  $H_e$  der elektronische Anteil,  $H_p$  der ionische Anteil und  $H_{e-p}$  die Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist, beruht auf der *Born-Oppenheimer-Näherung*. Hierbei wird angenommen, dass man das elektronische und das ionische System zunächst getrennt betrachten kann. Die Masse eines Elektrons ist in der Regel zwei bis drei Größenordnungen kleiner als die eines Atomkerns. Dies ermöglicht es den Elektronen, sich schnell auf Änderungen der Ionenpositionen einzustellen, wobei im Grenzfall sich die Elektronen in einem – durch die Ionen erzeugten – statischen Potential bewegen. Die Atomkerne selbst reagieren aufgrund ihrer Trägheit nicht auf die schnellen Bewegungen der Elektronen, welche sich auf der Zeitskala der Kernbewegung bereits im Gleichgewicht befinden. Die beiden Systeme sind nicht vollständig entkoppelt, sondern es gibt eine endliche Wechselwirkung zwischen beiden Systemen. Dies wird im Kapitel 2.1.3 über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung diskutiert.

### 2.1.1. Elektronischer Anteil

Der elektronische Anteil des Hamilton-Operators  $H_e$  ist zum einen durch die Einteilchenenergien der Elektronen und zum anderen durch deren Wechselwirkung untereinander gegeben. Gemäß der Annahme, dass sich die Ionen in ihren Gleichgewichtspunkten befinden und ein regelmäßiges Gitter bilden, welches durch eine Basis von Gittervektoren  $\mathbf{R}$  erzeugt wird, gilt für das Potential der Ionen, in dem sich die Elektronen bewegen, die Symmetriebedingung  $V_{\text{ion}}(\mathbf{R} + \mathbf{r}) = V_{\text{ion}}(\mathbf{r})$ . Für wechselwirkungsfreie Elektronen, die sich in einem solchen Potential bewegen gilt das *Bloch-Theorem*, und die Wellenfunktionen können in Form von Einteilchenwellenfunktionen

$$\psi_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{L^3}} u_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

entwickelt werden, wobei die Bloch-Funktionen  $u_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  gitterperiodisch sind, also die Bedingung  $u_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  erfüllen. Die Quantisierungslänge ist durch  $L$  gegeben. Diese Einteilchenwellenfunktionen bilden jetzt die Basis der Feldoperatoren, die über

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mu,\mathbf{k}} \psi_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) a_{\mu,\mathbf{k}} \quad (2.3a)$$

und

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mu,\mathbf{k}} \psi_{\mu,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) a_{\mu,\mathbf{k}}^\dagger \quad (2.3b)$$

definiert sind. Die Operatoren  $a_{\mu,\mathbf{k}}^\dagger$  und  $a_{\mu,\mathbf{k}}$  sind fermionische Erzeugungs- beziehungsweise Vernichtungsoperatoren, welche die fundamentalen Antikommutatorrelationen

$$\left[ a_{\mu,\mathbf{k}}^\dagger, a_{\nu,\mathbf{k}'}^\dagger \right]_+ = 0 \quad (2.4a)$$

$$\left[ a_{\mu,\mathbf{k}}, a_{\nu,\mathbf{k}'} \right]_+ = 0 \quad (2.4b)$$

$$\left[ a_{\mu,\mathbf{k}}, a_{\nu,\mathbf{k}'}^\dagger \right]_+ = \delta_{\mu,\nu} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (2.4c)$$

erfüllen, wobei der Antikommutator definiert ist als

$$[A, B]_+ = AB + BA. \quad (2.5)$$

Der wechselwirkungsfreie Einteilchenanteil des Hamiltonoperators lässt sich schreiben als

$$H_{\text{sp}}^e = \sum_{\mathbf{k},\mu} \epsilon_{\mu,\mathbf{k}} a_{\mu,\mathbf{k}}^\dagger a_{\mu,\mathbf{k}} \quad (2.6)$$

wobei die Summation über die gesamte *Brillouin-Zone* mit den reziproken Gittervektoren  $\mathbf{k}$  und alle elektronischen Bänder  $\mu$  erfolgt. Hierbei sind  $\epsilon_{\mu,\mathbf{k}}$  die Lösungen der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung eines Elektrons im statischen periodischen Potential der Ionen. Die Berechnung dieser Einteilchenenergien wird in Kapitel 2.1.1.2 diskutiert und wird zunächst als gegeben betrachtet.

Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen ist durch die *Coulomb-Wechselwirkung* gegeben, welche wir im sogenannten *Jellium-Modell* betrachten. Dieses Modell beruht auf

der Näherung, dass die positiv geladenen Ionen nicht in einem bestimmten Kristallgitter angeordnet sind, sondern als gleichmäßige positive Hintergrundladung betrachtet werden können. In erster Quantisierung ist die Coulomb-Wechselwirkung durch

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} \int d^3r d^3r' \rho_{\lambda}(\mathbf{r}) \rho_{\lambda'}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.7)$$

gegeben, wobei hier die Summation über alle Ionen ( $\lambda, \lambda' = i$ ) und alle Elektronen ( $\lambda, \lambda' = e$ ) läuft. Das Wechselwirkungspotential  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  wird zunächst als allgemeines Wechselwirkungspotential betrachtet. Die Ladungsträgerdichten der Elektronen

$$\rho_e(\mathbf{r}) = -e \sum_{\mu=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mu}) \quad (2.8a)$$

und der Ionen

$$\rho_i(\mathbf{r}) = e \frac{N}{L^3} \quad (2.8b)$$

repräsentieren die Annahme, dass die Ionen eine gleichmäßige positive Hintergrundladung erzeugen und die Elektronen als sich in diesem Feld bewegendene Punktladungen betrachtet werden können. Durch eine *Fourier-Transformation* von der Ortsdarstellung in den reziproken Raum lässt sich die Gleichung (2.7) in den Coulomb-Hamilton-Operator des Jellium-Modells

$$H_C = \frac{1}{2} V_{\mathbf{q}} (L^6 \rho_{e, -\mathbf{q}} \rho_{e, \mathbf{q}} - e^2 N) \quad (2.9)$$

unter Verwendung der fouriertransformierten Ladungsträgerdichten

$$\rho_{e, \mathbf{q}} = -\frac{e}{L^3} \sum_{\mu=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\mu}} \quad (2.10a)$$

und

$$\rho_{i, \mathbf{q}} = e \frac{N}{L^3} \delta_{\mathbf{q}, 0} \quad (2.10b)$$

umschreiben. Um diesen Operator in zweiter Quantisierung zu erhalten, müssen die Ladungsträgerdichten durch den Ladungsträgerdichteoperator

$$\rho_{e, \mathbf{q}} = -\frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{k}, \mu} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \mu} \quad (2.11)$$

ersetzt und die Kommutatorrelationen aus Gleichung (2.4) verwendet werden, wodurch man den Coulomb-Wechselwirkungs-Hamiltonoperator des Jellium-Modells in zweiter Quantisierung

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu, \nu, \mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{q} \neq 0}} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \nu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \nu} a_{\mathbf{k}, \mu} \quad (2.12)$$

erhält. Das Wechselwirkungspotential  $V_{\mathbf{q}}$ , welches im Folgenden als Coulomb-Matrix-Element bezeichnet wird, ist durch die Fouriertransformation des Potentials von der Ortsdarstellung

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^2}{r} \quad (2.13)$$

in den reziproken Raum gegeben und führt in drei Raumdimensionen auf

$$V_q^{3D} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r L^3} \frac{e^2}{q^2} \quad (2.14)$$

und in zwei Dimensionen auf

$$V_q^{2D} = \frac{1}{2\epsilon_0 \epsilon_r L^2} \frac{e^2}{q}. \quad (2.15)$$

Die Licht-Materie-Wechselwirkung wird klassisch behandelt, da das Lichtfeld als eine skalare Funktion und nicht als quantisiertes Lichtfeld verwendet wird, denn die aus der Quantisierung resultierenden Effekte, wie beispielsweise die Photolumineszenz oder auch das Phänomen von Phonon-Seitenbanden, werden in dieser Arbeit nicht betrachtet. Eine ausführliche Diskussion auf theoretischer Ebene kann der Dissertation von Th. Feldtmann [29] entnommen werden.

Semiklassisch schreibt sich der Licht-Materie-Anteil des Hamiltonoperators als

$$H_{\text{lm}} = - \sum_{i_c, j_v, \mathbf{k}} \mathcal{E}(t) \left( a_{i_c, \mathbf{k}}^\dagger a_{j_v, \mathbf{k}} d_{i_c, j_v, \mathbf{k}} + h.c. \right), \quad (2.16)$$

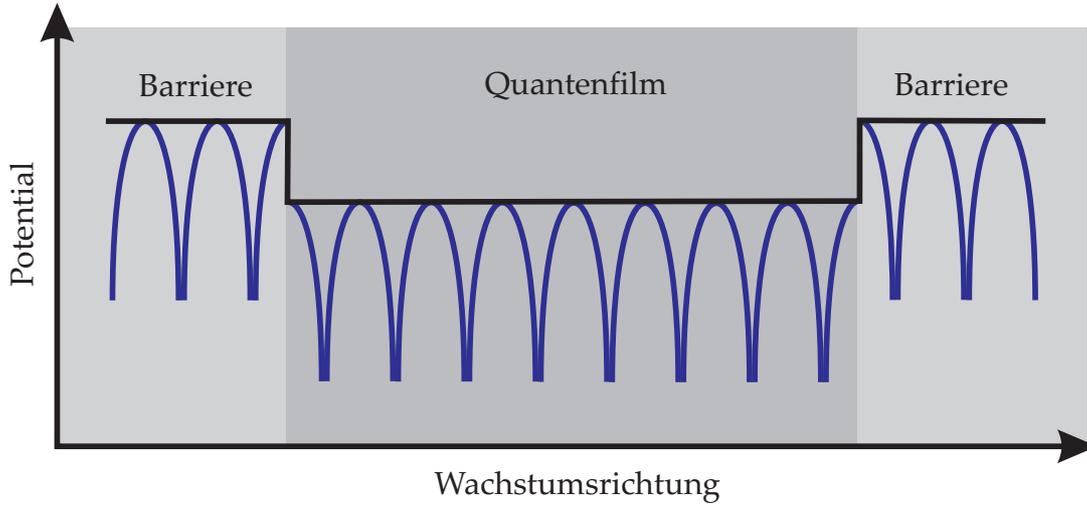
wobei  $\mathcal{E}(t)$  das klassische Lichtfeld und  $d_{i_c, j_v, \mathbf{k}}$  das Dipolmatrixelement ist. Der Index  $i_c$  summiert hier über alle Leitungs- und  $j_v$  über alle Valenzbänder. Intradbandübergänge, deren Energien sich in der Regel in Halbleitern höchstens im Bereich weniger 10 meV bewegen werden vernachlässigt.

### 2.1.1.1. Quasizweidimensionale Quantenfilmstrukturen

Im Fokus der in dieser Arbeit untersuchten Materialsysteme stehen Halbleiter-Quantenfilme, bei denen ein dünner Film eines Materials zwischen zwei Schichten eines anderen Materials eingeschlossen wird. Diese Strukturen können als mesoskopisch betrachtet werden, da der Quantenfilm zwar noch deutlich größer als die Gitterkonstante der Materialien ist, aber eben auch sehr viel kleiner als die Ausdehnung eines Volumenhalbleiters. Hieraus resultiert ein Einschluss beziehungsweise ein sogenanntes *Confinement* für die Elektronen, so dass deren Wellenfunktionen in einer Richtung quantisiert werden. Die Abbildung 2.1 zeigt das schnell variierende Kristallpotential und das vergleichsweise langsam variierende Confinement-Potential. Durch eine solche Struktur wird die Translationssymmetrie in  $r_\perp$ -Richtung gebrochen, wodurch das Bloch-Theorem nach Gleichung (2.2) modifiziert werden muss. Eine Verifizierung der Gültigkeit dieser Annahme für das Verhalten des Potentials kann den Arbeiten von M. G. Burt –beispielsweise [30]– entnommen werden. Die Einteilchen-Wellenfunktionen lassen sich jetzt als

$$\psi_{\mu, \mathbf{k}_\parallel}(\mathbf{r}_\parallel, r_\perp) = \frac{e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel}}{\sqrt{L^2}} \zeta_{\mu, \mathbf{k}_\parallel}(r_\perp) u_{\mu, \mathbf{k}_\parallel}(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

schreiben. Hierbei ist  $\zeta_{\mu, \mathbf{k}_\parallel}(r_\perp)$  die Einhüllende, beziehungsweise die sogenannte *Confinement-Wellenfunktion*. Im Folgenden wird zwischen gebundenen und ungebundenen Lösungen unterschieden. Bei den gebundenen Lösungen handelt es sich um Lösungen, die innerhalb des Quantenfilms lokalisiert sind, wohingegen die ungebundenen delokalisiert über dem gesamten Kristall sind.



**Abbildung 2.1.:** Schematische Darstellung des effektiven Potentials und des Confinement-Potentials einer mesoskopischen Quantenfilmstruktur. Die blauen Linien repräsentieren das schnell variierende Potential der Ionen innerhalb einer Einheitszelle und die schwarze Linie das langsam variierende Potential zwischen den Einheitszellen.

Im weiteren Verlauf werden ausschließlich die gebundenen Zustände betrachtet, da diese der Dimensionalitätsreduzierung ausgesetzt sind. Hierbei unterliegen die gebundenen Zustände einer Quantisierung in  $\mathbf{k}_\perp$ -Richtung, und man erhält für die Energiebänder des dreidimensionalen Halbleiters für jedes Band, welches einem Confinement-Potential unterliegt, mehrere Subbänder. Die über Gleichung (2.3) definierten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ändern sich dadurch zu

$$a_{\mu,\mathbf{k}}^\dagger \rightarrow a_{i,\mathbf{k}_\parallel}^\dagger \zeta_{i,\mathbf{k}_\parallel}^*(r_\perp), \quad (2.18a)$$

$$a_{\mu,\mathbf{k}} \rightarrow a_{i,\mathbf{k}_\parallel} \zeta_{i,\mathbf{k}_\parallel}(r_\perp), \quad (2.18b)$$

wobei  $\mu$  noch der Index des Energiebandes des Volumenmaterials und  $i$  der Subbandindex der gebundenen Lösung, der sich aus dem Bandindex  $\mu$  und dem senkrechten Anteil der Wellenzahl  $k_\parallel$  zusammensetzt, ist. Da in den bisherigen Hamilton-Operatoren keine  $\mathbf{r}_\perp$ -Abhängigkeit besteht, kann man über diese Richtung integrieren, wobei sich der Coulombanteil ändert zu

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu,\nu,\mathbf{k}_\parallel,\mathbf{k}'_\parallel \\ \mathbf{q}_\parallel \neq 0}} \gamma_{\mathbf{k}_\parallel,\mathbf{k}'_\parallel}^{\mu,\nu}(\mathbf{q}_\parallel) V_{\mathbf{q}_\parallel}^{2D} a_{\mathbf{k}_\parallel+\mathbf{q}_\parallel,\mu}^\dagger a_{\mathbf{k}'_\parallel-\mathbf{q}_\parallel,\nu}^\dagger a_{\mathbf{k}'_\parallel,\nu} a_{\mathbf{k}_\parallel,\mu} \quad (2.19)$$

mit dem Coulomb-Confinement-Faktor

$$\gamma_{\mathbf{k}_\parallel,\mathbf{k}'_\parallel}^{\mu,\nu}(\mathbf{q}_\parallel) = \int dr_\perp \int dr'_\perp \zeta_{\mu,\mathbf{k}_\parallel+\mathbf{q}_\parallel}^*(r_\perp) \zeta_{\nu,\mathbf{k}'_\parallel-\mathbf{q}_\parallel}^*(r'_\perp) \zeta_{\nu,\mathbf{k}'_\parallel}(r'_\perp) \zeta_{\mu,\mathbf{k}_\parallel}(r_\perp) e^{-\mathbf{q}_\parallel \cdot (\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp)}. \quad (2.20)$$

### 2.1.1.2. 30-Band-k-p-Theorie für Volumenhalbleiter

Die  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie ist eine Einteilchen-Theorie und wird in fast allen Lehrbüchern zur Festkörperphysik, wie zum Beispiel auch in Referenz [27] thematisiert. Die Bandstrukturechnung unter der Verwendung von 30 Bändern, wie sie in dieser Arbeit angewendet wird, ist den Arbeiten von Richard et al. [31] entnommen worden.

Es handelt sich bei dieser Methode der Bandstrukturechnung nicht um eine *ab initio* Methode, sondern man ist auf empirische Parameter angewiesen. Der Vorteil dieser Methode ist allerdings der relativ geringe numerische Aufwand bei hoher Genauigkeit.

Die stationäre Schrödingergleichung für ein Elektron in einem Potential  $V(\mathbf{r})$  ist durch

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \psi(\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

gegeben, wobei der Anteil der Spin-Bahn-Kopplung  $(\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$  vernachlässigt werden kann [32]. Ist das Potential, wie in einem Festkörper, periodisch, so gilt das Bloch-Theorem (2.2), und die Schrödinger-Gleichung lässt sich als

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\mu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mu, \mathbf{k}} \psi_{\mu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

schreiben, wobei wie bisher  $\mu$  der Bandindex und  $\mathbf{k}$  ein reziproker Gittervektor ist. Kennt man die Lösungen der Gleichung 2.22 für eine Wellenzahl  $\mathbf{k}_0$ , so kann man die Energien und Wellenfunktionen für  $\mathbf{k}$  in der Nähe von  $\mathbf{k}_0$  mithilfe der Störungstheorie näherungsweise berechnen. Das Störpotential für die Berechnung stellt dann der Term  $\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}/m$  dar, woher auch der Name  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie stammt.

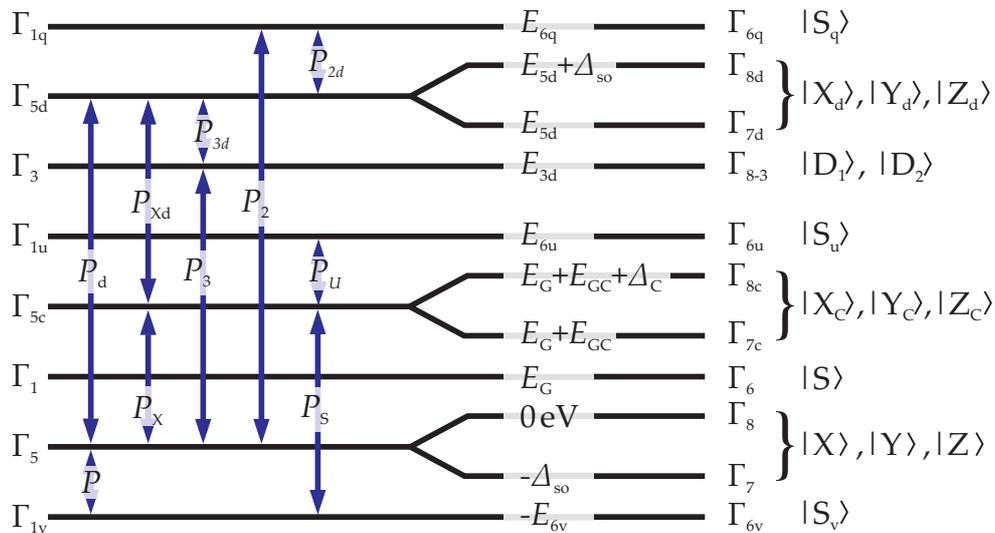
Für die Berechnung der Gleichung (2.22) muss man zunächst eine endliche Basis wählen, wobei hier meistens die Wellenfunktionen am  $\Gamma$ -Punkt, also die Lösungen der Gleichung für  $\mathbf{k} = 0$ , verwendet werden. Für die Entwicklung der Lösung am  $\Gamma$ -Punkt verwendet man häufig für die Basis sechs oder auch acht Bänder. Hierbei ist es dann notwendig, die Kopplung an energetisch höhere Bänder durch sogenannte Luttinger-Parameter zu betrachten, um die korrekte Dispersion der Bänder zu erhalten [33].

Obwohl es sich bei der  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie um eine störungstheoretische Entwicklung an einem bestimmten Punkt innerhalb der Brillouinzone handelt, lässt sich unter der Mitnahme einer genügend großen Basis die Bandstruktur innerhalb der gesamten ersten Brillouinzone reproduzieren. Dies wurde erstmalig von M. Cardona und F. Pollak unter der Mitnahme von 15 Bändern für Germanium und Silizium berechnet [34]. Hierbei wurde allerdings der Spin vernachlässigt, weshalb man die Berechnung auf 30 Bänder erweitert hat [31].

Die 15 Bänder mit der zweifachen Spinrentartung repräsentieren 15 Zustände freier Elektronen des leeren, also ungestörten Gitters des betrachteten Diamant- beziehungsweise Zinkblendekristalls. Für die Wellenfunktionen werden ebene Wellen angenommen, welche den Orten  $(2\pi/a)$  [000],  $(2\pi/a)$  [111] und  $(2\pi/a)$  [200] zugeordnet sind. Zwischen den Zuständen bei  $(2\pi/a)$  [200] und den energetisch nächst höheren liegt eine Energielücke von mehr als 15 eV, was die Vermutung nahe legt, dass die höheren Bänder keinen weiteren Einfluss auf das energetisch höchste Valenz- und niedrigste Leitungsband [31, 34] haben.

Die für die optischen Übergänge verantwortlichen Zustände sind bei Germanium und Silizium einerseits die  $p$ -artigen Wellenfunktionen der energetisch höchsten Valenzbänder  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  und  $|Z\rangle$ , welche das Schwer- und Leichtlochband mit dem am  $\Gamma$ -Punkt entarteten Energieniveau  $\Gamma_{8v}$  und das Spin-Bahn abgespaltene Band mit der Bezeichnung  $\Gamma_{7v}$  bilden. Andererseits ist bei Germanium am  $\Gamma$ -Punkt das energetisch niedrigste Zustand des Leitungsbands  $s$ -artig, wohingegen in Silizium das Leitungsbandminimum durch  $p$ -artige Zustände beschrieben wird.

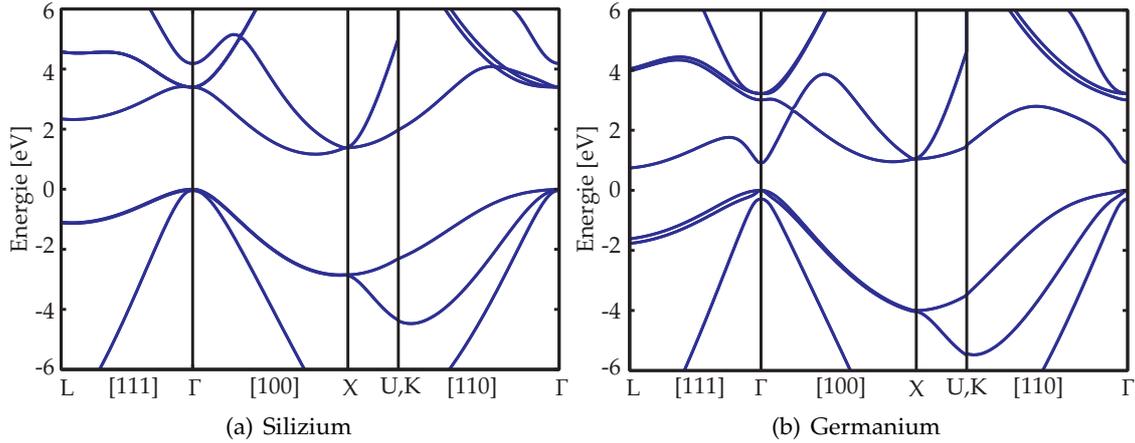
Aufgrund symmetriebedingter Auswahlregeln koppeln nicht alle 15 Zustände untereinander, statt dessen lassen sich die Bänder von Silizium und Germanium mit lediglich zehn Anpassungsparametern beschreiben. Die 30 Zustände und die zugehörigen Koppelungsparameter sind in Abbildung 2.2 gezeigt. Neben den zehn Parametern  $P_i$  für die



**Abbildung 2.2.:** Schematische Darstellung der energetischen Lage der Wellenfunktionen und die zugehörigen endlichen Kopplungsmatrixelemente bei  $\mathbf{k} = 0$  für Germanium und Silizium [31].

Kopplung zwischen den Bändern benötigt man noch die 11 Energieniveaus der 15 Zustände am  $\Gamma$ -Punkt, welche experimentell zugänglich sind. Dass man hierfür keine 15 Energieniveaus benötigt, liegt an der jeweils zweifachen Entartung der Zustände bei  $\Gamma_{8v}$ ,  $\Gamma_{8c}$ ,  $\Gamma_{8-3}$  und  $\Gamma_{8d}$ . Die Spin-Bahn-Kopplung hat bei diesen Zuständen – abgesehen von  $\Gamma_{8-3}$  – die dreifache Entartung der  $p$ -artigen Zustände bereits aufgehoben. Alle für die Berechnung der Bandstruktur benötigten Parameter sind im Anhang B angegeben. Es wird an dieser Stelle darauf verzichtet, die gesamte  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix anzugeben. Stattdessen kann sie in der gleichen Basis, wie sie in dieser Arbeit verwendet wurde, der Referenz [35] entnommen werden.

Es lassen sich nun die Banddiagramme von Silizium und Germanium mithilfe der hier vorgestellten  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie berechnen, welche in den Abbildungen 2.3 in verschiedenen Richtungen innerhalb der ersten Brillouinzone gezeigt sind. Die Symmetriepunkte hierbei sind  $\Gamma$  bei  $\mathbf{k} = (2.0\pi/a_{lc})[000]$ ,  $L$  bei  $\mathbf{k} = (2.0\pi/a_{lc})[111]$ ,  $X$  bei  $\mathbf{k} = (2.0\pi/a_{lc})[100]$ ,  $U$  bei  $\mathbf{k} = (2.0\pi/a_{lc})[1^{1/4}1^{1/4}]$  und  $K$  bei  $\mathbf{k} = (2.0\pi/a_{lc})[0^{3/4}4^{3/4}]$ . Die Bandstruktur der beiden Materialien lässt sich über die gesamte erste Brillouinzone berechnen, und die Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit alternativen Bandstrukturrechnungen [31, 36, 37].



**Abbildung 2.3.:** Berechnete Banddiagramme von Silizium (a) und Germanium (b) unter Verwendung der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie bei  $T = 0$  K.

Um die Temperaturabhängigkeit der Bandstruktur zu erhalten, wird die phänomenologische Beschreibung von Y. P. Varshni [38] verwendet. Die Abhängigkeit der Bandlücke ist demnach über

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (2.23)$$

mit den empirischen Parametern  $\alpha$  und  $\beta$  gegeben.

Für die Berechnung von Verbundhalbleitern wie  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  werden die Energieniveaus und die Kopplungsparameter meist linear interpoliert. Die Gitterkonstante einer solchen Verbindung verläuft nicht linear, sondern folgt

$$a_{\text{lc}}(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}) = 0.5431 + 0.01992(1-x) + 0.0002733(1-x)^2, \quad (2.24)$$

wobei die Gitterkonstante in [nm] angegeben ist [39]. Es zeigt sich außerdem eine nicht lineare Abhängigkeit der folgenden Energieniveaus und Kopplungskonstanten [40]:

$$\Gamma_{8c} : \quad 3.4 \text{ eV} - 0.59 \text{ eV}(1-x) + 0.4 \text{ eV}(1-x)^2, \quad (2.25a)$$

$$\Gamma_{7c} : \quad 3.4 \text{ eV} - 0.79 \text{ eV}(1-x) + 0.4 \text{ eV}(1-x)^2 \quad (2.25b)$$

und

$$E_{\text{Pd}} : \quad 1.193 \text{ eV}(1-x)^{2.5} + 0.005122 \text{ eV}(1-x)^{2.5}. \quad (2.25c)$$

Das epitaktische Wachstum von Halbleiterheterostrukturen führt in der Regel zu Verspannungen innerhalb der Kristalle, was ein Ändern der Energieniveaus verursacht. Für biaxiale Verspannung, also in der [001]-Richtung, besitzt der Verspannungstensor drei von Null verschiedene Elemente, welche durch

$$\epsilon_{xx} = \frac{a_{\text{lc}} - a_{\text{subs}}}{a_{\text{subs}}} = \epsilon_{\parallel}, \quad (2.26a)$$

$$\epsilon_{yy} = \frac{a_{\text{lc}} - a_{\text{subs}}}{a_{\text{subs}}} = \epsilon_{\parallel} \quad (2.26b)$$

und

$$\epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{\parallel} = \epsilon_{\perp} \quad (2.26c)$$

gegeben sind, wobei  $C_{11}$  und  $C_{12}$  die elastischen Konstanten und  $a_{1c}$  die Gitterkonstante des verspannten Materials und  $a_{\text{subs}}$  die Gitterkonstante des Substrats sind.

Der sogenannte Bir-Pikus Hamiltonoperator [41] ist für die Leitungsbandzustände  $\Gamma_{8c}$  und  $\Gamma_{7c}$  und für die Valenzbandzustände  $\Gamma_{8v}$  und  $\Gamma_{7v}$  (siehe Abbildung 2.2) durch

$$H_{\text{st}}^{v,c} = \begin{pmatrix} a_{\Gamma_{v,c}}\epsilon + b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{\Gamma_{v,c}}\epsilon - b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 & 0 & -\sqrt{2}b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 \\ 0 & 0 & a_{\Gamma_{v,c}}\epsilon - b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 & 0 & \sqrt{2}b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' \\ 0 & 0 & 0 & a_{\Gamma_{v,c}}\epsilon + b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 & 0 & a_{\Gamma_{v,c}}\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}b_{\Gamma_{v,c}}\epsilon' & 0 & 0 & a_{\Gamma_{v,c}}\epsilon \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

mit den Abkürzungen  $\epsilon = 2\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}$ ,  $\epsilon' = \epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}$  und den Deformationspotentialen  $a_{\Gamma_{v,c}}$  und  $b_{\Gamma_{v,c}}$  gegeben [42]. Die Basis des Verspannungshamiltonoperators ist  $|3/2, +3/2\rangle_{v,c}$ ,  $|1/2, +1/2\rangle_{v,c}$ ,  $|1/2, -1/2\rangle_{v,c}$ ,  $|3/2, -3/2\rangle_{v,c}$ ,  $|7/2, +7/2\rangle_{v,c}$  und  $|7/2, -7/2\rangle_{v,c}$ . Einen weiteren Einfluss hat die Verspannung auf die  $s$ -artigen Bänder  $\Gamma_{1c}$  und  $\Gamma_{1v}$ . Der zugehörige Bir-Pikus-Hamiltonoperator ist diagonal und lautet

$$H_{\text{st}}^{1v,c} = \begin{pmatrix} c_{\Gamma_{v,c}}\epsilon & 0 \\ 0 & c_{\Gamma_{v,c}}\epsilon \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Alle Parameter, die die Verspannung betreffen, sind ebenfalls Anhang B zu entnehmen. Für die anderen Bänder treten entweder keine Verspannungen auf oder können aufgrund ihres energetischen Abstands zur Bandlücke vernachlässigt werden [42].

### 2.1.1.3. 30-Band-k-p-Theorie für Quantenfilme

Wie bereits weiter oben schon erwähnt, führt das heteroepitaktische Wachstum von Halbleiterschichtsystemen zu einem Confinementpotential und somit zu gebundenen Zuständen innerhalb des Quantenfilms. Im Folgenden wird die Erweiterung der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie auf die Berechnung von Quantenfilmheterostrukturen nach Richard et al. [43] vorgestellt. Ein alternativer Zugang zu einer Multiband-Rechnung basierend auf einer Pseudopotentialmethode ist in Referenz [44] gezeigt.

Die gebundenen Zustände lassen sich im einfachsten Fall innerhalb eines Modelles mit effektiven Massen beschreiben. Dabei  $v$  betrachtet man ein Elektron innerhalb eines Potentialtopfs und löst die zugehörige Schrödingergleichung. Die Kopplung der Bänder untereinander führt in dieser Näherung lediglich zu einer Reduktion der Elektronmasse auf eine effektive Masse. Hierdurch lassen sich für Germanium noch die Leitungsbandzustände am  $\Gamma$ -Punkt relativ gut reproduzieren, allerdings erhält man für die Lochzustände bereits unphysikalische Banddispersionen. Für Silizium lässt sich dieses Modell gar nicht auf Strukturen reduzierter Dimensionalität anwenden [45, 46].

Die Form der Valenzbänder um den  $\Gamma$ -Punkt lässt sich bereits unter der Verwendung einer Sechsband  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung modellieren, womit man die Absorption des direkten Übergangs reproduzieren kann [47]. Für die in dieser Arbeit betrachteten Prozesse ist allerdings die Bandstruktur über die gesamte Brillouinzone notwendig, weshalb hier der Ansatz von 30 Bändern verfolgt wird.

Wir betrachten wieder eine Quantenfilm-Barriere-Struktur, wie sie in Abbildung 2.1 gezeigt ist. Der Ansatz für die Wellenfunktionen innerhalb des Quantenfilms  $\psi^Q$  und innerhalb der Barriere  $\psi^B$  ist durch

$$\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}^{\text{Q,B}}(\mathbf{r}_{\parallel}, r_{\perp}) = \sum_l \frac{e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}}{\sqrt{L^2}} \zeta_{l, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}^{\text{Q,B}}(r_{\perp}) u_{l, \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

gegeben, wobei die Summe über alle Bänder des Volumenmaterials läuft [48]. Die Wellenfunktionen müssen an den Rändern stetig differenzierbar, sein und für die Blochfunktionen gilt weiterhin

$$\langle u_{l, \mathbf{k}_0} | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle = \delta_{l, m}. \quad (2.30)$$

Aufgrund der weiteren  $\mathbf{r}_{\perp}$ -abhängigkeit der Wellenfunktionen ändert sich die Gleichung 2.22 für die Confinementfunktionen, indem alle  $\mathbf{k}_{\perp}$ -Terme durch  $-\text{id}/\text{d}r_{\perp}$  ersetzt werden, zu

$$\left[ \left( V(r_{\perp}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\text{d}^2}{\text{d}r_{\perp}^2} \right) \langle u_{l, \mathbf{k}_0} | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle + \frac{\hbar \mathbf{k}_{\parallel}}{m} \cdot \langle u_{l, \mathbf{k}_0} | \mathbf{p}_{\parallel} | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle - \frac{i\hbar}{m} \langle u_{l, \mathbf{k}_0} | p_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle \frac{\text{d}}{\text{d}r_{\perp}} \right] \zeta_{m, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}(r_{\perp}) = \epsilon_{m, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}} \zeta_{m, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}(r_{\perp}). \quad (2.31)$$

Hierbei ist der in  $\mathbf{p}_{\parallel}$  quadratische Term mit dem Potential  $V(\mathbf{r}_{\perp})$  zusammen gefasst. Die Gleichung (2.31) gilt nur für den Teil der Matrix oberhalb der Diagonalen. Der untere Teil entspricht dabei dem komplex konjugierten. Damit die Matrix bei der komplexen Konjugation hermitesch bleibt, was zur Vermeidung von Geisterlösungen notwendig ist [49], muss der in  $\text{d}/\text{d}r_{\perp}$  lineare Term durch

$$\begin{aligned} & \langle u_{l, \mathbf{k}_0} | p_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle \frac{\text{d}}{\text{d}r_{\perp}} \\ & \rightarrow \frac{1}{2} \left( \langle u_{l, \mathbf{k}_0} | p_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle \frac{\text{d}}{\text{d}r_{\perp}} + \frac{\text{d}}{\text{d}r_{\perp}} \langle u_{l, \mathbf{k}_0} | p_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) | u_{m, \mathbf{k}_0} \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.32)$$

ersetzt werden [50].

Die Gleichung (2.31) soll nun in einem Intervall  $[0, A]$ , wobei  $A$  größer als die Quantenfilmdicke  $d$  ist, gelöst werden. Dabei werden die Wellenfunktionen  $\zeta_{m, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}(r_{\perp})$  in einer Basis von Testfunktionen nach der Vorschrift

$$\zeta_{m, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}(r_{\perp}) = \sum_j a_{m, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp}}^j \varphi_j(r_{\perp}) \quad (2.33)$$

entwickelt. Richard et al. [43] fordern für die Basisfunktionen die Randbedingungen

$$\varphi_j(0) = \varphi_j(A) = 0, \quad (2.34)$$

was zu einer Basis aus Sinusfunktionen führt. In dieser Arbeit werden periodische Randbedingungen

$$\varphi_j(0) = \varphi_j(A) \quad (2.35)$$

gefordert, wodurch sich die Basisfunktionen

$$\varphi_j(r_{\perp}) = \frac{1}{\sqrt{A}} \exp(ik_{\perp, 0} r_{\perp}) \exp\left(i \frac{2j\pi r_{\perp}}{A}\right) \quad (2.36)$$

ergeben. Für die numerische Lösung läuft bei der Mitnahme von  $2N + 1$  Basisfunktionen der Index  $j$  über

$$j = -N, -N + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, N - 1, N. \quad (2.37)$$

Um eine möglichst geringe Anzahl an Basisfunktionen zu verwenden, damit der numerische Aufwand gering bleibt, entwickelt man die Wellenfunktionen an den unterschiedlichen Orten in der Brillouinzone den jeweiligen Umständen angepasst. Am  $\Gamma$ -Punkt gilt dann für die Basis  $k_{\perp,0} = 0$ . Für das Leitungsbandminimum in Silizium, welches sich im  $\Delta$ -Tal befindet, setzt man  $k_{\perp,0} = 0.85 (2\pi/a_{lc})$  und für das Leitungsbandminimum in Germanium am  $L$ -Punkt auf  $k_{\perp,0} = 1.0 (2\pi/a_{lc})$ . Dies reduziert die Anzahl der Basisfunktionen enorm, da man bereits Funktionen mit großer Wellenzahl für die Entwicklung der Zustände verwendet. Man erhält eine diskrete Anzahl von Lösungen für die Wellenzahl  $k_{\perp}$ , die im Folgenden als Subbandindex bezeichnet wird.

Mithilfe der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie können auch die Dipolmatrixelemente der Licht-Materie-Wechselwirkung (2.16)  $d_{i_c, j_v, \mathbf{k}}$  berechnen. Es gilt

$$d_{i_c, j_v, \mathbf{k}} = \langle \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, i_c} | e\mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}'_{\parallel}, j_v} \rangle = \frac{ie}{m_0 (\epsilon_{i_c, \mathbf{k}_{\parallel}} - \epsilon_{j_v, \mathbf{k}'_{\parallel}})} \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}} \langle \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, i_c} | \mathbf{p} | \psi_{\mathbf{k}'_{\parallel}, j_v} \rangle, \quad (2.38)$$

wobei  $i_c$  und  $j_v$  die Subbandindices bezeichnen [23]. Durch die Gleichung (2.38) wird ein Zusammenhang zwischen den Dipol- und den Kopplungsmatrixelementen aus der  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie hergestellt. Das auftretende Integral

$$\langle \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, i_c} | \mathbf{p} | \psi_{\mathbf{k}'_{\parallel}, j_v} \rangle = \sum_{l, l'} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} (\zeta_{l, \mathbf{k}_{\parallel}, i_c}(r_{\perp}) u_{l, \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}))^* \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}'_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \zeta_{l', \mathbf{k}'_{\parallel}, j_v}(r_{\perp}) u_{l', \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.39)$$

lässt sich lösen, indem man das Integral in ein Summe über alle Einheitszellen und ein Integral über die Einheitszelle überführt und dabei ausnutzt, dass sich die Confinementwellenfunktionen nur geringfügig innerhalb einer Einheitszelle ändert. Dadurch vereinfacht sich das Integral in

$$\langle \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, i_c} | \mathbf{p} | \psi_{\mathbf{k}'_{\parallel}, j_v} \rangle = \sum_{l, l'} \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}} \int d\mathbf{r}_{\perp} \zeta_{l, \mathbf{k}_{\parallel}, i_c}(r_{\perp}) (\delta_{l, l'} \hbar \mathbf{k}_{\parallel} + \langle u_l | \mathbf{p} | u_{l'} \rangle) \zeta_{l', \mathbf{k}'_{\parallel}, j_v}(r_{\perp}). \quad (2.40)$$

Die Berechnung der Dipolmatrixelemente hängt jetzt nur noch von den Confinementwellenfunktionen und den Kopplungsparametern, die aus der Volumenrechnung bekannt sind, ab.

### 2.1.2. Gitteranteil und Phononen in Germanium und Silizium

Bisher haben wir uns auf den Anteil der Elektronen im Hamilton-Operator konzentriert. Einen weiteren wichtigen Beitrag stellt das System der Ionen dar. Die Behandlung des Gittersystems ist Referenz [28] entnommen worden. Genau wie für die Elektronen nehmen wir für die Ionen an, dass sich diese in einem periodischen Gitter befinden, welches – um Randeffekte zu vernachlässigen – durch periodische Randbedingungen geschlossen wird. Der Hamilton-Operator des Ionen-Systems hat die Gestalt

$$H_p = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2M_i} + V_{\text{eff}}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots), \quad (2.41)$$

wobei  $M_i$  die Massen,  $\mathbf{P}_i$  die Impulse und  $\mathbf{R}_i$  die Positionen der Ionen repräsentieren. Das effektive Potential  $V_{\text{eff}}$  stellt das Potential, welches sich aus den Atomkernen und den stark an diese Kerne gebundenen Elektronen bildet, dar. Zunächst vernachlässigen wir bei der Betrachtung des Potentials den Anteil, der durch die schwach gebundenen Elektronen verursacht wird, da dieser Beitrag in Kapitel 2.1.3 über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung diskutiert wird.

Das effektive Potential der Ionen hängt dann nur noch von den Abständen der Ionen ab und lässt sich schreiben als

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots) = \sum_{ij} V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j). \quad (2.42)$$

Im weiteren Verlauf kann angenommen werden, dass sich die Atomkerne nur um kleine Auslenkungen um ihre Gleichgewichtslage bewegen. Das Potential lässt sich dann für geringe Auslenkungen aus der Ruhelage entwickeln, wofür zunächst

$$\mathbf{R}_i := \mathbf{R}_i^{(0)} + \mathbf{Q}_i, \quad (2.43)$$

definiert wird, wobei  $\mathbf{R}_i^{(0)}$  die Gleichgewichtslage des  $i$ -ten Ions und  $\mathbf{Q}_i$  dessen Abweichung von der Ruhelage bezeichnet. Für die Taylorreihe des effektiven Potentials gilt dann

$$\begin{aligned} V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = & V(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}) + (\mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_j) \cdot \nabla V(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} (\mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_j)_\mu (\mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_j)_\nu \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_\mu \partial \mathbf{R}_\nu} V(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}) + \dots \end{aligned} \quad (2.44)$$

Der lineare Term der Reihenentwicklung verschwindet, da in den Gleichgewichtspositionen  $\mathbf{R}_i^{(0)}$  die Summe über alle Kräfte auf das  $i$ te Ion verschwindet. Die Ordnungen in kubischer und höherer Ordnung in  $\mathbf{Q}_i$  werden vernachlässigt. Mit Hilfe der Entwicklung für die Verschiebung aus der Ruhelage

$$\mathbf{Q}_i(t) = i \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{L}N\Omega_{\mathbf{k}, \lambda}}} \boldsymbol{\varsigma}_{\mathbf{k}, \lambda} \left( b_{\lambda, \mathbf{k}} e^{-i\Omega_{\mathbf{k}, \lambda} t} + b_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger e^{i\Omega_{\mathbf{k}, \lambda} t} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^{(0)}} \quad (2.45)$$

unter Verwendung der bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $b_{\lambda, \mathbf{k}}$  und  $b_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger$  und des Polarisationsvektors  $\boldsymbol{\varsigma}_{\mathbf{k}, \lambda}$  mit der Eigenschaft  $\boldsymbol{\varsigma}_{\mathbf{k}, \lambda}^* = -\boldsymbol{\varsigma}_{-\mathbf{k}, \lambda}$  erhält man den Hamiltonoperator des Ionensystems in zweiter Quantisierung

$$H_{\text{p}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \Omega_{\mathbf{k}, \lambda} \left( b_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger b_{\lambda, \mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.46)$$

Die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren genügen den Kommutatorbedingungen

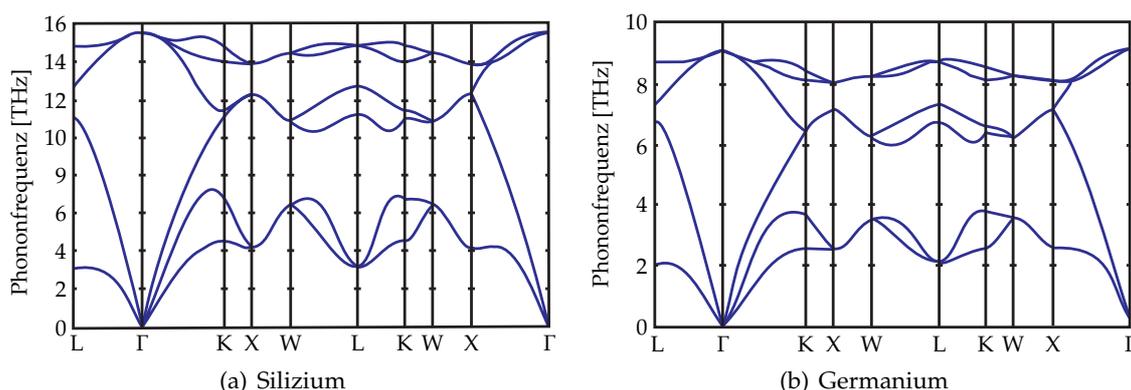
$$[b_{\mu, \mathbf{k}'}^\dagger, b_{\nu, \mathbf{k}'}^\dagger] = 0, \quad (2.47a)$$

$$[b_{\mu, \mathbf{k}}, b_{\nu, \mathbf{k}'}] = 0 \quad \text{und} \quad (2.47b)$$

$$[b_{\mu, \mathbf{k}}, b_{\nu, \mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mu, \nu} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (2.47c)$$

Die im Gitteranteil des Hamiltonoperators (2.1.2) auftretenden Eigenwerte  $\Omega_{\mathbf{k},\lambda}$  sind die  $\mathbf{k}$ - und bandabhängigen Frequenzen der Gitterschwingungen des Kristalls. Bei einem dreidimensionalen Gitter mit  $N$ -atomiger Einheitszelle findet man  $3N$  Phononzweige, die in drei akustische und  $3N - 3$  optische Phononen unterteilt werden. Akustische Phononen entsprechen Schwingungen, bei denen die Ionen innerhalb einer Einheitszelle gleichphasig verlaufen. Bei optischen Phononen hingegen verlaufen die Schwingungen der Ionen gegenphasig. Daher existieren, unabhängig von der Anzahl der Atome pro Einheitszelle, stets drei akustische Phononen in einem dreidimensionalen Gitter. Des Weiteren unterscheidet man die Phononzweige noch in transversale und longitudinale Moden, je nachdem ob die Verschiebung der Atome parallel (longitudinal) oder senkrecht (transversal) zur Ausbreitungsrichtung des Phonons ist.

Die Dispersion der Phononmoden ist sowohl experimentell als auch theoretisch zugänglich. Experimentell lassen sich die Phonondispersionen über der gesamten Brillouinzone beispielsweise mittels Neutronenstreuung bestimmen [51]. Berechnen lassen sich die Phononspektren mithilfe von *ab initio*-Methoden für die es eine ganze Reihe an Ansätzen gibt. Eine Übersicht dieser Methoden kann Lehrbüchern zur Festkörper- oder auch Halbleiterphysik entnommen werden und wird in dieser Arbeit nicht näher dargelegt.



**Abbildung 2.4.:** Berechneten Phonondispersionen von Silizium (a) und Germanium (b) für verschiedene Richtungen in der ersten Brillouinzone nach den Ergebnissen von S. Wei und M. Y. Chou [52].

Für die in dieser Arbeit untersuchten indirekten Halbleiter Silizium und Germanium sind die von S. Wei und M. Y. Chou in Referenz [52] berechneten Phonondispersionen in Abbildung 2.4 gezeigt. Die jeweils energetisch niedrigsten Phononmoden, welche am  $\Gamma$ -Punkt keine endliche Energien besitzen, sind die akustischen Phononen. Die anderen Zweige repräsentieren die optischen Phononen, welche sich über der gesamten ersten Brillouinzone für Silizium zwischen 12 und 16 THz und für Germanium zwischen 6 und 9 THz bewegen. In dieser Arbeit sind, wie in Kapitel 2.1.3 noch diskutiert wird, nur die longitudinal-optischen Phononen relevant. Für diese sind in der Abbildung 2.4 die flachen Dispersionen der optischen Phononen zu erkennen. Dies rechtfertigt die im Folgenden verwendete Näherung, die Energieabhängigkeit der longitudinal-optischen Phononen zu vernachlässigen und die Energie stattdessen als unabhängig vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  zu betrachten.

### 2.1.3. Elektron-Phonon Wechselwirkung

Im Kapitel 2.1.2 wurde für das Potential der Ionen ausschließlich der ionische Anteil diskutiert. Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ionen besitzt die Form

$$H_{e-p} = \sum_{ij} V_{e-p}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.48)$$

wobei  $\mathbf{R}_j$  wieder die Position der Ionen und  $\mathbf{r}_i$  die Position der Elektronen bezeichnet. Für die Ionen wird erneut angenommen, dass diese sich nur gering von ihrer Gleichgewichtsposition weg bewegen. Dadurch lassen sich die Positionen wieder, wie durch Gleichung (2.43) definiert, in ihre Gleichgewichtsposition  $\mathbf{R}_j^{(0)}$  plus die Abweichung aus der Ruhelage  $\mathbf{Q}_j$  zerlegen. Das Potential entwickelt man um den Bereich kleiner Abweichungen aus der Ruhelage  $\mathbf{Q}_j$  und es gilt

$$V_{e-p}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) = V_{e-p}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)}) - \mathbf{Q}_j \cdot \nabla V_{e-p}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)}) + \dots, \quad (2.49)$$

wobei im Folgenden alle quadratischen und höheren Ordnungen in  $\mathbf{Q}_j$  vernachlässigt werden. Der konstante Term entspricht gerade dem periodischen Potential, in dem sich die Elektronen, welches wir für die Rechtfertigung des Blochtheorems (2.2) verwendet haben, befinden. Unter der Annahme, dass das Potential eine Fouriertransformation

$$V_{e-p}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{\mathbf{q}} V_{e-p}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.50)$$

besitzt, kann, unter der Verwendung von der Entwicklung für Änderungen von der Ruhelage  $\mathbf{Q}_i(t)$  nach Gleichung 2.45 und der anschließenden Integration

$$H_{e-p} = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) V_{e-p}(\mathbf{r}), \quad (2.51)$$

mit der Ladungsdichte  $\rho(\mathbf{r})$  des Systems, die Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$H_{e-p} = \sum_{\substack{\mu, \mathbf{k} \\ \lambda, \mathbf{q}, \mathbf{G}}} M_{\lambda, \mathbf{q} + \mathbf{G}}^{\mu} a_{\mu, \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}}^{\dagger} a_{\mu, \mathbf{k}} (b_{\lambda, \mathbf{q}} + b_{\lambda, -\mathbf{q}}^{\dagger}) \quad (2.52)$$

berechnet werden. Das Elektron-Phonon-Matrixelement ist durch

$$M_{\lambda, \mathbf{q} + \mathbf{G}}^{\mu} = -V_{e-p}^{\mu}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) (\mathbf{q} + \mathbf{G}) \cdot \boldsymbol{\varsigma}_{\mathbf{q}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\mathcal{V}\Omega_{\lambda, \mathbf{q}}}} \quad (2.53)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet  $\rho$  die Dichte und  $\mathcal{V}$  das Volumen der Einheitszelle. Der Vektor  $\mathbf{G}$  bezeichnet in diesem Zusammenhang einen reziproken Gittervektor.

In Quantenfilmheterostrukturen taucht aufgrund des Confinements auch in der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ein Confinementfaktor auf. Das Matrixelement  $M_{\lambda, \mathbf{q} + \mathbf{G}}^{\mu}$  muss dazu mit

$$\gamma_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu, \nu}(\mathbf{q}_{\perp}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{L}_p}} \int d r_{\perp} \tilde{\zeta}_{\mu, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^*(r_{\perp}) e^{i\mathbf{q}_{\perp} r_{\perp}} \tilde{\zeta}_{\nu, \mathbf{k}_{\parallel}}(r_{\perp}) \quad (2.54)$$

multipliziert werden. Die Kohärenzlänge eines Phonons  $\mathcal{L}_p$  liegt in Silizium und Germanium in Bereich von einigen 100 nm. Allerdings existieren für die Kohärenzlängen in der Regel nicht sehr exakten Werte, da sie schwer zugänglich ist und stark von der Qualität des Materials abhängen [51]. Die Aussagen, die in dieser Arbeit über das Phononmatrixelement getroffen werden sind daher nicht als absolute Werte zu verstehen, sondern stehen immer in Verbindung mit der, als konstant angenommen, Kohärenzlänge von 100 nm.

Es existiert eine Reihe von Möglichkeiten, wie Elektronen mit Phononen wechselwirken können, je nach Kristall und Phononzweig. Die Wechselwirkung mit optischen Phononen ist in der Regel stärker oder auch deutlich schneller als die mit akustischen Phononen, weshalb die Kopplung zwischen Elektronen und akustischen Phononen in dieser Arbeit vernachlässigt wird. Zwar sind in den Absorptionsspektren von Germanium und Silizium im Bereich der indirekten Bandlücke auch die Übergänge mit akustischen Phononen zu erkennen, doch sind sie für die im Kapitel 3 getroffenen Aussagen zunächst irrelevant und können daher vernachlässigt werden. Für die Eigenschaften von Nichtgleichgewichtszuständen, wie sie in Kapitel 4 diskutiert werden, spielen die akustischen Phononen eine untergeordnete Rolle, da deren Kopplung auf einer Nano- und nicht wie bei den optischen Phononen auf einer (Sub-)Pikosekundenzeitskala erfolgt.

Für die Wechselwirkung der Elektronen mit optischen Phononen unterscheidet man zunächst drei Arten. Die Fröhlich-Kopplung tritt in polaren Kristallen auf, da hier durch ein optisches Phonon die Position zweier Ionen unterschiedlicher Ladung innerhalb einer Einheitszelle geändert wird. Durch die Verschiebung der Ionen kommt es zu einer Änderung des elektrischen Feldes, in dem sich die Elektronen bewegen. Für die in dieser Arbeit betrachteten Halbleiterverbindungen spielt diese Wechselwirkung keine Rolle, da Silizium- und Germaniumkristalle unpolar sind. Für eine Erweiterung der hier vorgestellten Theorie beispielsweise auf den ebenfalls indirekten Halbleiter GaP muss diese Form der Kopplung allerdings betrachtet werden.

Die zweite Art der Wechselwirkung ist die *Deformationspotential-Streuung*, die in Kapitel 2.1.3.1, und die dritte die *Intervalley-Streuung*, die in Kapitel 2.1.3.2 diskutiert wird. Zwar stellt die Intervalley-Streuung ebenfalls eine Deformationspotentialstreuung dar, doch wird sie meist gesondert behandelt.

### 2.1.3.1. Optische Deformationspotentialstreuung

Ein optisches Phonon bedeutet, dass innerhalb einer Einheitszelle sich die Position der Ionen relativ zu einander verschieben, ohne dass dabei eine makroskopische Verspannung des Kristalls entsteht. Die Verschiebung der Ionen führt lediglich zu einer Änderung der Bindungslängen zwischen den Atomen innerhalb der Einheitszelle, wodurch sich das Kristallpotential für die Elektronen ändert [51].

Für Kristalle in der Zinkblendestruktur kann dann das Matrixelement als

$$M_{\text{opt},\mathbf{q}}^{\mu} = \pm i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\mathcal{V}\Omega_{\text{opt},\mathbf{q}}}} \frac{M_1 + M_2}{\sqrt{M_1 M_2}} \frac{d_{\text{opt}}^{\mu}}{a_{\text{lc}}} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{q},\text{opt}}}{|\mathbf{q}|} \quad (2.55)$$

geschrieben werden [29], wobei diese Betrachtung nur für eine Streuung mit Phononen gilt, für die der resultierende Gesamtimpuls noch innerhalb der ersten Brillouinzone liegt. Die Massen der beiden Atome der Einheitszelle werden mit  $M_1$  und  $M_2$

bezeichnet, wobei für die Massen bei unären Halbleiterverbindungen wie Germanium und Silizium  $M_1 = M_2$  gilt. Die Deformationspotentialkonstante  $d_{\text{opt}}^{\mu}$  ist sehr stark vom Bandindex  $\mu$  abhängig. In direkten Halbleitern ist die Wechselwirkung von  $s$ -artigen Leitungsbandelektronen mit optischen Phononen aus Symmetriegründen verboten [51]. In indirekten Halbleiterverbindungen ist die Situation komplizierter, da sich der Charakter des energetisch niedrigsten Leitungsbands innerhalb der ersten Brillouinzone ändert. Dies führt auf verschiedene Auswahlregeln für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung mit Leitungsbandelektronen, die im Folgenden als Intervalleystreuung bezeichnet wird. Sie wird im Kapitel 2.1.3.2 diskutiert.

Da die Symmetrieeigenschaften des energetisch höchsten Valenzbandes über der gesamten ersten Brillouinzone gleich bleiben, ist das Verhalten der Wechselwirkung  $p$ -artiger Löcher und optischen Phononen einfacher zu beschreiben. Die Konstante der optischen Elektron-Phonon-Wechselwirkung  $d_{\text{opt}}^{\text{vb}}$  ist in der Größenordnung einiger 10 meV. Auf experimentellen Weg lässt sich diese Konstante über *Raman-Streuung* [53, 54] bestimmen. Weiteren Zugang erhält man durch die Messung temperaturabhängiger Lochbeweglichkeiten [51] oder auch direkt mithilfe spektroskopischer Messungen [55]. Theoretische Bestimmungen des Deformationspotentials erfolgen über Pseudopotentialmethoden und liefern ähnliche Werte wie die experimentellen Ergebnisse [56].

### 2.1.3.2. Intervalleystreuung

Die Intervalleystreuung bezeichnet die Wechselwirkung optischer Phononen mit Leitungsbandelektronen, wenn sich die Symmetrie des Leitungsbandes innerhalb der ersten Brillouinzone ändert. Dies führt dazu, dass Elektronen zwischen verschiedenen Tälern mit einem großem Impulsaustausch gestreut werden können. Bestimmen lassen sich die Intervalley-Deformationspotentiale wieder auf experimentellen Weg, wie beispielsweise in Germanium durch die Messung des druckabhängigen direkten Exzitons [57] oder auf theoretischem Weg entweder über die Modellierung von Ladungsträgertransport mithilfe von Monte-Carlo-Methoden [58, 59] oder aber auch wieder über Pseudopotentialmethoden [60, 61].

	Deformationspotential [eV/Å]				
	$\Gamma L$	$\Gamma X$	$LL$	$LX$	$XX$
Ge	4.88	4.78	5.26	4.65	3.78
Si	-	-	2.63	2.34	2.26

**Tabelle 2.1.:** Intervalley-Deformationspotentiale für Silizium und Germanium der Elektron-Phonon-Wechselwirkung für Streuung in verschiedene Richtungen innerhalb der ersten Brillouinzone. Die Werte wurden der Referenz [58] entnommen.

Aufgrund der Vielzahl der Methoden zu experimentellen und theoretischen Bestimmung der Intervalley-Deformationspotentiale existiert eine Reihe von Werten, welche in der Regel in dem Bereich der Werte aus Tabelle 2.1 liegen. Entscheidend für die Diskussion der Ergebnisse ist zunächst, dass eine Wechselwirkung zwischen  $\Gamma$ -Punkt-Elektronen und optischen Phononen für Silizium aus Symmetriegründen verboten ist, wohingegen im Germanium eine Streuung der Elektronen zwischen allen Symmetriepunkten der ersten Brillouinzone mittels optischer Phononen erlaubt ist. Abgesehen von

dieser Abhängigkeit ist die Intervalleystreuung von der Richtung im reziproken Raum vergleichsweise gering. Der Unterschied zwischen Germanium und Silizium lässt sich anhand der Bandstruktur (vergl. Abbildung 2.3) verstehen. Das energetisch niedrigste Leitungsband am  $\Gamma$ -Punkt ist in Silizium das  $p$ -artige  $\Gamma_{7c}$ - und in Germanium das  $s$ -artige  $\Gamma_6$ -Band. Am  $X$ -Punkt hingegen ist das energetisch niedrigste Leitungsband hingegen in beiden Fällen das  $\Gamma_{7c}$ -Band.

## 2.2. Heisenberg-Bewegungsgleichungen

Der Zugang zu den optischen Eigenschaften wird über die *Heisenberg-Bewegungsgleichung* ermöglicht [23]. Betrachtet man eine nicht explizit zeitabhängige Observable  $\mathcal{O}$ , so ist ihre erste zeitliche Ableitung gegeben durch

$$\frac{d\mathcal{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathcal{O}], \quad (2.56)$$

wobei  $H$  wieder der Hamiltonoperator des zu untersuchenden Systems ist. Für eine Diskussion physikalisch messbarer Größen müssen die Erwartungswerte der Observable  $\langle \mathcal{O} \rangle$  betrachtet werden, und die Heisenberg-Bewegungsgleichung schreibt sich als

$$\frac{d\langle \mathcal{O} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathcal{O}] \rangle. \quad (2.57)$$

Für die weiteren Betrachtungen sind nun die mikroskopische Polarisation  $p_{ic,j,\mathbf{k}} = \langle a_{j,\mathbf{k}}^\dagger a_{i,\mathbf{k}} \rangle$  und die Besetzungszahlen der Einteilchenzustände  $n_{ic,\mathbf{k}} = \langle a_{i,\mathbf{k}}^\dagger a_{i,\mathbf{k}} \rangle$  der Leitungs- bzw. der  $n_{iv,\mathbf{k}} = \langle a_{i,\mathbf{k}}^\dagger a_{i,\mathbf{k}} \rangle$  Valenzsubbänder die zu untersuchenden Erwartungswerte, die allerdings auch an Erwartungswerte höherer Korrelationsordnungen koppeln können. Hierbei sind Größen gemeint, die selbst nicht direkt und unabhängig messbar sind, aber an die beobachteten Größen koppeln.

### 2.2.1. Unendliche Hierarchie und Clusterentwicklung

Das Betrachten von Vielteilchenwechselwirkungen im Hamilton-Operator, in unserem Fall die Coulomb- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung, führt beim Aufstellen der Heisenberg-Bewegungsgleichung (2.57) zu einem Problem unendlicher Hierarchie. Es soll der Erwartungswert eines Operators  $\langle \mathcal{A}_n \rangle$  berechnet werden, wobei der Operator über

$$\mathcal{A}_n = a_1^\dagger \dots a_n^\dagger a_n \dots a_1 \quad (2.58)$$

oder auch über

$$\mathcal{A}_n = a_1^\dagger \dots a_{n-m}^\dagger a_{n-m} \dots a_1 b_1^{(+)} \dots b_m^{(+)} \quad (2.59)$$

gegeben ist. Wie bisher bezeichnen auch hier  $a_1^\dagger$  und  $a_1$  fermionische und  $b_1^\dagger$  und  $b_1$  bosonische Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren. Der Operator  $\mathcal{A}_n$  ist somit ein  $n$ -Teilchenoperator, und dessen Erwartungswert führt auf eine  $n$ -Teilchenkorrelation. Stellt man jetzt die Bewegungsgleichung für diesen Operator mit Hilfe von (2.57) auf, so lässt sich diese Gleichung schreiben als

$$\frac{d\langle \mathcal{A}_n \rangle}{dt} = T(\langle \mathcal{A}_n \rangle) + V(\langle \mathcal{A}_{n+1} \rangle), \quad (2.60)$$

wobei  $T$  und  $V$  Funktionen sind, die ausschließlich von  $n$ -Teilchenkorrelationen bzw. von  $(n + 1)$ -Teilchenkorrelationen abhängen. Es führt außerdem bei der Berechnung des Kommutators der Einteilchenanteil des Hamiltonoperators auf  $T$  und der Vielteilchenanteil auf  $V$ . Entscheidend bei dieser Betrachtung ist, dass für die Berechnung von  $\langle \mathcal{A}_n \rangle$  bereits eine Korrelation höherer Ordnung bekannt sein muss, nämlich  $\langle \mathcal{A}_{n+1} \rangle$ . Dies erfordert aber das erneute Aufstellen der Bewegungsgleichung, wobei erneut eine Abhängigkeit von einer Korrelation höherer Ordnung bekannt sein muss. Da sich dies bis zur Gesamtzahl der Teilchen im System, also näherungsweise bis Unendlich, so weiter führen ließe, ist dieses Problem als unendliches Hierarchieproblem bekannt.

Das unendliche Hierarchieproblem ist letztlich nur eine andere Formulierung für ein Vielteilchenproblem, wie man es auch aus der klassischen Mechanik oder dem Zugang über *Green*-Funktionen her kennt. Die Gemeinsamkeit aller Formulierungen ist, dass sich diese Probleme nicht exakt lösen lassen, sondern nur in unterschiedlichen Näherungen betrachtet werden können.

Für den konkreten Zugang über die Heisenberg-Bewegungsgleichung hat sich in den vergangenen Jahren die Cluster-Entwicklung etabliert [22]. Diese Näherungsmethode beruht auf der Tatsache, dass sich der Erwartungswert einer vollen  $n$ -Teilchenkorrelation zerlegen lässt in Korrelationen geringerer Ordnung und einen Term, der die echte  $n$ -Teilchenkorrelation beinhaltet. Der Erwartungswert des Operators  $\mathcal{A}_n$  kann als

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_n \rangle &= \langle \mathcal{A}_n \rangle_S + \langle \mathcal{A}_{n-2} \rangle_S \delta \langle \mathcal{A}_2 \rangle + \langle \mathcal{A}_{n-4} \rangle_S \delta \langle \mathcal{A}_2 \rangle \delta \langle \mathcal{A}_2 \rangle + \dots \\ &+ \langle \mathcal{A}_{n-3} \rangle_S \delta \langle \mathcal{A}_3 \rangle + \langle \mathcal{A}_{n-5} \rangle_S \delta \langle \mathcal{A}_3 \rangle \delta \langle \mathcal{A}_2 \rangle + \dots \\ &+ \langle \mathcal{A}_1 \rangle \delta \langle \mathcal{A}_{n-1} \rangle + \delta \langle \mathcal{A}_n \rangle \end{aligned} \quad (2.61)$$

geschrieben werden, wobei  $\langle \mathcal{A}_n \rangle_S$  über das Produkt aller möglichen Einteilchenerwartungswerte gegeben ist.

Für die Berechnung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen in Kapitel 2.2.2 wird in dieser Arbeit die Coulomb-Wechselwirkung auf der Ebene der Singlet-Faktorisierung behandelt, welche äquivalent zur *Hartree-Fock*-Näherung ist. Dies bedeutet explizit, dass bei auftretenden Zweiteilchenerwartungswerten die echte Zweiteilchenkorrelation  $\delta \langle \mathcal{A}_2 \rangle$  vernachlässigt wird und dass für den Zweiteilchenerwartungswert folgt:

$$\langle a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_\nu a_\mu \rangle \approx \langle a_\mu^\dagger a_\mu \rangle \langle a_\nu^\dagger a_\nu \rangle - \langle a_\mu^\dagger a_\nu \rangle \langle a_\nu^\dagger a_\mu \rangle. \quad (2.62)$$

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird auf der Ebene der Singlet-Doublet-Näherung behandelt, und auftretende Dreiteilchenerwartungswerte werden unter Vernachlässigung von echten Dreiteilchenkorrelationen  $\delta \langle \mathcal{A}_3 \rangle$  berechnet. Da die Anzahl der auftretenden Terme sehr schnell mit der Teilchenanzahl steigt, wird an dieser Stelle auf ein explizites Nennen aller Terme verzichtet. Die konkrete Anwendung der Singlet-Doublet-Näherungen wird bei der Berechnung der phononassistierten Gleichungen in Kapitel 2.2.3 gezeigt.

## 2.2.2. Halbleiter-Bloch-Gleichungen

Die Halbleiter-Bloch-Gleichungen bilden die Basis für die Berechnung der optischen Eigenschaften von Halbleiter-Materialien. Sie lassen sich für Volumen-, Quantenfilm-, Quantendraht- und Quantenpunktsysteme formulieren und anwenden und haben im

Bereich der direkten Halbleiter mittlerweile Vorhersagekraft erreicht [62–64]. Sie stellen ein Set von gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit für die mikroskopischen Polarisationen  $p_{icjv,\mathbf{k}}$  und für die Ladungsträgerbesetzungen der Einteilchenzustände  $n_{i,\mathbf{k}}$ . Wie bereits im Kapitel 2.1.1.1 angemerkt, werden in dieser Arbeit quasizweidimensionale Halbleiterheterostrukturen betrachtet, was zu einer Quantisierung der Wellenzahl  $k_{\parallel}$  und einer modifizierten Bandstruktur führt. Daher ist aber jetzt eine strikte Unterscheidung zwischen einem Wellenvektor innerhalb der  $k_x$ - $k_y$ -Ebene und einem senkrecht dazu ausgerichteten Vektor zu beachten. Für die weitere Betrachtung bezeichnet  $\mathbf{k}_{\parallel}$  einen zweidimensionalen Vektor innerhalb der  $k_x$ - $k_y$ -Ebene und  $k_{\parallel}$  die Wellenzahl in die dazu senkrechte Richtung.

Für die Herleitung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen wird die Heisenberg-Bewegungsgleichung (2.57) mit dem Festkörperhamiltonoperator aus Gleichung (2.1) für die mikroskopische Polarisation

$$p_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}} = \left\langle a_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}}^{\dagger} a_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} \right\rangle \quad (2.63)$$

und für die Ladungsträgerdichten

$$n_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} = \left\langle a_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}}^{\dagger} a_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} \right\rangle \quad (2.64)$$

im Leitungsband bzw.

$$n_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}} = \left\langle a_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}}^{\dagger} a_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}} \right\rangle \quad (2.65)$$

im Valenzband berechnet. Bei der mikroskopischen Polarisation wird bereits durch die Indices  $i_c$  und  $j_v$  angedeutet, dass in dieser Arbeit nur Interband- und keine Intra-bandpolarisationen betrachtet werden. Das Ausblenden von Intra-bandübergängen ist durch die jeweiligen Energien gerechtfertigt. Energien für optische Interbandübergänge in Halbleiterquantenfilmen liegen im eV-Bereich, wohingegen Intra-bandübergänge im Bereich von 1...10 meV liegen, die nicht in dem betrachteten Energiebereich liegen.

Die Halbleiter-Bloch-Gleichungen lauten:

$$\frac{dp_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left( e_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} - e_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}} \right) p_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}} - \frac{i}{\hbar} \left( n_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} - n_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}} \right) \Omega_{ic,jv,\mathbf{k}_{\parallel}} + \left. \frac{dp_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr}} \quad (2.66)$$

$$\frac{dn_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[ \sum_{\mu_v} p_{ic\mu_v,\mathbf{k}_{\parallel}} \Omega_{ic\mu_v,\mathbf{k}_{\parallel}} \right] + \left. \frac{dn_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr}} \quad (2.67)$$

$$\frac{dn_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[ \sum_{\mu_c} p_{\mu_c jv,\mathbf{k}_{\parallel}} \Omega_{\mu_c jv,\mathbf{k}_{\parallel}} \right] + \left. \frac{dn_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr}} \quad (2.68)$$

Durch die Coulomb-Wechselwirkung treten hier nicht mehr die Einteilchenenergien aus Gleichung (2.6) auf, sondern renormierte Energien, die durch

$$e_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} = \epsilon_{ic,\mathbf{k}_{\parallel}} - \sum_{\mathbf{q}_{\parallel} \neq \mathbf{k}_{\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel},\mathbf{k}_{\parallel}}^{i_c i_c} V_{|\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel}|} n_{ic,\mathbf{q}_{\parallel}} \quad (2.69)$$

bzw.

$$e_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}} = \epsilon_{jv,\mathbf{k}_{\parallel}} - \sum_{\mathbf{q}_{\parallel} \neq \mathbf{k}_{\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel},\mathbf{k}_{\parallel}}^{j_v j_v} V_{|\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel}|} n_{jv,\mathbf{q}_{\parallel}} \quad (2.70)$$

gegeben sind. Neben den Energien tritt hier des Weiteren noch das klassische Lichtfeld innerhalb der renormierten *Rabifrequenz*

$$\Omega_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}} = d_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{ivjc} \mathcal{E}(t) + \sum_{\mathbf{q}_{\parallel} \neq \mathbf{k}_{\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel},\mathbf{k}_{\parallel}}^{icjv} V_{|\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel}|} p_{icjv,\mathbf{q}_{\parallel}}, \quad (2.71)$$

auf. Die Korrelationsterme in den Halbleiter-Bloch-Gleichungen werden durch die Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung hervorgerufen und lassen sich somit in zwei Summanden durch

$$\left. \frac{dp_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr}} = \left. \frac{dp_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr, e-e}} + \left. \frac{dp_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr, e-p}} \quad (2.72)$$

zerlegen. Gleiches gilt für die Korrelationsterme bei den Ladungsträgerdichten. Wie bereits in Kapitel 2.2.1 erwähnt, wird die Coulomb-Wechselwirkung auf dem Hartree-Fock-Level behandelt, was zu den Renormierungstermen (2.69)–(2.71) führt. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung führt allerdings auch zu einem Dephasieren der Polarisation, welches sich erst unter Verwendung der Singlet-Doublet-Approximation berechnen lässt. Es wird daher ein phänomenologisches Dephasieren über eine sogenannte  $T_2$ -Zeit eingeführt, und der Korrelationsterm folgt als

$$\left. \frac{dp_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr, e-e}} = -\frac{p_{icjv,\mathbf{k}_{\parallel}}}{T_2}. \quad (2.73)$$

In Bezug auf die Ladungsträgerdichten führt die Elektron-Elektron-Streuung dazu, dass sich die Dichten thermischen Gleichgewichtsverteilungen sogenannten Fermifunktionen anpassen. Hierfür gibt es nun zwei Möglichkeiten, das Problem der Coulomb-Wechselwirkung zu behandeln, wobei in späteren Kapiteln beide Konzepte zum Einsatz kommen werden. Bei der ersten Variante wird die gesamte Dynamik der Ladungsträgerdichten vernachlässigt und die Verteilungsfunktionen mit Fermifunktionen bei der gegebenen Temperatur  $T$  und Ladungsträgerdichte  $N$  mit

$$n_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} - \mu(N,T)}{k_B T}\right) + 1} =: f_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} \quad (2.74)$$

genähert. Hierbei ist  $\mu$  das *chemische Potential* und  $k_B$  der *Boltzmannfaktor*. Diese Näherung ist gültig, solange das klassische Lichtfeld nicht zu einer signifikanten Änderung der Ladungsträgerdichten führt und nach einer ausreichend langen Zeit nach Anregung des Halbleiters erfolgt. In der Regel sind die Elektron-Elektron-Streuzeiten im Bereich von fünfzig bis einigen hundert Femtosekunden, sodass diese Annahme bei vielen Experimenten gerechtfertigt ist [65]. Für das Betrachten von Nichtgleichgewichtseigenschaften ist es aber notwendig, die Dynamik der Ladungsträgerverteilungen zu betrachten [66, 67]. Da der Fokus dieser Arbeit auf der Elektron-Phonon-Wechselwirkung liegt, genügt es auch hier, das Anpassen der Ladungsträgerverteilungen an die jeweiligen Gleichgewichtsverteilungen phänomenologisch einzuführen. Der Coulombanteil des Korrelationsterms lässt sich schreiben als

$$\left. \frac{dn_{i,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr, e-e}} = \frac{f_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} - n_{i,\mathbf{k}_{\parallel}}}{T_1}, \quad (2.75)$$

wobei  $T_1$  die Streuzzeit und  $f_{i,\mathbf{k}}$  die zugehörige Gleichgewichtsverteilung ist, für die die Ladungsträgererhaltung

$$\sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} f_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} n_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} \quad (2.76)$$

und die Energieerhaltung

$$\sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \epsilon_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} f_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \epsilon_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} n_{i,\mathbf{k}_{\parallel}} \quad (2.77)$$

gilt. Die Summen laufen hier unter Umständen auch über verschiedene Subbänder. Entscheidend ist, dass es sich nur um eine Gleichgewichtsfunktion am lokalen Extremum handelt, da die Streuung zwischen den verschiedenen Tälern der Bandstruktur durch die Intervalleystreuung verursacht wird.

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird auf Ebene der Singlet-Doublet-Näherung behandelt. Der Korrelationsterm für Änderungen der Polarisation lautet

$$\begin{aligned} \left. \frac{dp_{i_{c}j_v,\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr, e-p}} &= \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v,\mathbf{q}_{\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel},\mathbf{k}_{\parallel}}^{\mu_v j_v} \hbar g_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v j_v} \left( F_{i_c\mu_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^- + F_{i_c\mu_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ \right) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_c,\mathbf{q}_{\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_c \nu_c} \hbar g_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_c \nu_c} \left( G_{\nu_c j_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^- + G_{\nu_c j_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ \right) \end{aligned} \quad (2.78)$$

mit den Zweiteilchenkorrelationen

$$F_{i_c j_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^- = \left\langle a_{j_v,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{i_c,\mathbf{k}_{\parallel}} b_{\mathbf{q}_{\parallel}} \right\rangle, \quad (2.79a)$$

$$F_{i_c j_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ = \left\langle a_{j_v,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{i_c,\mathbf{k}_{\parallel}} b_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} \right\rangle, \quad (2.79b)$$

$$G_{i_c j_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^- = \left\langle a_{j_v,\mathbf{k}_{\parallel}}^{\dagger} a_{i_c,\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel}} b_{\mathbf{q}_{\parallel}} \right\rangle \quad (2.79c)$$

und

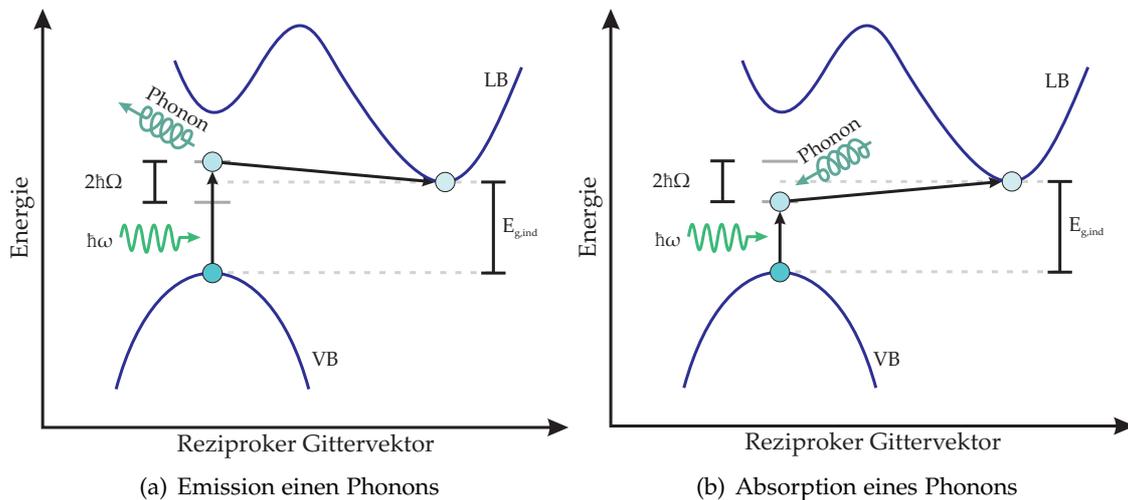
$$G_{i_c j_v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ = \left\langle a_{j_v,\mathbf{k}_{\parallel}}^{\dagger} a_{i_c,\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{q}_{\parallel}} b_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} \right\rangle, \quad (2.79d)$$

die im Folgenden als phononassistierte Polarisationen bezeichnet werden. Erst die Mitnahme dieser Korrelationen ermöglicht die Absorption an indirekten Bandlücken, da die Impulserhaltung bei der Erzeugung eines Elektrons im Valenzband mit der Wellenzahl  $\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}$  und der Vernichtung eines Elektrons im Leitungsband bei  $\mathbf{k}_{\parallel}$  ein weiteres Teilchen – in diesem Fall ein Phonon – benötigt. Die Herleitung und Berechnung der phononassistenten Absorption wird im Kapitel 2.2.3 gezeigt.

Man spricht hier von Absorption über einen *virtuellen Zustand*, da beispielsweise ein Elektron im Valenzband nicht von einem Photon mit der Energie der indirekten Bandlücke in das Leitungsband bei gleichem  $\mathbf{k}$  angeregt werden kann, weil es bei dieser Energie keinen erlaubten realen Zustand gibt. Vereinfacht kann man sich vorstellen, dass das Elektron auf einen virtuellen Zustand im Bereich der indirekten Bandlücke angeregt wird und von dort über die Streuung mit einem Phonon in einen erlaubten Zustand gestreut wird. Dieser virtuelle Zustand besitzt die Eigenschaften des realen Leitungsbandzustandes bei gleichem  $\mathbf{k}$ , was sich unter anderem durch die Dipol- und Phononmatrixelemente bemerkbar macht.

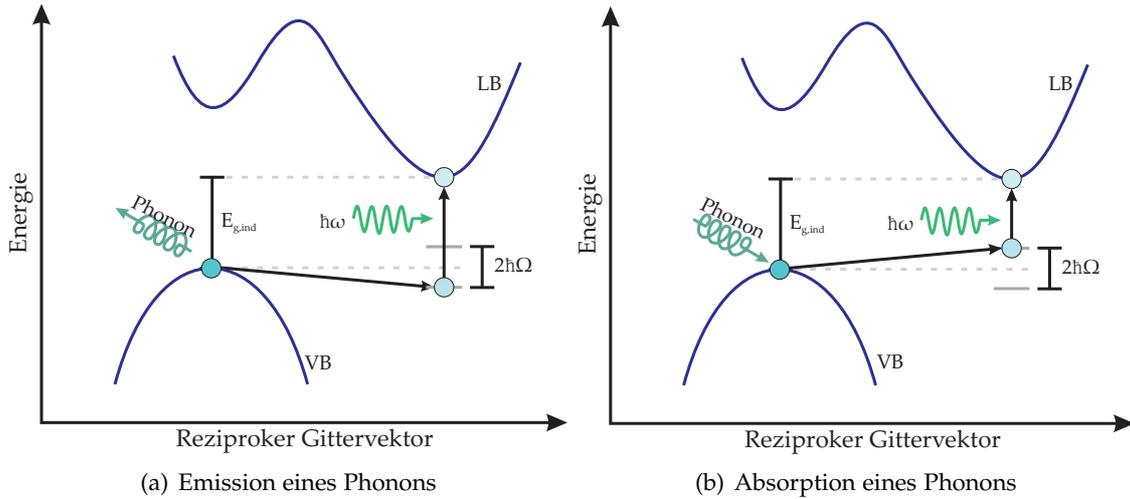
Insgesamt gibt es vier mögliche phononassistierte Absorptionsprozesse, welche schematisch in den Abbildungen 2.5 und 2.6, jeweils (a) und (b), dargestellt sind. Das Elektron

soll aus dem Maximum des Valenzbands (VB) über die Absorption eines Photons ( $\hbar\omega$ ) in das globale Minimum des Leitungsbandes (LB) angeregt werden. Die Energiedifferenz der beiden Zustände ist über die indirekte Bandlücke  $E_{g,\text{ind}}$  gegeben. Aufgrund der Impulserhaltung kann das Elektron nicht direkt in das Leitungsbandminimum angeregt werden, sondern muss entweder über einen virtuellen Zustand des Leitungsbandes (Abbildung 2.5) oder des Valenzbandes (Abbildung 2.6) erfolgen. Im ersten Fall wird das Elektron am  $\Gamma$ -Punkt durch die Absorption eines Photons auf einen virtuellen Leitungsbandzustand mit der Energie  $E_{g,\text{ind}} - \hbar\Omega_{LO}$  (a) oder  $E_{g,\text{ind}} + \hbar\Omega_{LO}$  (b) angeregt und dann durch die Emission (a) oder Absorption (b) eines Phonons zum Minimum des Leitungsbandes gestreut. Da die Streuung des Elektrons innerhalb des Leitungsbandes stattfindet, ist dieser Prozess über die Wechselwirkung von Leitungsbandelektronen mit Phononen bestimmt und wird durch die Größen  $G_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  beschrieben. Im zweiten Fall erfolgt die Absorption des Photons aus einem virtuellen Valenzbandzustands in das Leitungsbandminimum (Abbildung 2.6). Auch hier treten wieder die beiden möglichen Prozesse – Emission (a) und Absorption (b) eines Phonons – auf, wobei die Wechselwirkung von Valenzbandelektronen mit Phononen die Stärke dieses Prozesses bestimmt. Die zugehörigen Größen werden mit  $F_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  bezeichnet. Unabhängig davon, ob die



**Abbildung 2.5.:** Schematische Darstellung der phononassistierten Absorption über einen virtuellen Leitungsbandzustand unter der Emission (a) oder Absorption (b) eines Phonons.

Absorption über einen virtuellen Leitungs- oder Valenzbandzustand erfolgt, und unter Vernachlässigung von Coulombbedingten Renormierungen muss das Photon im Falle der Emission eines Phonons mindestens die Energie  $\hbar\omega = E_{g,\text{ind}} + \hbar\Omega$  und im Falle der Absorption eines Phonons mindestens  $\hbar\omega = E_{g,\text{ind}} - \hbar\Omega$  aufbringen. Dies führt dazu, dass die Übergänge nicht nach ihren virtuellen Zuständen im Absorptionsspektrum unterschieden werden können. Es können jedoch durch Auswahlregeln der Elektron-Phonon-Wechselwirkung möglicherweise Prozesse ausgeschlossen werden.



**Abbildung 2.6.:** Schematische Darstellung der phononassistierten Absorption über einen virtuellen Valenzbandzustand unter der Emission (a) oder Absorption (b) eines Phonons.

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung führt auch zu Änderungen der Ladungsträgerverteilungen und hat die Form

$$\left. \frac{dn_{i_\lambda, \mathbf{k}_\parallel}}{dt} \right|_{\text{corr, e-p}} = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_\lambda, \mathbf{q}_\parallel} \gamma_{\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{q}_\parallel, \mathbf{k}_\parallel}^{\mu_\lambda i_\lambda} \hbar g_{\mathbf{q}_\parallel}^{\mu_\lambda i_\lambda} \left( F_{i_\lambda \mu_\lambda, \mathbf{k}_\parallel, \mathbf{q}_\parallel}^- + F_{i_\lambda \mu_\lambda, \mathbf{k}_\parallel, \mathbf{q}_\parallel}^+ \right) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_\lambda, \mathbf{q}_\parallel} \gamma_{\mathbf{k}_\parallel, \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{q}_\parallel}^{i_\lambda \nu_\lambda} \hbar g_{\mathbf{q}_\parallel}^{i_\lambda \nu_\lambda} \left( G_{\nu_\lambda i_\lambda, \mathbf{k}_\parallel, \mathbf{q}_\parallel}^- + G_{\nu_\lambda i_\lambda, \mathbf{k}_\parallel, \mathbf{q}_\parallel}^+ \right) \quad (2.80)$$

mit  $\lambda = c, v$ . Die hier auftretenden Zweiteilchenkorrelationen  $F_{j_\lambda i_\lambda, \mathbf{k}_\parallel, \mathbf{q}_\parallel}^\pm$  und  $G_{j_\lambda i_\lambda, \mathbf{k}_\parallel, \mathbf{q}_\parallel}^\pm$  werden im Folgenden als phononassistierte Dichte für den Fall dass  $i_\lambda = j_\lambda$  oder sonst als phononassistierte Kohärenz bezeichnet. Anders als bei der Polarisation  $p_{i_\lambda j_\lambda, \mathbf{k}_\parallel}$  bei denen Kohärenzen mit  $\lambda = \lambda'$  aufgrund des betrachteten Energiebereichs vernachlässigt werden können, kann der Einfluss der phononassistierten Kohärenzen auf die Änderung der Ladungsträgerdichte groß sein, da die Energie eines Phonons im Bereich von zwei Subbändern liegen kann.

Die Änderung der Ladungsträgerdichten durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist relativ vielseitig und beinhaltet verschiedene Effekte. Betrachtet man einen starken Lichtpuls im energetischen Bereich der indirekten Bandlücke so werden Ladungsträger durch die phononassistierte Absorption erzeugt. In der Regel ist die indirekte Absorption sehr gering, so dass die Erzeugung der Ladungsträger selten eine Rolle spielt. Da man durch Absorption an der direkten Bandlücke allerdings sehr einfach Ladungsträger erzeugen kann, die sich dann nicht in ihrem energetischen Gleichgewicht befinden, führt die Elektron-Elektron Streuung dazu, dass beispielsweise Elektronen in einem lokalen Minimum am  $\Gamma$ -Punkt mittels Phononen in ihr globales Minimum an einem anderen Punkt in der Brillouinzone gestreut werden. Ein weiterer Effekt kann auch sein, wenn die Temperatur der Ladungsträger nicht der des Gitters entspricht, dass die Ladungsträger über die Emission von Phononen ihre Energie an das Gitter abgeben und sich somit ins thermische Gleichgewicht mit dem Gitter bewegen. Diese Effekte werden im Kapitel 4 ausführlicher diskutiert.

### 2.2.3. Phononassistierte Gleichungen

Beim Aufstellen der Bewegungsgleichung der Zweiteilchenkorrelationen treten nun, verursacht durch die Elektron-Elektron und Elektron-Phonon-Wechselwirkung, Dreiteilchenkorrelationen in den Gleichungen auf, was im Kapitel 2.2.1 beschrieben wird. Selbst nach der Faktorisierung auf Singlet-Doublet-Ebene erfordert die Berechnung der phononassistenten Größen weitere Annahmen und Näherungen, die im Folgenden beschrieben werden.

Betrachten wir zunächst den Dreiteilchenerwartungswert, der durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung erzeugt wird. Die hierdurch verursachte Änderung einer phononassistenten Größe ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \langle a_{i,l_{\parallel}}^{\dagger} a_{j,m_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \right|_{e-e} = & \frac{i}{\hbar} \sum_{\substack{v \\ \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel} \neq 0}} \left( \gamma_{\substack{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, l_{\parallel} \\ \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}}}^{ii, vv} V_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{2D} \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} a_{j, m_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \right. \\ & \left. + \gamma_{\substack{j, m_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel} \\ \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}}}^{jj, vv} V_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{2D} \langle a_{i, l_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} a_{j, m_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \right). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Bei der Faktorisierung vernachlässigen wir die Singletterme des Phononoperators  $\langle b_{\mathbf{p}} \rangle$  und  $\langle b_{\mathbf{p}}^{\dagger} \rangle$ , da es sich bei diesen Termen um *kohärente Phononen* handelt. Zwar lassen sich kohärente Phononen in vielen Materialsystemen [68], unter anderem auch in Germanium [69], beobachten, doch spielen diese Effekte in dieser Arbeit keine Rolle. Zum einen existiert auf Grund der ähnlichen elastischen Konstanten in Ge/SiGe-Heterostrukturen kein Confinement für das phononische System. Die durch die optisch erzeugten Elektronen und Löcher und deren Wechselwirkung mit dem Kristall gebildeten kohärenten Phononen sind nicht im Quantenfilm lokalisiert. Die Wechselwirkung mit den gebundenen Elektronen und Löchern ist daher als klein anzunehmen. Die Anzahl von nicht-kohärenten Phononen ist außerdem wesentlich größer als die der kohärenten, weshalb im Vergleich die Wechselwirkung mit nicht-kohärenten Phononen dominierend sein wird. Eine theoretische Beschreibung kohärenter Effekte kann der Referenz [70] entnommen werden.

Mithilfe der Cluster-Entwicklung (Gleichung (2.61)) und der Vernachlässigung kohärenter Phononen kann der Erwartungswert des Dreiteilchenoperators als

$$\begin{aligned} \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} a_{j, m_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle = & \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{j, m_{\parallel}} \rangle \langle a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \\ & + \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} \rangle \langle a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{j, m_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \\ & + \langle a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} \rangle \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{j, m_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \\ & - \langle a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{j, m_{\parallel}} \rangle \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \\ & + \delta \langle a_{i, l_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{\dagger} a_{v, \mathbf{k}_{\parallel}} a_{j, m_{\parallel}} b_{(-)p_{\parallel}}^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (2.82)$$

geschrieben, wobei für alle weiteren Betrachtungen die echten Dreiteilchenkorrelationen vernachlässigt werden. Der hier auftauchende Dreiteilchenerwartungswert beschreibt die Streuung eines Elektrons unter Absorption (Emission) eines Phonons bei gleichzeitiger Streuung eines weiteren Elektrons. Da die phononassistierte Absorption, bei der

es sich um eine Zweiteilchenkorrelationen handelt, bereits relativ schwach ist, wird ein Prozess höherer Ordnung in der Teilchenzahl in der Regel nur noch schwächer werden, weil die Zeiten für die Ausbildung einer solchen Korrelation im Vergleich für die einfachen Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Streuungen sehr groß werden.

Um diese Terme weiter vereinfachen zu können, werden zwei Annahmen gemacht:

- (i) Für die Ladungsträgerdichten und die Polarisation gilt räumliche Homogenität, was der Bedingung  $\langle a_{i,\mathbf{k}_\parallel}^\dagger a_{j,\mathbf{k}'_\parallel} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_\parallel, \mathbf{k}'_\parallel} \langle a_{i,\mathbf{k}_\parallel}^\dagger a_{j,\mathbf{k}_\parallel} \rangle$  entspricht.
- (ii) Es werden nur phononassistierte Größen erzeugt, bei denen die Differenz der Wellenzahlen des Erzeugers und Vernichters gerade dem Phononimpuls entspricht bzw.  $\langle a_{i,\mathbf{k}_\parallel}^\dagger a_{j,\mathbf{k}'_\parallel} b_{\mathbf{q}_\parallel} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_\parallel, \mathbf{k}'_\parallel + \mathbf{q}_\parallel} \langle a_{i,\mathbf{k}'_\parallel + \mathbf{q}_\parallel}^\dagger a_{j,\mathbf{k}'_\parallel} b_{\mathbf{q}_\parallel} \rangle$  gilt.

Die Bedingung (i) ist dadurch gerechtfertigt, als dass es für die Erzeugung solcher Korrelationen in dem betrachteten System keine Quellterme für räumlich inhomogene Ladungsträgerdichten und dadurch auch für räumlich inhomogene Polarisationen gibt. Die Bedingung (ii) leitet sich aus der Impulserhaltung und Bedingung (i) ab.

Auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung führt – wie bereits erwähnt – bei der Berechnung der phononassistierten Größen auf Dreiteilchenerwartungswerte, die in der Form

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left\langle a_{i,l_\parallel}^\dagger a_{j,m_\parallel} b_{\mathbf{p}_\parallel} \right\rangle \Big|_{e-p} = & \\
& \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu, \mathbf{q}_\parallel} \gamma_{l_\parallel + \mathbf{q}_\parallel, l_\parallel}^{\mu, i} \hbar g_{\mathbf{q}_\parallel}^{\mu, i} \left( \left\langle a_{\mu, l_\parallel + \mathbf{q}_\parallel}^\dagger a_{j, m_\parallel} b_{\mathbf{q}_\parallel} b_{\mathbf{p}_\parallel} \right\rangle + \left\langle a_{\mu, l_\parallel + \mathbf{q}_\parallel}^\dagger a_{j, m_\parallel} b_{-\mathbf{q}_\parallel}^\dagger b_{\mathbf{p}_\parallel} \right\rangle \right) \\
& - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu, \mathbf{q}_\parallel} \gamma_{m_\parallel, m_\parallel - \mathbf{q}_\parallel}^{j, \nu} \hbar g_{\mathbf{q}_\parallel}^{j, \nu} \left( \left\langle a_{i, l_\parallel}^\dagger a_{\nu, m_\parallel - \mathbf{q}_\parallel} b_{\mathbf{q}_\parallel} b_{\mathbf{p}_\parallel} \right\rangle + \left\langle a_{i, l_\parallel}^\dagger a_{\nu, m_\parallel - \mathbf{q}_\parallel} b_{-\mathbf{q}_\parallel}^\dagger b_{\mathbf{p}_\parallel} \right\rangle \right) \\
& - \frac{i}{\hbar} \sum_{\substack{\mu, \nu \\ \mathbf{k}_\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel, \mathbf{k}_\parallel}^{\mu \nu} \hbar g_{\mathbf{p}_\parallel}^{\mu, \nu} \left\langle a_{i, l_\parallel}^\dagger a_{j, m_\parallel} a_{\mu, \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^\dagger a_{\nu, \mathbf{k}_\parallel} \right\rangle.
\end{aligned} \tag{2.83}$$

auftauchen. Die Gleichungen für die anderen phononassistierten Größen folgen analog. Der letzte Term auf der rechten Seite der Gleichung wird nach dem gleichen Prinzip wie in Gleichung (2.6) faktorisiert. Die anderen beiden Dreiteilchenerwartungswerte werden wieder unter der Annahme zerlegt, dass es keine kohärenten Phononen gibt. Das heißt, dass alle Erwartungswerte  $\langle b_i \rangle$ ,  $\langle b_i^\dagger \rangle$ ,  $\langle b_i b_j \rangle$  und  $\langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle$  verschwinden und nur der inkohärente Anteil wird betrachtet. Aufgrund der geforderten räumlichen Homogenität des elektronischen Systems tauchen nur Zweiphononerwartungswerte mit gleicher Wellenzahl auf, und man erhält

$$N(\mathbf{p}_\parallel) := \left\langle b_{\mathbf{p}_\parallel}^\dagger b_{\mathbf{p}_\parallel} \right\rangle \tag{2.84}$$

als die Phononbesetzungszahl bei gegebener Wellenzahl  $\mathbf{q}_\parallel$ . Für die Verteilung der Phononen nimmt man an, dass diese ein Bad für das elektronische System sein sollen, dass sich im thermischen Gleichgewicht befindet. Die Phononbesetzung ist daher über eine *Bose-Einstein-Verteilung*

$$N(\mathbf{p}_\parallel) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{p}_\parallel)}{k_B T}\right) - 1} \tag{2.85}$$

gegeben. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da die in dieser Arbeit behandelten Ladungsträgerdichten und Anregungsleistungen klein sind, sodass sich die Temperatur des Gitters und somit die Phononbesetzung nicht ändert.

### 2.2.3.1. Phononassistierte Polarisation

Die folgende Diskussion über die phononassistierte Polarisationen wird der Übersicht halber exemplarisch für  $F_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-}$  durchgeführt und lässt sich analog auf die andern phononassistierte Größen übertragen.

Die Gleichung für die Änderung der phononassistierte Polarisation lautet:

$$\frac{d}{dt} F_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} = \frac{i}{\hbar} \left( e_{ic, \mathbf{k}_{\parallel}} - e_{jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} + \hbar \omega(\mathbf{q}_{\parallel}) \right) F_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86a)$$

$$- \frac{i}{\hbar} \left( \sum_{\mu_c} F_{\mu_c c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \Omega_{jv \mu_c, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \sum_{\nu_v} F_{jv \nu_v, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \Omega_{\nu_v ic, \mathbf{k}_{\parallel}} \right) \quad (2.86b)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, jv} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, jv} p_{ic \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}} N(\mathbf{q}_{\parallel}) \quad (2.86c)$$

$$- \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_c} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{ic, \nu_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{ic, \nu_c} p_{\nu_c c jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} (N(\mathbf{q}_{\parallel}) + 1) \quad (2.86d)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, jv} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, jv} n_{jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} p_{ic \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}} \quad (2.86e)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_c} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{ic, \nu_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{ic, \nu_c} n_{ic, \mathbf{k}_{\parallel}} p_{\nu_c c jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \quad (2.86f)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} p_{ic jv, \mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mu, \mathbf{k}'_{\parallel} \neq 0} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{jv jv, \mu \mu} V_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{2D} F_{\mu \mu, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86g)$$

$$- \frac{i}{\hbar} p_{ic jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \sum_{\nu, \mathbf{k}'_{\parallel}} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}}^{ic ic, \nu \nu} V_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{2D} F_{\nu \nu, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86h)$$

$$- \frac{i}{\hbar} n_{ic, \mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{q}'_{\parallel} \neq 0} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{ic ic, ic ic} V_{\mathbf{q}'_{\parallel}}^{2D} F_{ic jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86i)$$

$$- \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v} p_{ic \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{q}'_{\parallel} \neq 0} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{ic ic, \mu_v \mu_v} V_{\mathbf{q}'_{\parallel}}^{2D} F_{\mu_v jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86j)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} n_{jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{q}'_{\parallel} \neq 0} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}'_{\parallel}}^{jv jv, jv jv} V_{\mathbf{q}'_{\parallel}}^{2D} F_{ic jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86k)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_c} p_{\nu_c jv, \mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{q}'_{\parallel} \neq 0} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}}^{\nu_c \nu_c, jv jv} V_{\mathbf{q}'_{\parallel}}^{2D} F_{\nu_c jv, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}'_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{-} \quad (2.86l)$$

Um die Gleichung für  $F_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{+}$  zu erhalten muss, lediglich das Vorzeichen der Phononenergie in Term (a) gewechselt werden, und in den Termen (c) und (d) tauschen die Terme  $N(\mathbf{q}_{\parallel})$  und  $(N(\mathbf{q}_{\parallel}) + 1)$  ihre Position. Die Gleichungen für  $G_{icjv, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  erhält man, indem man  $\mathbf{k}_{\parallel}$  durch  $\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}$  ersetzt.

Die ersten beiden Terme ((a) und (b)) der Gleichung (2.86) erinnern in ihrer Form an die Halbleiter-Bloch-Gleichungen (2.66). Der Term (a) ist durch das Produkt aus Energiedifferenz und Phononenergie mal die phononassistierte Polarisation selber gegeben, wobei es sich auch hier nicht um die Einteilchenenergien, sondern um die renormierten Energien handelt. Anders als bei den Halbleiter-Bloch-Gleichungen treten im Term (b) die phononassistierte Dichten auf, die an die renormierten Rabi-Frequenzen koppeln. Bei den Termen (c) bis (f) handelt es sich um die sogenannten Quellterme, da diese die phononassistierte Polarisation erzeugen. Zwar kann diese auch durch den Term (b) erzeugt werden, benötigt aber dafür als weitere Voraussetzung das Vorhandensein einer endlichen phononassistierte Dichte. Bei (g) bis (l) handelt es sich um Renormierungen höherer Ordnung, da hier über Zweiteilchenkorrelationen summiert wird.

### 2.2.3.2. Phononassistierte Dichte

Die phononassistierte Dichten ergeben sich in analoger Herleitung wie die phononassistierte Polarisationen, wobei jedoch hier die beiden fermionischen Operatoren aus dem gleichen Subband stammen. Diese Größen beschreiben die Änderung der Ladungsträgerdichten, die durch die Elektron-Phonon-Streuung verursacht wird. Dabei kann es sich sowohl um ein Thermalisieren als auch um ein Equilibrieren der Ladungsträger handeln. In Kapitel 4 werden beide Fälle unter Lösung der hier vorgestellten Gleichungen diskutiert.

Die Gleichung für die zeitliche Änderung der phononassistierte Dichten innerhalb des Leitungsbandes lautet:

$$\frac{d}{dt} F_{i_c, j_c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}} = -\frac{i}{\hbar} \left( \epsilon_{i_c, \mathbf{k}_{\parallel}} + \epsilon_{j_c, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} + \hbar \omega(\mathbf{q}_{\parallel}) \right) F_{i_c, j_c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}} \quad (2.87a)$$

$$- \frac{i}{\hbar} \left[ \sum_{\mu_v} \left( F_{i_c, \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}} \Omega_{\mu_v, j_c, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^* - F_{\mu_v, i_c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}} \Omega_{j_c, \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}} \right) \right] \quad (2.87b)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{j_c, i_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{j_c, i_c} n_{j_c, \mathbf{k}_{\parallel}} N(\mathbf{q}_{\parallel}) \quad (2.87c)$$

$$- \frac{i}{\hbar} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}}^{j_c, i_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{j_c, i_c} n_{i_c, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} (N(\mathbf{q}_{\parallel}) + 1) \quad (2.87d)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{j_c, i_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{j_c, i_c} n_{i_c, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} n_{j_v, \mathbf{k}_{\parallel}} \quad (2.87e)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v, \nu_v} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, \nu_v} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, \nu_v} p_{i_c, \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} p_{j_v, \nu_v, \mathbf{k}_{\parallel}}^* \quad (2.87f)$$

$$+ \frac{d}{dt} F_{i_c, j_c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}} \Big|_{\text{H-F}}. \quad (2.87g)$$

Hierbei wurden Renormierungsterme, die über phononassistierte Größen summieren, der Einfachheit wegen weggelassen. Die Form der phononassistierte Dichten gleicht der der phononassistierte Polarisationen. Zunächst gibt es einen oszillierenden Term (a), dann mit (b) die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie und die Quellterme, die diese Größe unabhängig von der externen Anregung erzeugen.

### 2.2.4. Markov-Näherung

Die *Markov-Näherung* stellt eine Möglichkeit dar, die phononassistierten Gleichungen unter Vernachlässigung von Gedächtniseffekten analytisch zu lösen. Hierfür sind jedoch weitreichende Annahmen und Näherungen nötig, um diese überhaupt erst durchführen zu können. Mithilfe der Markov-Näherung lässt sich aber der numerische Aufwand extrem reduzieren und die Annahmen sind unter bestimmten Bedingungen gerechtfertigt. Im Kapitel 4.3 wird detailliert auf die Anwendbarkeit dieser Näherung eingegangen und Unterschiede zur vollen Lösung werden diskutiert.

Damit die Markov-Näherung durchgeführt werden kann, müssen die Coulomb-Summen über phononassistierte Größen und die Terme, die an das Lichtfeld koppeln, vernachlässigt werden. Diese Terme sind nicht unbedingt unvereinbar mit der Markov-Näherung, aber der Aufwand für die Berechnung wäre sonst gleich dem der vollen Rechnung. Die phononassistierten Gleichungen haben, nach der Vernachlässigung dieser Terme, die Form der Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} x(t) = \Omega x(t) + y(t) \quad (2.88)$$

mit der formalen Lösung

$$x(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Omega (t - t')\right) y(t'). \quad (2.89)$$

Bei der Exponentialfunktion handelt es sich um eine schnell in der Zeit oszillierende Funktion, wohingegen die Funktion  $y(t)$  langsam in der Zeit oszilliert. Dies gilt sowohl für die phononassistierten Polarisierungen als auch für die phononassistierten Dichten. Da der erste Fall nur in der sogenannten *Rotating-Wave-Approximation* gelöst wird, was im Kapitel A.2 gezeigt wird, hängt die Funktion  $y(t)$  nur von langsam oszillierenden Polarisierungen  $\tilde{p}_{icj\nu, \mathbf{k}_{\parallel}}$  und sich ebenfalls zeitlich gering ändernden Ladungsträgerdichten ab. Im Fall der phononassistierten Dichten hängt  $y(t)$  ebenfalls von den Ladungsträgerdichten und Produkten von Polarisierungen der Form  $p_{icj\nu, \mathbf{k}_{\parallel}} p_{icj\nu, \mathbf{k}'_{\parallel}}^*$  ab, wobei es sich hierbei wegen

$$p_{icj\nu, \mathbf{k}_{\parallel}} p_{icj\nu, \mathbf{k}'_{\parallel}}^* = \exp(-i\omega t) \tilde{p}_{icj\nu, \mathbf{k}_{\parallel}} \tilde{p}_{icj\nu, \mathbf{k}'_{\parallel}}^* \exp(i\omega t) \quad (2.90)$$

auch um eine langsam oszillierende Funktion handelt. In der Integralgleichung (2.89) wird deutlich, dass man für die Berechnung von  $x(t)$  die Funktion  $y(t')$  für alle Zeiten  $t' < t$  einget. Diese Kopplung an frühere Zeiten, welche auch als Gedächtniseffekte bezeichnet werden, wird in der Markov-Näherung nun vernachlässigt, wodurch  $y(t) = y(t')$  gilt und die Funktion  $y(t)$  vor das Integral gezogen werden kann.

Die Lösung des Integrals erfolgt unter der Anfangsbedingung  $x(0) = 0$ , was einem abrupten Einschalten der Elektron-Phonon-Streuung entspricht. In Wahrheit ist das System ununterbrochen und für Zeiten  $t \rightarrow -\infty$  der Streuung ausgesetzt, was sich allerdings numerisch nicht umsetzen lässt. Daher führen wir eine phänomenologische Dämpfung  $i\gamma$  ein, um ein adiabatisches Einschalten zu gewährleisten. Die Lösung des Integrals

$$I = \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\Omega + i\gamma) (t - t')\right) \quad (2.91)$$

lautet (beispielsweise [71])

$$I = \frac{i\hbar}{\Omega + i\gamma}. \quad (2.92)$$

Unter Verwendung dieser Lösung kann die phononassistierte Polarisation als

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i_c j_v, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^- &\approx \frac{1}{e_{i_c, \mathbf{k}_{\parallel}} - e_{j_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} + \hbar\omega(\mathbf{q}_{\parallel}) - \hbar\omega_{\text{RWA}} + i\gamma} \\ &\times \left( \begin{aligned} &\frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, j_v} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, j_v} \tilde{p}_{i_c \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}} N(\mathbf{q}_{\parallel}) \\ &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_c} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{i_c, \nu_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_c, \nu_c} \tilde{p}_{\nu_c j_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} (N(\mathbf{q}_{\parallel}) + 1) \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_v} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, j_v} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_v, j_v} n_{j_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \tilde{p}_{i_c \mu_v, \mathbf{k}_{\parallel}} \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\nu_c} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{i_c, \nu_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_c, \nu_c} n_{i_c, \mathbf{k}_{\parallel}} \tilde{p}_{\nu_c j_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \end{aligned} \right) \quad (2.93) \end{aligned}$$

geschrieben werden, wobei  $\omega_{\text{RWA}}$  eine Frequenz in der Nähe der Lichtfrequenz ist. Weitere Details zur Rotating-Wave-Approximation sind Anhang A zu entnehmen. Wie bei den vollständigen phononassistierten Gleichungen 2.86 folgen auch hier die anderen Terme analog.

In analoger Weise lassen sich auch die Gleichungen der phononassistierten Dichten nähern. Dafür werden ebenfalls die Coulomb-Summen über phononassistierte Größen in Gleichung 2.87 vernachlässigt. Die Gleichung für die phononassistierten Dichten lauten in der Markov-Näherung:

$$\begin{aligned} F_{i_v j_v, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^- &\approx \frac{1}{e_{i_v, \mathbf{k}_{\parallel}} - e_{j_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} + \hbar\omega(\mathbf{q}_{\parallel}) + i\gamma} \\ &\times \left( \begin{aligned} &-\frac{i}{\hbar} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{i_v, j_v} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_v, j_v} n_{j_v, \mathbf{k}_{\parallel}} N(\mathbf{q}_{\parallel}) \\ &+ \frac{i}{\hbar} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{i_v, j_v} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_v, j_v} n_{i_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} (N(\mathbf{q}_{\parallel}) + 1) \\ &+ \frac{i}{\hbar} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{i_v, j_v} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{i_v, j_v} n_{i_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} n_{j_v, \mathbf{k}_{\parallel}} \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu_c, \nu_c} \gamma_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_c, \nu_c} \hbar g_{-\mathbf{q}_{\parallel}}^{\mu_c, \nu_c} \tilde{p}_{\nu_c i_v, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \tilde{p}_{\mu_c j_v, \mathbf{k}_{\parallel}}^* \end{aligned} \right). \quad (2.94) \end{aligned}$$

Die zugehörigen Gleichungen für die Leitungsbandelektronen und die anderen phononassistierten Gleichungen können auf gleichem Wege hergeleitet werden.

### 2.2.5. Numerischer Aufwand

Die – für die Untersuchung der optischen Eigenschaften indirekter Halbleiter – relevanten Gleichungen lassen sich nur numerisch lösen. Da der dafür notwendige Aufwand relativ groß ist, soll hier eine Abschätzung des numerischen Aufwands zur Veranschaulichung skizziert werden. Der Einfachheit halber wird die Diskussion auf ein Zweibandmodell reduziert.

Ausgangspunkt für die Abschätzung sind die Halbleiter-Bloch-Gleichungen (2.66), welche gekoppelte Differentialgleichungen im zweidimensionalen  $\mathbf{k}$ -Raum darstellen, wobei wir die Koordinaten  $k$  und  $\varphi$  verwenden. Um die Absorption an einer indirekten

Bandlücke berechnen zu können, müssen diese Gleichungen sowohl am  $\Gamma$ -Punkt als auch an dem Punkt, an dem sich das weitere Extremum in der Bandstruktur befindet, gelöst werden. Im Falle einer nichtaxialsymmetrischen Bandstruktur sind dies  $n_k n_\varphi$  Polarisationen  $p_{k,\varphi}$ . Unter Beachtung der Coulomb-Wechselwirkung auf Hartree-Fock-Ebene skaliert die Berechnung der Renormierungsterme mit  $(n_k n_\varphi)^2$ .

Es existieren zwölf phononassistierte Größen, wie beispielsweise  $F_{i,j,k,q,\varphi,\varphi'}^+$ , wobei  $\varphi'$  der Winkel zwischen  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{q}$  ist. Demnach müssen  $12 n_k n_\varphi n_q n_{\varphi'}$  phononassistierte Gleichungen gelöst werden. Die auftretenden Coulomb-Summen über phononassistierte Größen führen dazu, dass die Rechenzeit mit  $12 (n_k n_\varphi)^2 n_q n_{\varphi'}$  skaliert.

Typische Werte für die Stützstellen in der Berechnung sind:  $n_k = 200$ ,  $n_q = 100$ ,  $n_\varphi = 100$  und  $n_{\varphi'} = 100$ . Es sind daher in der Regel für eine winkelabhängige Rechnung  $10^9$  Gleichungen zu lösen, wobei ein Speicherbedarf im Bereich von 40–60 GB bei Verwendung eines Runge-Kutta-Algorithmus vierter Ordnung entsteht. Parallelisierbar sind die Gleichungen innerhalb des reziproken Raums, allerdings nur innerhalb eines Zeitschritts. Zwischen den Zeitschritten müssen alle Größen zwischen den parallelen Prozessen synchronisiert werden, weshalb sich bisher nur eine Parallelisierung auf einem System mit gemeinsam genutzten Speicher eine Verbesserung der Rechenzeit brachte. Die Rechenzeit auf einer 32-Kern-Workstation (je 2.4 GHz) liegt in der Größenordnung von ein bis zwei Wochen.

### 3. Absorption und Gewinn indirekter Halbleiter

In diesem Kapitel werden die Charakteristika der Absorption und der optischen Verstärkung indirekter Halbleiter diskutiert und anhand eines einfachen Modellsystems verständlich gemacht. In früheren Betrachtungen wurde bereits das Verhalten der Absorption und des Gewinns des phononassistierten Übergangs von Trupke et al. [72] mithilfe eines Ratengleichungsmodells postuliert, welche hier durch die auf einer mikroskopischen Theorie basierenden Berechnungen verifiziert werden. Dies wird zunächst an einem vereinfachten Zweibandmodell vollzogen und mit den Eigenschaften direkter Halbleiter verglichen. Im Anschluss wird das Modell hinsichtlich des Einflusses der Bandstruktur und der Coulomb-Wechselwirkung untersucht.

Die phononassistierte Absorption indirekter Halbleiter wurde in der Vergangenheit über Ratengleichungsmodelle, basierend auf *Fermis Goldener Regel*, berechnet. Grundlegende Berechnungen zum indirekten optischen Gewinn wurden von Dumke et al. [25] in den sechziger Jahren durchgeführt. Ein grundlegender Fehler in den Überlegungen wurde allerdings erst von Trupke et al. [72] entdeckt, wodurch sich die Prognosen über die Form der optischen Verstärkung deutlich ändern. Diese Prognosen werden von Chen et al. [73] in einem alternativen Ratengleichungsmodell unterstützt.

Die Form der indirekten Absorption in dreidimensionalen Strukturen wurde erstmalig von R. J. Elliott [24] als wurzelförmig vorhergesagt. In seiner Betrachtung führen die exzitonischen Effekte bei der phononassistierten Absorption auf die gleiche Energieabhängigkeit wie bei der direkten Absorption unter Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung, was allerdings rein zufällig ist.

Die Berechnung der indirekten Absorption erfolgt über die Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen (2.66) unter Hinzunahme der phononassistierten Korrelationen (2.86). Die in Kapitel 2.2.4 gezeigte Markov-Näherung der phononassistierten Größen darf hierbei nicht angewendet werden, da dadurch die Kohärenz der phononassistierten Polarisation, welche für die Absorption und stimulierte Emission von Licht notwendig ist, vernachlässigt wird.

Der Zusammenhang zwischen der Absorption und der mikroskopischen Polarisation, wie sie durch die Halbleiter-Bloch-Gleichungen berechnet wird, ist in der Referenz [23] gezeigt und wird hier nur kurz skizziert. Abgeleitet aus den *Maxwell*-Gleichungen erhält man die Beziehung

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi\omega}{n(\omega)c} \text{Im}[\chi(\omega)] \quad (3.1)$$

für die Absorption, wobei  $n(\omega)$  der Brechungsindex,  $c$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit und  $\chi(\omega)$  die optische Suszeptibilität ist. Aufgrund der in Halbleitern häufig geringen Frequenzabhängigkeit des Brechungsindexes kann diese vernachlässigt werden. Der Brechungsindex  $n(\omega) \approx n_b$  ist dann durch den Hintergrundbrechungsindex gegeben, der wiederum der Literatur, zum Beispiel O. Madelung [74], entnommen werden

kann. Die Beziehung

$$P(\omega) = \chi(\omega)\mathcal{E}(\omega) \quad (3.2)$$

zwischen Polarisation, optischer Suszeptibilität und klassischem Lichtfeld ergibt sich aus der Theorie der *linearen Antwort* für die Reaktion des betrachteten Systems auf einen externen Stimulus. Die optische Suszeptibilität  $\chi(\omega)$  ist in diesem Zusammenhang als Antwortfunktion auf die externe optische Anregung des Systems durch das Lichtfeld  $\mathcal{E}(\omega)$  zu deuten. Nichtlineare Effekte, wie beispielsweise die *Zwei-Photonen-Absorption*, können in dieser Theorie nicht beschrieben werden, da man Terme quadratischer und höherer Ordnung in der externen Anregung vernachlässigt.

Die Polarisation  $P(t)$  lässt sich in der Bloch-Basis als

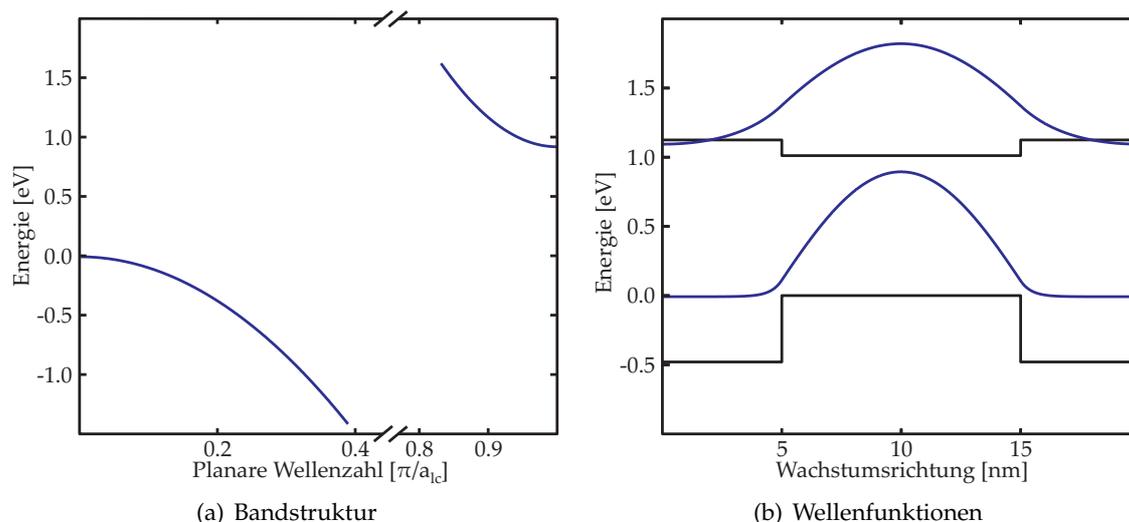
$$P(t) = \sum_{\mathbf{k}, i_c, j_v} d_{i_c, j_v, \mathbf{k}} p_{i_c, j_v, \mathbf{k}} + h.c. \quad (3.3)$$

schreiben, wodurch der Zusammenhang zwischen der mikroskopischen Polarisation  $p_{i_c, j_v, \mathbf{k}}$ , welche über die Halbleiter-Bloch-Gleichungen (2.66) gegeben sind, und der Absorption aus Gleichung (3.1) hergestellt ist, da für beide Größen eine Fouriertransformation existiert. Als externe Anregung des Halbleiters wird ein gaußförmiger Lichtpuls  $\mathcal{E}(t)$  mit einer Halbwertsbreite von 50 fs und der mittleren Energie der indirekten Bandkante  $E_{g, \text{ind}}$  verwendet.

### 3.1. Modellannahmen

Für die folgenden Untersuchungen betrachten wir ein Zweibandmodell, wobei das Valenzband ein Maximum am  $\Gamma$ -Punkt und das Leitungsband ein Minimum am Rand der Brillouin-Zone besitzt. Die Bandstruktur wird ferner als rotationssymmetrisch betrachtet, um den numerischen Aufwand möglichst gering zu halten (s. Kapitel 2.2.5). Da der direkte Übergang selbst nicht betrachtet werden soll, aber für die Erzeugung des indirekten Übergangs dennoch relevant ist, verwenden wir eine direkte Bandlücke von 2 eV mit  $m_{\text{eff}} \rightarrow \infty$ . Die indirekte Bandlücke liegt etwas unterhalb von 1 eV. Die zugehörige Bandstruktur ist in Abbildung 3.1 (a) gezeigt, wobei darauf verzichtet wird, die direkte Bandlücke zu zeigen. Die effektive Masse der Elektronen im Bandstrukturminimum ist  $m_{\text{eff}, c} = 0.03 m_0$  und die effektive Masse der Löcher am  $\Gamma$ -Punkt ist  $m_{\text{eff}, v} = 4 m_{\text{eff}, c}$ . Durch diese Bandstruktur erreicht man eine vollständige Separation der Elektronen und der Löcher im reziproken Raum. Dadurch, dass der direkte Übergang energetisch weit vom indirekten Übergang entfernt ist, kann man sich auf Elektron-Phonon-Streuprozesse konzentrieren, bei denen der Impulsaustausch groß genug ist, um einen Ladungsträger von einem Tal in das andere zu streuen.

Für die Quantenfilm-Heterostruktur nehmen wir an, dass die Lochzustände stark lokalisiert sind, wohingegen die Elektron-Zustände am Rand der Brillouinzone einen schwächeren Einschluss des Confinements erfahren. Diese Situation ist der eines Ge/SiGe-Quantenfilms relativ ähnlich, da sich die direkten Bandlücken von Ge und SiGe am  $\Gamma$ -Punkt deutlich unterscheiden, sich aber am  $L$ - und  $X$ -Punkt ähneln. In Abbildung 3.1 (b) ist das daraus resultierende Confinement-Potential für die Löcher am  $\Gamma$ -Punkt und für die Elektronen am Rand der Brillouinzone und die zugehörigen Confinement-Wellenfunktionen eingezeichnet.



**Abbildung 3.1.:** Elektronische Eigenschaften des Modellhalbleiters. In (a) ist die Bandstruktur des verwendeten Zweibandmodells gezeigt, wobei das Elektronenband am  $\Gamma$ -Punkt und das Lochband am Rand der ersten Brillouinzone als konstant angenommen wird und für die Einfachheit der Darstellung nicht eingezeichnet wurde. In (b) sind die zugehörigen Confinementpotentiale und -wellenfunktionen gezeigt.

In der Diamant- beziehungsweise der Zinkblendestruktur ist das optische Deformationspotential der Elektron-Phonon-Streuung für Leitungsbandelektronen  $d_{cb}^{opt} = 0$ . Des Weiteren gibt es in Silizium keine Intervalley-Streuung zwischen dem  $\Gamma$ - und dem X-Tal. Aus diesem Grund wird zunächst nur ein Deformationspotential für Streuung innerhalb des Valenzbandes angenommen ( $d_{vb}^{opt} = 40$  eV).

Für die Berechnung der Halbleiter-Bloch- und der phononassistierten Gleichungen nehmen wir an, dass sich die Ladungsträger bereits im thermischen Gleichgewicht befinden und dass der Lichtpuls zur Abfrage selbst keine Änderung der Ladungsträgerdichten verursacht. Dies bedeutet, dass man – wie in Kapitel 2.2.2 erwähnt – die Verteilungsfunktionen der Ladungsträger durch Fermifunktionen annähern kann.

## 3.2. Vereinfachtes Ratengleichungsmodell

Ein besonders einfaches Modell zur Beschreibung der Absorption bzw. des optischen Gewinns indirekter Halbleiter ist das Ratengleichungsmodell aus [72]. Hierbei werden aus den Beziehungen für die Absorption direkter Halbleiter die zugehörigen Gleichungen für indirekte Übergänge abgeleitet. Im Folgenden wird zunächst das Modell für den direkten Halbleiter diskutiert und im Anschluss die Erweiterung auf den indirekten Halbleiter gezeigt, um im Vergleich die unterschiedlichen Resultate der optischen Eigenschaften aufzuzeigen.

Allgemein beruht das Ratengleichungsmodell auf der Annahme, dass die Absorption bei einer bestimmten Energie  $\hbar\omega$  gegeben ist, und zwar durch die Rate der absorbierten Photonen  $dr_{abs}$  minus der Rate der emittierten Photonen  $dr_{stim}$ , wobei man sich hier auf die stimulierte Emission beschränkt. Die Absorption selbst beschreibt eine Änderung

des Photonflusses  $dj_\gamma$ , wenn dieser ein Medium durchläuft. Es gilt also

$$\alpha(\hbar\omega)dj_\gamma = dr_{\text{abs}}(\hbar\omega) - dr_{\text{stim}}(\hbar\omega) \quad (3.4)$$

Es wird ein Zweiniveausystem mit den Energieniveaus  $E_0$  und  $E_1$  und den Besetzungsdichten  $N_0$  und  $N_1$  mit  $N_0 = N_1$  betrachtet. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten der beiden Niveaus sind durch die Quasi-Fermiverteilungen  $f_0$  und  $f_1$  mit

$$f_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} + 1} \quad (3.5)$$

gegeben, wobei  $i = 0, 1$  und  $\mu_0 = \mu_1 = \mu$  das chemische Potential ist. Weiter wird angenommen, dass die Ladungsträgerzahlen in beiden Zuständen gleich groß sind, wodurch gilt

$$\mu = \frac{(E_1 + E_0)}{2}. \quad (3.6)$$

Die Änderung der Ladungsträgerzahlen in den beiden Niveaus wird durch eine Änderung des chemischen Potentials von  $\Delta\mu_i$  beschrieben. Eine Erhöhung der Anzahl der Elektronen im Zustand 1 wird durch

$$\Delta_1 = \mu + \frac{\Delta\mu}{2} \quad (3.7)$$

und die Erhöhung der Lochbesetzung des Zustands 0 durch

$$\Delta_0 = \mu - \frac{\Delta\mu}{2} \quad (3.8)$$

beschrieben.

Die Absorption des direkten Übergangs bei der Energie  $\hbar\omega = E_1 - E_0$  ist durch

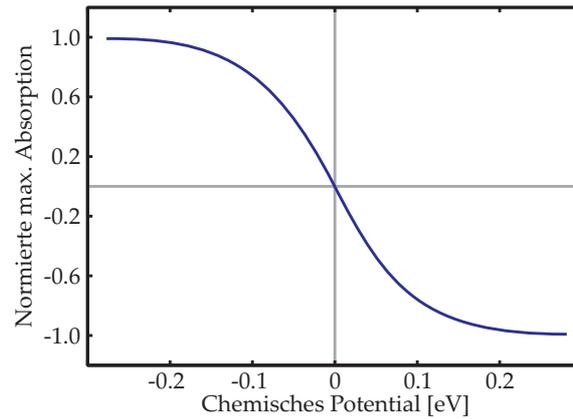
$$\alpha(\hbar\omega, \mu_0, \mu_1) = MN_0N_1 (f_0(E_0, \mu_0) - f_1(E_1, \mu_1)), \quad (3.9)$$

gegeben, wobei  $M$  ein Proportionalitätsfaktor für die Absorption und die stimulierte Emission ist. Die Zustandsdichten der beiden Bänder werden mit  $N_0$  und  $N_1$  bezeichnet.

Betrachtet man nun den Absorptionskoeffizient an der Bandkante für verschiedene Ladungsträgerdichten, so führt dies auf einen punktsymmetrischen Kurvenverlauf, wobei der Punkt der Ladungsträgerinversion durch  $\Delta\mu = E_g$ , gegeben ist. Die maximale Absorption entspricht dem maximal möglichen Gewinn, und optischer Gewinn ist erst ab der Ladungsträgerinversion  $\mu = 0$  möglich. In Abbildung 3.2 ist der Absorptionskoeffizient für verschiedene chemische Potentiale, also für verschiedene Ladungsträgerdichten gezeigt. Die Energielücke liegt bei  $E_g = 1.1 \text{ eV}$ , entspricht also ungefähr der indirekten Bandkante Siliziums bei Raumtemperatur [74]. Ferner wurde eine Phononenergie von  $\hbar\Omega_{LO} = 50 \text{ meV}$  und eine Temperatur von  $T = 50 \text{ K}$  verwendet. Normiert bedeutet hier, dass durch die Zustandsdichten  $N_0$  und  $N_1$  sowie durch das Matrixelement  $M$  geteilt wurde.

Im indirekten Halbleiter ist die Absorption oder stimulierte Emissionen von Photonen begleitet von der Emission oder Absorption eines Phonons. Die Energie für die Absorption eines Photons unter gleichzeitiger Absorption eines Phonons beträgt  $\hbar\omega = E_1 - E_0 - \hbar\Omega$  und bei gleichzeitiger Emission eines Phonons  $\hbar\omega = E_1 - E_0 + \hbar\Omega$ . Der Absorptionskoeffizient der beiden Prozesse ist durch

$$\alpha(\hbar\omega) = M'N_0N_1N_\Gamma (f_0(1 - f_1)f_\Gamma - f_1(1 - f_0)(1 + f_\Gamma)) \quad (3.10)$$

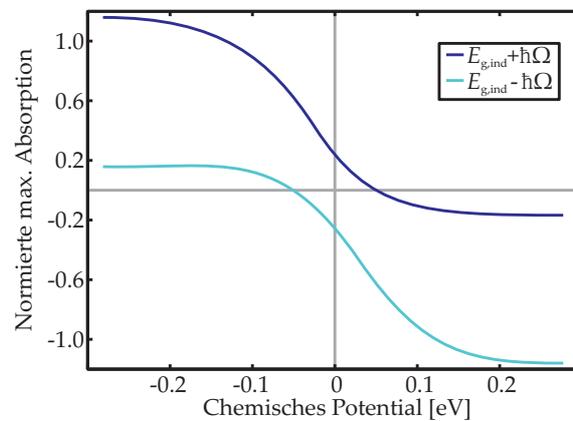


**Abbildung 3.2.:** Normierter Absorptionskoeffizient für den direkten Übergang. Das chemische Potential ist um die direkte Bandlücke  $E_g$  zu niedrigeren Energien verschoben.

und

$$\alpha(\hbar\omega) = M' N_0 N_1 N_\Gamma (f_0 (1 - f_1) (1 + f_\Gamma) - f_1 (1 - f_0) f_\Gamma) \quad (3.11)$$

gegeben, wobei  $M'$  und  $M''$  Proportionalitätsfaktoren sind, die die Informationen über das Dipol- und Phononmatrixelement beinhalten.  $f_\Gamma$  ist die Phonondichte. Berechnet man die Absorptionsraten für die indirekten Übergänge, so ergibt sich ein fundamental anderes Verhalten für die Absorption bzw. den Gewinn. Die Absorption beziehungs-

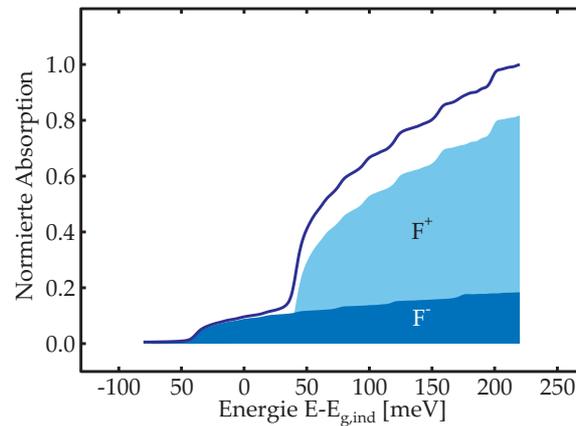


**Abbildung 3.3.:** Normierter Absorptionskoeffizient für die indirekten Übergänge. Das chemische Potential ist um die indirekte Bandlücke  $E_{g,ind}$  zu niedrigeren Energien verschoben.

weise der optische Gewinn der beiden indirekten Übergänge ist nicht gleich groß, wie von Dumke et al. [25] gefordert, was in Abbildung 3.3 deutlich zu erkennen ist. Im Falle niedrigerer Ladungsträgerdichten, also kleinem chemischem Potential, ist die Absorption des energetisch höheren Übergangs sehr viel größer als die des energetisch niedrigeren. Die Rollen der beiden Übergänge sind für den Fall großer Ladungsträgerdichten gerade vertauscht. Demnach übersteigt der maximale Gewinn des energetisch niedrigeren Übergangs bei hohen Dichten die maximale Absorption des dichtefreien Falls um genau den Wert, um den sich die Absorptionen der beiden Übergänge in diesem Fall unterschieden haben. Es ist zusätzlich deutlich zu erkennen, dass der Fall optischer Verstärkung vor dem Punkt  $\mu = 0$ , den man Ladungsträgerinversion nennt, erreicht wird.

### 3.3. Lineare Absorption im Bereich der indirekten Bandkante

Zunächst wird die Diskussion auf den Niedrigdichtebereich beschränkt, um die bereits hier auftretenden Unterschiede zum direkten Halbleiter und die Abhängigkeiten der optischen Eigenschaften von der Temperatur und der Phononenergie zu verstehen. Des Weiteren sollen die Ergebnisse der mikroskopischen Rechnung mit denen des einfachen Ratengleichungsmodells aus Gleichung (3.10) und (3.11) verglichen werden.



**Abbildung 3.4.:** Phononassistierte Absorption im Bereich der indirekten Bandlücke. Die durchgezogene Linie zeigt die gesamte Absorption und die beiden Flächen repräsentieren den Anteil der beiden indirekten Prozesse  $F_{c,v,k,q}^-$  und  $F_{c,v,k,q}^+$ .

Die Abbildung 3.4 zeigt die normierte Absorption des in Kapitel 3.1 beschriebenen indirekten Halbleiters mit einer Phononenergie von  $\hbar\Omega_{LO} = 40$  meV. Die durchgezogene Linie zeigt dabei die gesamte Absorption, wohingegen die beiden Fläche den Anteil der beiden indirekten Übergänge an der gesamten Absorption zeigen. Hierbei fällt das asymmetrische Verhalten der beiden Übergänge ins Auge. Die Absorption des niederen-energetischen Übergangs ist deutlich geringer als die des hochenergetischen. Die Ursache für diese Asymmetrie lässt sich auf die unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten für die Absorption bzw. Emission eines Phonons zurückführen. In Gleichung (2.86) ((c) und (d)) ist der – für die Ungleichheit verantwortliche – Quellterm in  $F_{c,v,k,q}^-$  proportional zu  $d_v N_q$  und in  $F_{c,v,k,q}^+$  proportional zu  $d_v (N_q + 1)$ . Anschaulich verstehen lässt sich das Verhalten dadurch, dass es immer möglich ist, ein Phonon zu emittieren, jedoch das Absorbieren eines Phonons nur möglich ist, wenn auch eins vorhanden ist. Die Asymmetrie der beiden Übergänge wird also folgerichtig von der Temperatur des Phononbades abhängen, wobei für die Rechnung in Abbildung 3.4 eine Temperatur von  $T = 300$  K verwendet wurde. Die resultierende Temperaturabhängigkeit wird in Kapitel 3.3.4 diskutiert. Dieselben Quellterme sind ebenfalls für die Abhängigkeit des Verhältnisses der indirekten Absorption von der Phononenergie verantwortlich, da die Besetzungszahl der Phononen  $N_q$  eine Funktion der Temperatur und der Phononenergie  $N_q = N(T, \hbar\Omega(\mathbf{q}))$  ist.

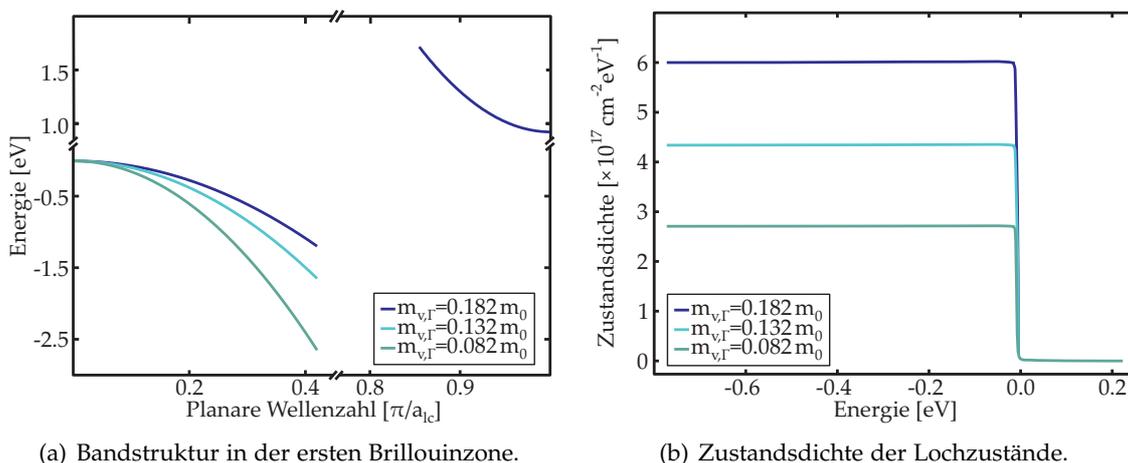
### 3.3.1. Bedeutung der Zustandsdichte für die Absorption

Da zunächst der numerische Aufwand für die Berechnung gering gehalten werden soll, wird, wie in Kapitel 3.1 bereits erwähnt, eine rotationssymmetrische Bandstruktur angenommen. Der Halbleiter wird indirekt, indem das Leitungsbandmaximum am Rand und das Valenzbandminimum im Zentrum der ersten Brillouinzone liegt. Die Zustandsdichte spielt im direkten Halbleiter für die maximale Absorption und den maximalen optischen Gewinn, aber auch für die Exziton-Bindungsenergie eine entscheidende Rolle. Es hat sich beispielsweise herausgestellt, dass der optische Gewinn maximal wird, wenn die effektiven Massen der Elektronen und Löcher gleich sind [75]. Des Weiteren wird auch die Exzitonbindungsenergie für gleiche effektive Massen extremal. Die Diskussion der optischen Eigenschaften wird zunächst auf die Berechnung ohne Coulomb-Wechselwirkung limitiert und erst im Kapitel 3.3.2 auf diese weitere Vielteilchenwechselwirkung erweitert.

Die Zustandsdichte ist eine in der Quantenmechanik häufig verwendete Größe, und ihre Definition kann verschiedenen Lehrbüchern, beispielsweise [27], entnommen werden. Sie ist über

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_{n,\mathbf{k}} \delta(E - \epsilon_{n,\mathbf{k}}) \quad (3.12)$$

gegeben, wobei  $N$  die Anzahl der Atome des Festkörpers ist. Die Zustandsdichte gibt die Zahl der Zustände an, die in einem Energieintervall von  $E$  bis  $E + \Delta E$  liegen. Vernachlässigt man die Coulomb-Wechselwirkung bei der Berechnung der Absorption in einem direkten Halbleiter, so ist diese direkt proportional zur Zustandsdichte. Es werden im folgenden die Zustandsdichten und deren Einfluss auf die Absorption im Bereich der indirekten Bandkante in Abhängigkeit von den effektiven Massen diskutiert.



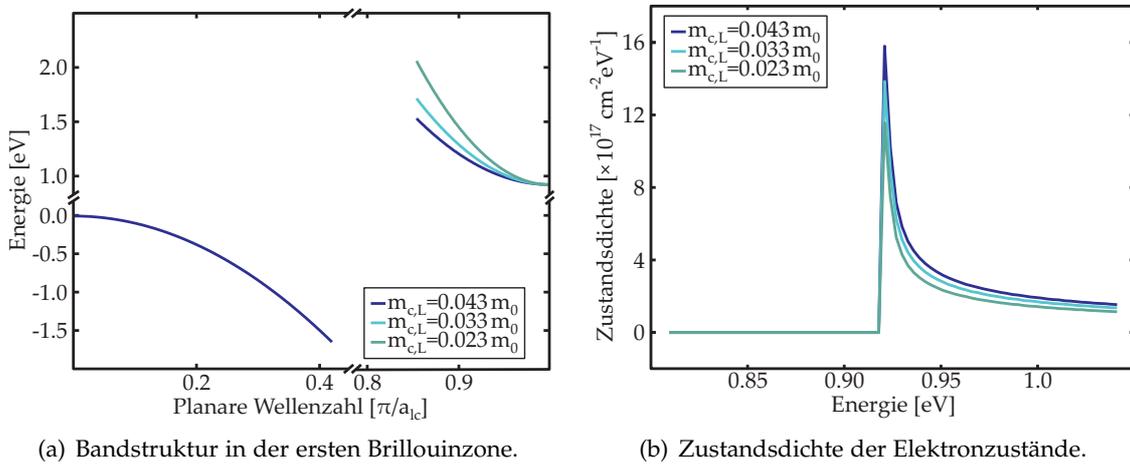
**Abbildung 3.5.:** Bandstruktur und Zustandsdichte für die effektiven Lochmassen im Zentrum der ersten Brillouinzone  $m_{v,\Gamma} = 0.082, 0.132, \text{ und } 0.182 m_0$ .

In Abbildung 3.5 ist in (a) die Bandstruktur und in (b) die daraus resultierende Zustandsdichte des Leitungsbandes für die effektiven Lochmassen  $m_{v,\Gamma} = 0.082, 0.132, \text{ und } 0.182 m_0$  gezeigt. Der Verlauf der Zustandsdichte entspricht dem, was man an dieser Stelle erwartet, da für eine quadratische Energiedispersion in zwei Dimensionen die Zustandsdichte einer Stufenfunktion gleicht. Mit steigender effektiver Lochmasse ver-

größert sich die Zustandsdichte aufgrund der Proportionalität

$$\rho(E) \sim m_{v,\Gamma}. \quad (3.13)$$

Im Bereich des Minimums des indirekten Halbleiters erhält man, wie in Abbildung 3.6 gezeigt, ein deutlich anderes Ergebnis. Die Zustandsdichte am Rand der Brillouinzone



**Abbildung 3.6.:** Bandstruktur und Zustandsdichte für die effektiven Elektronenmassen im Zentrum der ersten Brillouinzone  $m_{c,L} = 0.023, 0.033,$  und  $0.043 m_0$ .

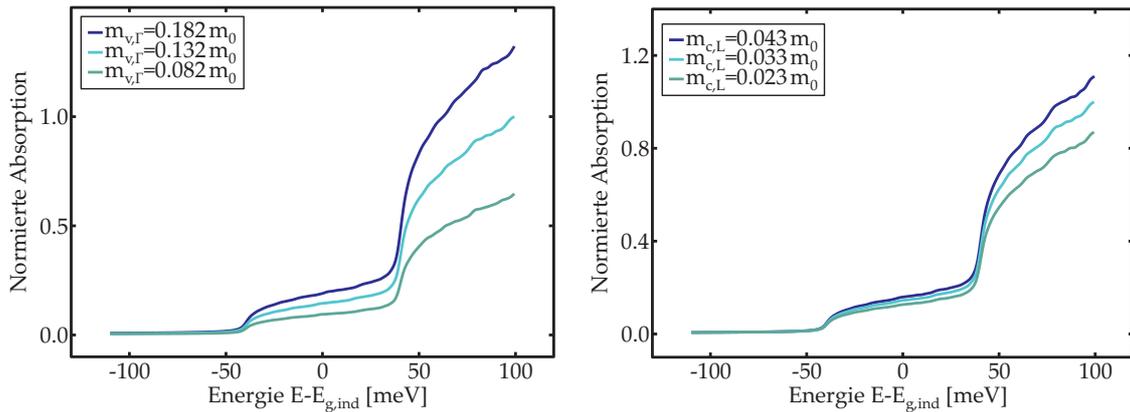
ist bei einer als rotationssymmetrisch angenommenen Bandstruktur um fast zwei Größenordnungen größer als die der Löcher am  $\Gamma$ -Punkt. Trotz quadratischer Dispersion in  $\mathbf{k}_{\parallel}$ -Richtung erhält man keine Stufenfunktion für die Zustandsdichte, sondern eine stark abfallende Funktion mit einem scharfen Maximum bei der Energie der indirekten Bandlücke, aufgrund der Funktionaldeterminante bei der Integration über den zweidimensionalen Raum. Die Abhängigkeit der Zustandsdichte von der effektiven Masse ist über

$$\rho(E) \sim \sqrt{m_{c,L}} \quad (3.14)$$

gegeben und steigt somit von der kleinsten effektiven Elektronenmasse  $m_{c,L} = 0.023$  über  $0.033$  nach  $0.043 m_0$  an. Es ist wichtig herauszustellen, dass dieses Zustandsdichte ein Artefakt der Bandstruktur ist und in einem Halbleiter eine axialsymmetrische Bandstruktur näherungsweise nur am  $\Gamma$ -Punkt angenommen werden kann. Der Einfluss einer anisotropen Bandstruktur wird in Kapitel 3.3.5 diskutiert.

Durch die Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung erwartet man, dass sich die Absorption ähnlich verhält wie die Zustandsdichte. Die aus den oben diskutierten Bandstrukturen resultierenden Absorptionsspektren sind in den Abbildungen 3.7 (a) für die verschiedenen Lochmassen und in (b) für die verschiedenen Elektronenmassen gezeigt, wobei die jeweils andere Masse konstant gehalten wird. Die indirekte Absorption, die eine Zweiteilchenkorrelation darstellt, führt – selbst bei vernachlässigter Coulomb-Wechselwirkung – nicht auf eine Absorption, die in ihrer Form der Zustandsdichte gleicht, wird aber in ihrer Abhängigkeit von den effektiven Massen dieser ähneln.

In der Tat erhält man auf diesem Weg die durch die Gleichungen (3.13) und (3.14) gegebenen Abhängigkeiten der Absorption von den entsprechenden effektiven Massen, obwohl sich die Form der Zustandsdichte selbst nicht im Absorptionsspektrum wiederfinden lässt. Diese Abhängigkeit ist zur Verdeutlichung in Abbildung 3.8 gezeigt. Die

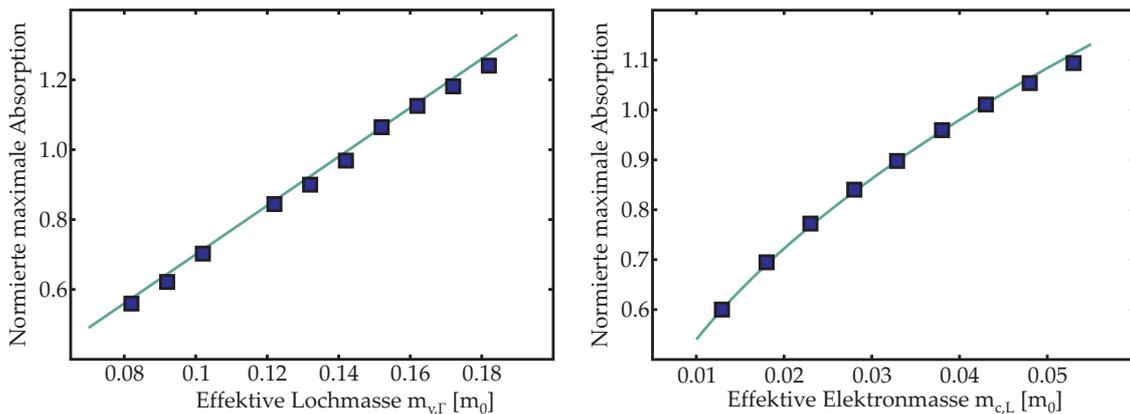


(a) Absorption für die effektiven Lochmassen  $m_{v,\Gamma} = 0.082, 0.132$ , und  $0.182 m_0$  und der effektiven Elektronenmasse  $m_{c,L} = 0.033 m_0$ .

(b) Absorption für die verschiedenen Elektronenmassen  $m_{c,L} = 0.023$  über  $0.033$  nach  $0.043 m_0$  und der effektiven Lochmasse  $m_{v,\Gamma} = 0.132 m_0$ .

**Abbildung 3.7.:** Indirekte Absorption in Abhängigkeit von der effektiven Elektron- und Lochmassen.

Quadrate zeigen jeweils die Absorption am energetische höheren der beiden indirekten Übergänge. Man erhält eine sehr gute Übereinstimmung mit einer Geraden in (a) und einer Wurzelfunktion (b), die jeweils durch eine durchgezogene Linie repräsentiert werden. Ein Einfluss auf die Verhältnisse der beiden indirekten Übergänge zueinander ist nicht zu erkennen. Die Asymmetrie der beiden Übergänge wird also nicht durch die Zustandsdichte, sondern durch die Form der Quellterme der phononassistierten Gleichungen bestimmt.



(a) Absorption bei  $E = E_{ind} + \hbar\Omega_{LO}$  in Abhängigkeit der effektiven Lochmasse.

(b) Absorption bei  $E = E_{ind} + \hbar\Omega_{LO}$  in Abhängigkeit der effektiven Elektronenmasse.

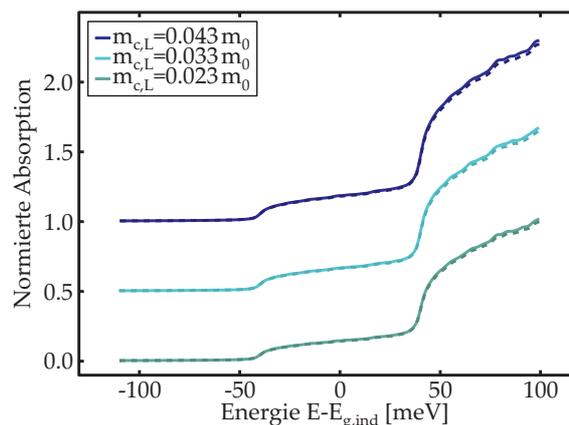
**Abbildung 3.8.:** Absorption bei konstanter Energie in Abhängigkeit von den verschiedenen effektiven Massen. Zur Verdeutlichung der Proportionalitäten wurde in (a) eine gerade und in (b) eine wurzelförmige durchgezogene Linie eingezeichnet.

### 3.3.2. Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung

Die Coulomb-Wechselwirkung spielt bei den optischen Eigenschaften direkter Halbleiter eine entscheidende Rolle. Sie führt dort zum einen zur Ausbildung exzitonischer Resonanzen in der Absorption unterhalb der Bandkante und zum anderen zu einer Verstärkung der Absorption der Kontinuumszustände. Dieses Verhalten erhält man bereits, wenn man die Coulomb-Wechselwirkung in der Hartree-Fock-Näherung betrachtet [23].

Der Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung auf die optischen Eigenschaften indirekter Halbleiter wurde bisher nicht mit gleichem Aufwand untersucht, wie es bei den direkten Halbleitern der Fall ist. Die Arbeiten von R. Loudon und N. O. Lipari sagen unter Verwendung eines Modells effektiver Massen vorher, dass die Bindungsenergie eines Elektrons am Rand der ersten Brillouinzone und eines Lochs am  $\Gamma$ -Punkt des dreidimensionalen Siliziumkristalls 12–14 meV und in Germanium 2–3 meV betragen [76–78]. Experimentelle Arbeiten ordneten bestimmte Signaturen ihrer Spektren der prognostizierten Bindungsenergie des indirekten Exzitons zu. K. L. Shaklee und R. E. Nahory interpretieren Signaturen wellenlängenmodulierter Absorptionsspektren im Bereich der indirekten Bandlücke als die wasserstoffähnlichen Resonanzen des indirekten Exzitons in Silizium [79]. Aus diesen Arbeiten ergibt sich ein Wert von 14.7 meV. Die Interpretation ferninfraroter Absorptionsspektren von D. Labrie et al. als den  $1S$ – $2P$ -Übergangs des indirekten Exzitons liefert einen ähnlichen Wert für die Bindungsenergie [80]. T. Suzuki und R. Shimano interpretierten Signaturen von THz Absorptionsspektren ebenfalls als den  $1S$ – $2P$ -Übergang des indirekten Exzitons mit einer Bindungsenergie die konsistent mit den vorherigen Ergebnissen ist [81].

Im Gegensatz zur Absorption von direkten Halbleitern sind in Absorptionsspektren indirekter Halbleiter keine exzitonischen Signaturen zu erwarten, da aufgrund des zusätzlichen Phononimpulses bei der Absorption die komplette Zustandsdichte erreicht werden kann. Es ist stattdessen ein energetisch niedrigerer Beginn der Absorption zu erkennen [24, 82].



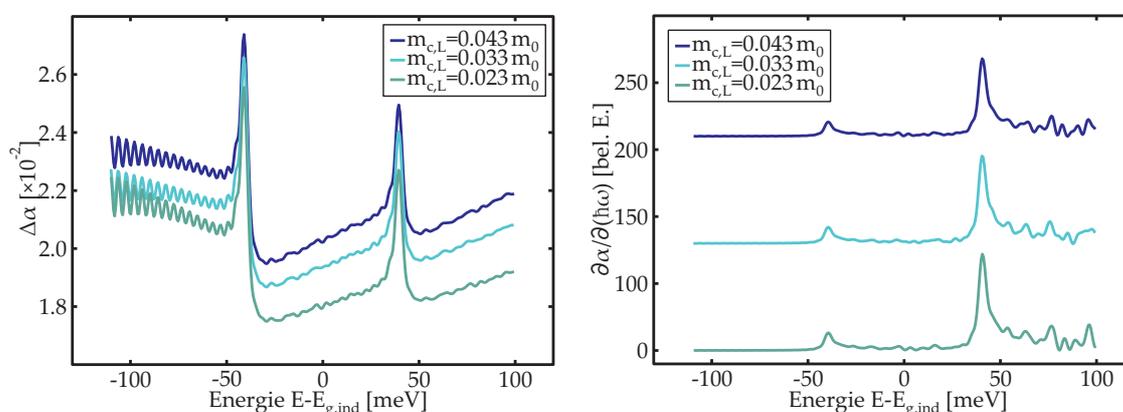
**Abbildung 3.9.:** Indirekte Absorption mit (durchgezogene Linien) und ohne (gestrichelte Linien) Coulomb-Wechselwirkung für die effektiven Elektronenmassen  $m_{c,L} = 0.023, 0.033$  und  $0.043 m_0$  und der effektiven Lochmasse  $m_{v,\Gamma} = 0.132 m_0$ . Der Versatz zwischen den unterschiedlichen effektiven Massen dient der einfacheren Darstellung.

Die Abbildung 3.9 zeigt die indirekte Absorption mit und ohne Coulomb-Wechselwirkung für die effektiven Elektronmassen  $m_{c,L} = 0.023, 0.033$  und  $0.043 m_0$ . Es zeigt sich

nur eine sehr geringe Verstärkung der Absorption durch die Coulomb-Wechselwirkung. In differentiellen Spektren lassen sich geringe Änderungen deutlicher darstellen. Die Änderung der Absorption, die durch die Coulomb-Wechselwirkung induziert wird, ist durch

$$\Delta\alpha = \frac{\alpha_C - \alpha_0}{\alpha_0} \quad (3.15)$$

gegeben, wobei  $\alpha_C$  die berechnete Absorption mit und  $\alpha_0$  die berechnete Absorption ohne Coulomb-Wechselwirkung ist. Der Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung liegt bei den verwendeten Parametern im Prozentbereich, wie in Abbildung 3.10 (a) zu sehen ist. An den indirekten Übergängen erhält man deutliche Signaturen und es ist zu erkennen, dass die Coulomb-Verstärkung asymmetrisch verläuft. Die Absorption auf der niederenergetischen Seite wird etwas mehr verstärkt als auf der hochenergetischen Seite, was konsistent mit den experimentellen und theoretischen Befunden aus der Literatur ist. In Abbildung 3.10 (b) ist die Ableitung der Absorption nach der Energie gezeigt. Es



(a) Coulomb-induzierte Änderung der indirekten Absorption.

(b) Differentielle indirekte Absorption.

**Abbildung 3.10.:** Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung auf die indirekte Absorption für verschiedene effektive Leitungsbandmassen. In b) wurde ein Versatz zwischen den verschiedenen effektiven Massen eingeführt, um einen einfacheren Zugang zu ermöglichen.

sind nur die beiden indirekten Übergänge und keine Aufspaltung durch die Exziton-Niveaus zu erkennen. Da differentielle Spektren wesentlich rauschempfindlicher sind, erhält man für die Absorption des Kontinuums ein relativ starkes Oszillieren, was auf die Auflösung im reziproken Raum zurück zu führen ist.

Es kann verschiedene Gründe haben, warum der Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung auf die indirekte Absorption so gering ist. Zunächst sind die Rechnungen für ein Modellsystem und nicht mit den exakten Parametern von Germanium oder Silizium durchgeführt worden. Es wäre für zukünftige Untersuchungen notwendig, eine möglichst exakte Bandstruktur zu verwenden. Ein weiterer Grund für die unterschiedlichen Ergebnisse kann sein, dass es sich bei allen vorherigen Untersuchungen um Volumenmaterialien gehandelt hat, wohingegen in dieser Arbeit die Eigenschaften von Quantenfilmheterostrukturen untersucht werden. Der Einfluss der Dimensionalität auf die optischen Eigenschaften, insbesondere der Coulomb-Wechselwirkung, kann sehr groß sein. Zwar verhält es sich bei der direkten Absorption so, dass die Reduktion der Dimensionalität zu einem größerem Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung führt, doch lässt sich

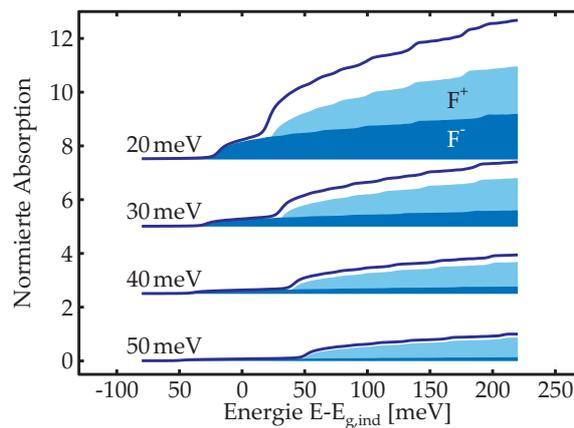
dies nicht einfach so auf den indirekten Übergang übertragen. Eine letzte Möglichkeit für die Abweichung der Ergebnisse von denen aus der Literatur stellt die Hartree-Fock-Näherung der Coulomb-Wechselwirkung dar. Es ist im Bereich des Möglichen, dass es sich bei den beobachteten Coulomb-Effekten um Korrelationen höherer Ordnung handelt, welche durch die Näherung der Coulomb-Wechselwirkung vernachlässigt wurden. Es bleibt dabei zu erwähnen, dass das indirekte Exziton, sollte es sich aus einem Elektron bei  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  und einem Loch bei  $\mathbf{k} = 0$  zusammensetzen, einen von Null verschiedenen Gesamtimpuls besitzt. Für einen Gesamtimpuls von Null wäre eine Korrelation höherer Ordnung notwendig.

### 3.3.3. Abhängigkeit von der Phononenergie

Die bereits erwähnten Quellterme aus Gleichung (2.86) (c) und (d) der beiden indirekten Übergänge führen auf die Abhängigkeit der Absorption von der Phononenergie für den einfachen Fall, dass das Deformationspotential der Elektron-Phonon-Wechselwirkung innerhalb des Leitungsbands verschwindet. Das Verhältnis der beiden Quellterme gibt somit das Verhältnis der beiden Übergänge zu einander an:

$$\frac{F_{c,v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ \Big|_{\text{src}}}{F_{c,v,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^- \Big|_{\text{src}}} \approx \frac{N_{\mathbf{q}_{\parallel}} + 1}{N_{\mathbf{q}_{\parallel}}} = \exp \left[ \frac{\hbar\Omega_{\text{LO}}}{k_B T} \right]. \quad (3.16)$$

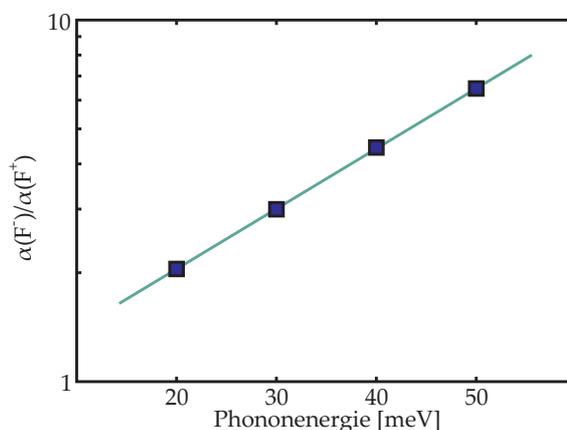
Dieses Ergebnis entspricht der Vorhersage von Trupke et al. aus [72], der zwar diese Beziehung ursprünglich für das Verhältnis von maximaler Absorption zu maximalem optischen Gewinn formulierte, es sich aber mit gleicher Begründung auch für das Verhältnis der beiden indirekten Übergänge zueinander anwenden lässt. Dass die Beziehung nur näherungsweise gilt, rührt von den anderen Quelltermen und dem Licht-Materie-Wechselwirkungsterm her, die für das Aufstellen dieser Beziehung vernachlässigt werden mussten. Es zeigt sich, dass diese Terme zwar klein sind, jedoch ist nicht a priori klar, welchen Einfluss sie unter bestimmten Voraussetzungen haben können.



**Abbildung 3.11.:** Phononassistierte Absorption im Bereich der indirekten Bandlücke für Phononenergien von  $\hbar\Omega_{\text{LO}} = 20, 30, 40$  und  $50$  meV.

Die Abbildung 3.11 zeigt die Absorption im Bereich der indirekten Bandlücke für die Phononenergie  $\hbar\Omega_{\text{LO}} = 20, 30, 40$  und  $50$  meV. Es ist deutlich, dass sich die Verhältnisse der beiden indirekten Übergänge in Abhängigkeit der Phononenergie stark ändern. Für

geringe Phononenergien ist die Gesamtaborption sehr stark. Das Verhältnis der beiden indirekten Übergängen zueinander liegt bei ca. einem Faktor zwei. Verdoppelt man die Phononenergie von 20 meV auf 40 meV so vervierfacht sich das Verhältnis der beiden Übergänge. In Abbildung 3.12 wird dies noch mal verdeutlicht, indem das Verhältnis der maximalen Absorption des energetisch niedrigeren zum energetisch höheren Übergang in Abhängigkeit der Phononenergie aufgetragen wird. Die Quadrate zeigen die

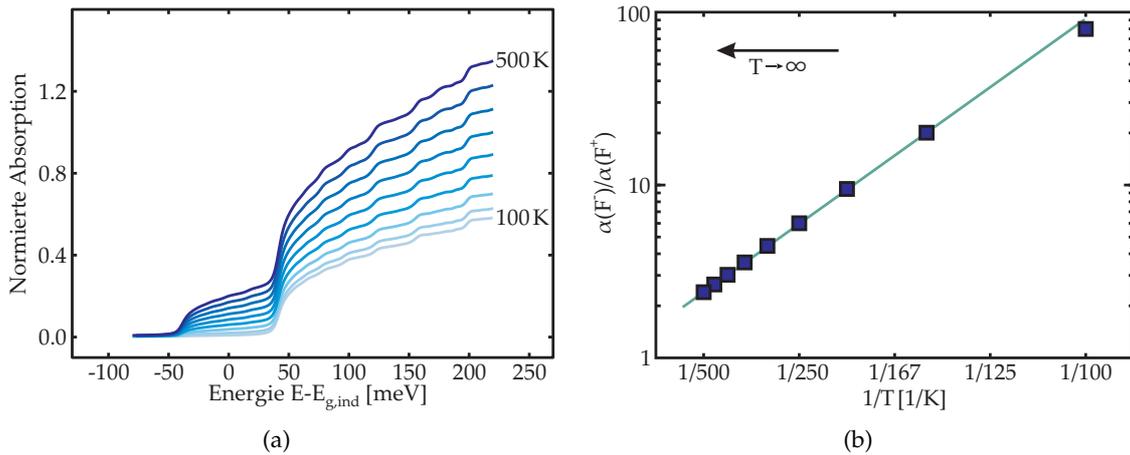


**Abbildung 3.12.:** Die Quadrate zeigen Verhältnis der maximalen Absorption der beiden indirekten Übergänge  $F_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^-$  und  $F_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+$  zu einander. Die durchgezogene Linie zeigt den durch Gleichung (3.16) gegebenen Zusammenhang zwischen Phononenergie und Verhältnis der Übergänge zu einander.

Ergebnisse aus der mikroskopischen Theorie und die durchgezogene Linie das durch Gleichung (3.16) beschriebene exponentielle Verhalten. Die große Übereinstimmung bestätigt das von Trupke et al. [72] vorhergesagte Verhältnis der beiden indirekten Übergänge zu einander. Für den Fall, dass die Phononenergie gegen Null geht, werden die indirekten Übergänge gleich groß, da die Besetzung von Phononen mit einer verschwindenden Energie für alle Temperaturen  $T \neq 0$  unendlich wird und somit die Absorption und Emission eines Phonons gleich wahrscheinlich wird.

### 3.3.4. Temperaturabhängigkeit

Durch die Gleichung 3.16 ist neben der Abhängigkeit der indirekten Absorption von der Phononenergie auch die Temperaturabhängigkeit gegeben. Für tiefer werdende Temperaturen erwartet man, dass der Übergang, der durch die Absorption eines Phonons assistiert wird, schwächer wird, da die Besetzung der Phononen geringer wird. Die Wahrscheinlichkeit, ein Phonon zu emittieren, ist aber für alle Temperaturen möglich, weshalb man für den energetisch höheren Übergang eine deutlich schwächere Temperaturabhängigkeit erwartet. Die resultierende Temperaturabhängigkeit der indirekten Absorption ist in Abbildung 3.13 a) für den Temperaturbereich von 100 bis 500 K bei einer Phononenergie von 40 meV gezeigt. Man erhält das oben beschriebene Verhalten. Zunächst erkennt man, dass beide Übergänge mit der Temperatur an Intensität verlieren. Jedoch verliert der energetisch höhere Übergang, welcher durch die Emission eines Phonons assistiert wird, nicht in gleichem Maße an Intensität wie der energetisch niedrigere Übergang, welche bei 100 K kaum noch zu erkennen ist. Bei dieser Betrachtung muss allerdings beachtet werden, dass der Intensitätsverlust des energetisch höheren



**Abbildung 3.13.:** a) Phononassistierte Absorption im Bereich der indirekten Bandlücke mit einer Phononenergien von  $\hbar\Omega_{LO} = 40$  meV für Temperaturen von  $T = 100$  bis  $T = 500$  K in äquidistanten 50 K Schritten. b) Verhältnis der maximalen Absorption der beiden indirekten Übergänge zu einander (Quadrate) und die durch Gleichung (3.16) beschriebene exponentielle Abhängigkeit (durchgezogene Linie).

Übergangs sowohl durch die Verringerung des energetisch niedrigeren Übergangs als auch durch die Änderung des Quellterms von  $F_{cv,k_{\parallel},q_{\parallel}}^+$  bedingt wird, da hier die Gesamtabsorption aufgetragen ist.

Um die Abhängigkeit der beiden indirekten Übergänge von der Temperatur zu verdeutlichen, wird noch eine alternative Betrachtungsweise herangezogen. Die Abbildung 3.13 (b) zeigt eine Arrheniusdarstellung des oben genannten Sachverhalts. Hierbei wurde das Verhältnis der maximalen Absorptionen der beiden indirekten Übergänge logarithmisch als Funktion der inversen Temperatur aufgetragen. Die Quadrate zeigen dabei wieder die Ergebnisse der mikroskopischen Rechnung und die durchgezogene Linie den über Gleichung 3.16 beschriebenen exponentiellen Zusammenhang. Man erhält eine bis zu einer Temperatur von 150 K eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den beiden Modellen. Für tiefere Temperaturen unterschätzt man das Verhältnis der beiden indirekten Übergänge, was auf die numerische Genauigkeit zurückzuführen ist. Für tiefe Temperaturen ist der energetisch niedrigere Übergang, wie in Abbildung 3.13 (a) gezeigt, kaum noch zu erkennen und wird kleiner als die numerische Genauigkeit der Simulation. Für Temperaturen  $T \rightarrow \infty$  gleichen sich die beiden Übergänge an, da aufgrund der hohen Phononbesetzung die Emission und Absorption eines Phonons gleichwahrscheinlich wird.

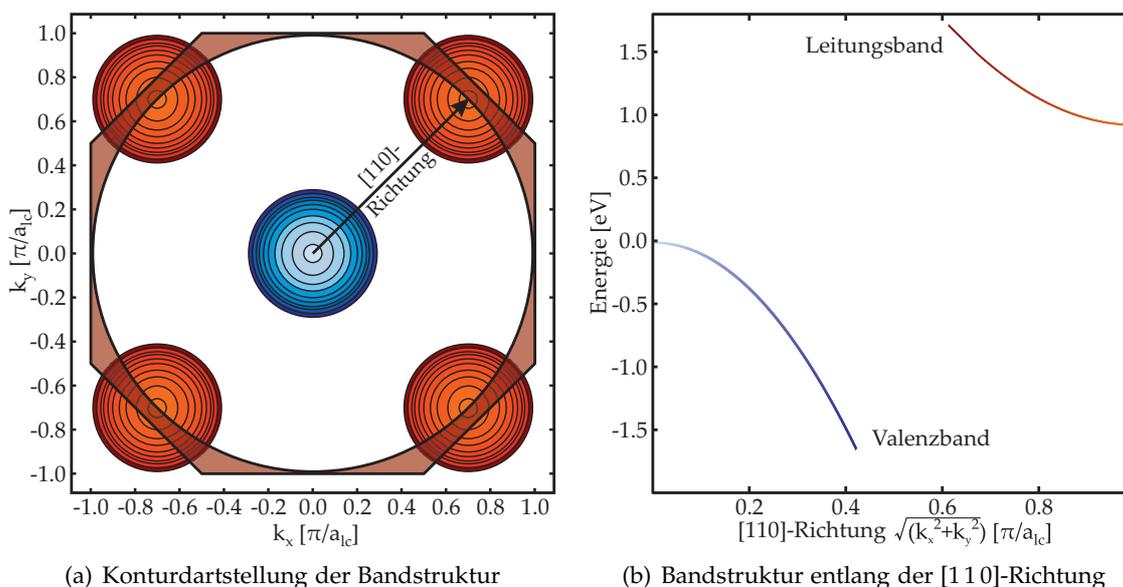
### 3.3.5. Einfluss anisotroper Bandstruktur

In der bisherigen Diskussion wurde stets eine rotationssymmetrische Bandstruktur angenommen. Doch diese Annahme ist in den meisten Halbleitern lediglich näherungsweise am  $\Gamma$ -Punkt zulässig. Betrachtet man die gesamte erste Brillouinzone, findet man verschiedene Minima und Maxima eines jeden Bandes. Für Silizium und Germanium sind, zum Vergleich, die Bandstrukturen in Abbildung 2.3 (a) und (b) gezeigt.

In diesem Abschnitt wird der Einfluss einer anisotropen Bandstruktur auf die lineare

Absorption im Bereich der indirekten Bandlücke diskutiert. Die vorherigen Ergebnisse zeigen, dass die Zustandsdichte für die phononassistierte Absorption von großer Bedeutung ist. Es ist daher zu erwarten, dass sich die Linienform unter Verwendung einer anisotropen Bandstruktur deutlich ändern wird.

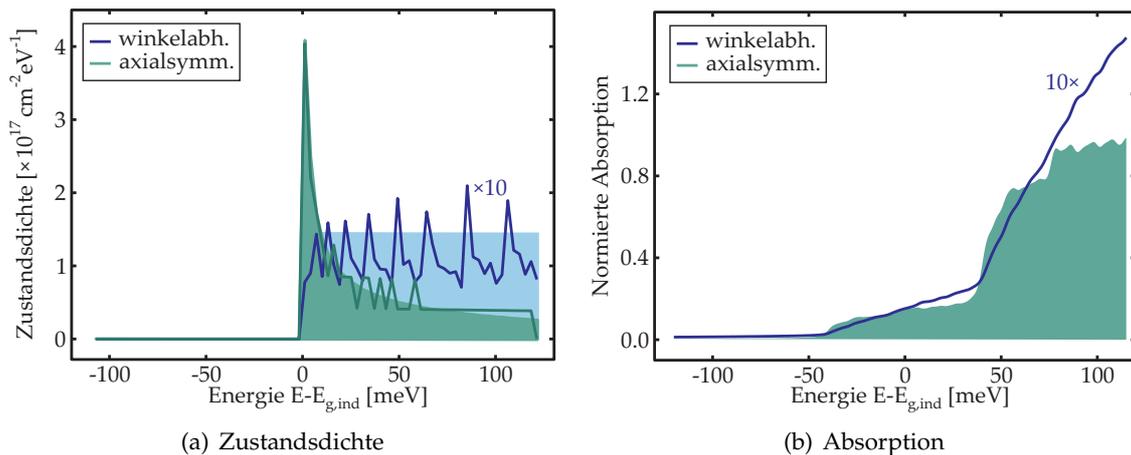
Der Einfachheit halber werden für die anisotrope Bandstruktur trotzdem verschiedene Symmetrien angenommen, damit der numerische Aufwand für die Berechnung gering und im Bereich des Machbaren bleibt. Das Valenzband am  $\Gamma$ -Punkt wird weiterhin als



**Abbildung 3.14.:** Winkelabhängige Bandstruktur (a) und Querschnitt entlang der [110]-Richtung unter Verwendung der Massen  $m_{v,\Gamma} = 0.132 m_0$  und  $m_{c,L} = 0.233 m_0$ . Die achteckige Brillouinzone wird bei der numerischen Berechnung durch einen Kreis mit Radius  $\pi/a_{lc}$  genähert.

rotationssymmetrisch und parabolisch bis zu einer Energie von  $-1.6\text{ eV}$  angenommen. Für tiefere Energien wird wie bisher die Energie als konstant betrachtet, da Zustände mit tieferer Energie die indirekte Absorption nicht weiter beeinflussen. Auch für das Leitungsband werden Paraboloiden, diesmal allerdings mit dem Minimum am  $L$ -Punkt angenommen. Die Bandstruktur besitzt im Zweidimensionalen hierdurch eine vierzählige Drehsymmetrie. Wie im Valenzband wird auch im Leitungsband ab einer bestimmten Energie, hier  $1.6\text{ eV}$ , eine konstante Energie angenommen, da Zustände mit höherer Energie nicht zur indirekten Absorption beitragen. Die effektiven Massen betragen im Valenzband  $m_{v,\Gamma} = 0.132 m_0$  und im Leitungsband  $m_{c,L} = 0.233 m_0$ . Die resultierende Bandstruktur ist in Abbildung 3.14 gezeigt. In (a) sind die Konturlinien des Leitungs- und Valenzbands dargestellt. Das Valenzband befindet sich im Zentrum der Brillouinzone, und die Äquipotentiallinien sind durch Blautöne gekennzeichnet. Die Leitungsbandminima befinden sich entlang der [110]-Richtung und die zugehörigen Äquipotentiallinien sind in Rottönen gehalten. Die achteckige Brillouinzone wird durch einen Kreis genähert, da sich der numerische Aufwand dadurch deutlich reduzieren lässt. Dabei unterschätzt man die Zustandsdichte am Rand der Brillouinzone leicht. Folgt man vom  $\Gamma$ -Punkt der [110]-Richtung, so erhält man die in Abbildung 3.14 (b) gezeigte Banddispersion. Um die Ergebnisse der winkelabhängigen Bandstruktur mit den bisherigen vergleichen zu können, wird eine Berechnung mit rotationssymmetrischer Bandstruktur, die die Form wie in Abbildung 3.14 (b) besitzt, ebenfalls winkelaufgelöst durchgeführt.

Eine quadratische Energiedispersion führt im zweidimensionalen Raum, wie in Kapitel 3.3.1 gezeigt, auf eine stufenförmige Zustandsdichte. Die paraboloidale Bandstruktur des Leitungsbandes führt demnach auch, wie in Abbildung 3.15 (a) gezeigt, zu einer kastenförmigen Funktion. Die deutlichen Abweichungen von der analytischen Zustandsdichte in Form von Oszillationen (ausgefüllte Fläche) rührt von der geringen Winkelauflösung her. Zum Vergleich ist die Zustandsdichte der rotationsymmetrischen Bandstruktur aufgetragen, welche der analytischen Lösung deutlich mehr gleicht, da sie nicht von der Winkelauflösung abhängt. Die anisotrope Zustandsdichte ist um ei-



**Abbildung 3.15.:** Zustandsdichte (a) und Absorption (b) unter winkelabhängiger Berechnung. In (a) sind als ausgefüllte Flächen zum Vergleich die analytischen Zustandsdichten aufgetragen.

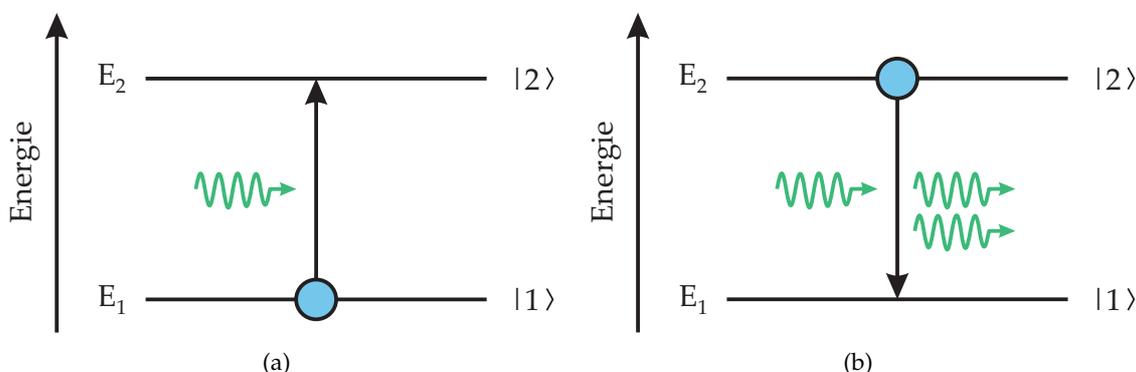
ne Größenordnung kleiner als die des winkelunabhängigen Falls, was sich auch in der Absorption in Abbildung 3.15 (b) widerspiegelt. Die Ergebnisse über die Proportionalität von Zustandsdichte und Absorption, wie sie in Kapitel 3.3.1 getroffen wurden, sind auch hier anwendbar. Neben der Stärke der Absorption ändert sich auch die Linienform. Der Wegfall des scharfen Maximums an der indirekten Bandlücke durch die Winkelabhängigkeit führt dazu, dass die Absorption wesentlich flacher ansteigt, was ebenfalls konsistent mit der Proportionalität zur Zustandsdichte ist.

Die Winkelauflösung der Bandstruktur ist notwendig, um eine korrekte Linienform und Stärke der Absorption zu erhalten. Die fundamentalen Aussagen und Zusammenhänge, welche für die Absorption unter Verwendung einer rotationsymmetrischen Bandstruktur getroffen wurden, ändern sich allerdings hierdurch nicht und lassen sich direkt übertragen.

### 3.4. Phononassistierter Gewinn

Wie bereits im Kapitel über die lineare Absorption 3.3 diskutiert, verhalten sich die indirekten Übergänge fundamental verschieden von den direkten Übergängen. Das asymmetrische Verhalten in der Absorption überträgt sich auch auf den optischen Gewinn. Die Abbildung 3.17 zeigt die Absorption des Modellhalbleiters für Ladungsträgerdichten zwischen  $0.0001 \cdot 10^{12}$  und  $2.6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Hierbei wurde eine Phononenergie von 40 meV und eine Temperatur von 300 K verwendet.

Mit steigender Ladungsträgerdichte bleichen die Übergänge aus, und ab einer bestimmten Dichte wechselt das Vorzeichen der Absorption und wird negativ. Negative Absorption bedeutet optische Verstärkung bzw. optischer Gewinn. Die Ladungsträgerdichte, zu der die Absorption ihr Vorzeichen wechselt, wird Transparenzdichte genannt, da bei einer Absorption von Null das Material transparent ist. Um das Verhalten des opti-

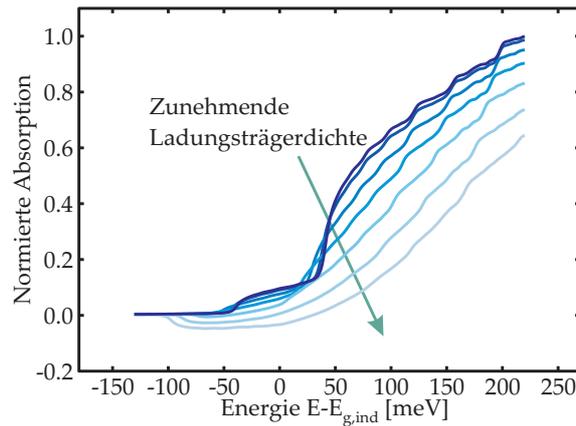


**Abbildung 3.16.:** Schematische Darstellung eines Zweiniveausystems. Ist der Zustand  $|1\rangle$  besetzt (a), kann ein Photon absorbiert werden, wohingegen bei Besetzung des Zustands  $|2\rangle$  (b) ein Photon die Emission eines weiteren Photons stimulieren kann.

schen Gewinns im indirekten Halbleiter zu verstehen, wird kurz an die Eigenschaften optischer Verstärkung für direkte Übergänge erinnert. Man betrachte ein Zweiniveausystem bestehend aus einem Ensemble der Zustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ , wobei die Energie des Zustands  $|2\rangle$  größer ist als die von  $|1\rangle$ . Die zugehörige schematische Darstellung ist in Abbildung 3.16 gezeigt. Ein solches Modell genügt bereits, um das Verhalten eines Gaslasers in Grundzügen zu verstehen. Die Transparenzdichte in diesem Zweiniveausystem ist genau dann erreicht, wenn gleichviele Teilchen sich im Zustand  $|1\rangle$  wie im Zustand  $|2\rangle$  befinden, da dann genau so viele Photonen durch stimulierte Emission erzeugt wie absorbiert werden. Im Fall einer Ladungsträgerinversion, zu der also mehr Teilchen den Zustand  $|2\rangle$  besetzen, wird optische Verstärkung erreicht, da hier die stimulierte Emission größer ist als die Absorption. Ein Laser mit einem direkten Übergang benötigt also immer eine Ladungsträgerinversion, um Licht zu verstärken. In Analogie zu diesem Zweiniveausystem verhält sich auch der direkte Halbleiterlaser. Statt einem System beschränkter Zustände müssen hier quasikontinuierliche Bandzustände betrachtet werden, weshalb die Anzahl der Ladungsträger keine geeignete Größe mehr darstellt, sondern die Besetzung der Bänder, die durch das chemische Potential charakterisiert wird. Die Ladungsträgerinversion ist, in einem Zweibandmodell gedacht, nicht durch den Zustand gegeben, in dem sich mehr als die Hälfte der Ladungsträger im Leitungsband befinden, sondern durch den Zustand, in dem sich das chemische Potential der Verteilungsfunktionen in das Leitungsband verschiebt, welches im nichtangeregten Zustand innerhalb der Bandlücke liegt.

Betrachtet man die Abbildung 3.17 genauer, so stellt man fest, dass zum einen beide Übergänge stark rotverschoben, was durch die Coulomb-Wechselwirkung unter hohen Ladungsträgerdichten verursacht wird, und zum anderen, dass sich der Punkt der Ladungsträgerinversion der beiden Übergänge unterscheidet. Der Fall optischer Verstärkung tritt für den energetisch niedrigeren Übergang bei geringeren Ladungsträgerdichten ein als für den energetisch höhere Übergang. Dies ist zunächst nichts ungewöhnliches, da sich in direkten Halbleitern die optische Verstärkung höherer Übergän-

ge analog verhält. Für den Fall hoher Ladungsträgerdichten ist die maximale optische Verstärkung des energetisch niedrigeren Übergangs betragsmäßig aber deutlich größer als die maximale Absorption, wohingegen der energetisch höhere Übergang sich genau andersherum verhält. Ferner ist das Verhältnis der beiden Übergänge zueinander im Falle hoher Ladungsträgerdichten umgedreht zum dichtefreien Fall. In diesem Punkt weicht das Verhalten der indirekten optischen Verstärkung deutlich von dem der direkter Halbleiter ab. Im direkten Halbleiter übertrifft die optische Verstärkung eines Übergangs für keine Ladungsträgerdichte betragsmäßig die maximale Absorption des gleichen Übergangs. Im direkten Halbleiter ist der Inversionspunkt dadurch gegeben,



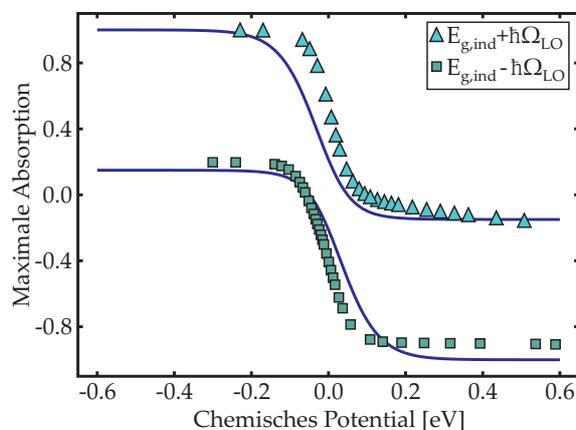
**Abbildung 3.17.:** Absorption des Modellsystems bei den Ladungsträgerdichten  $d = 0.0001, 0.05, 0.2, 0.6, 1.0, 1.8$  und  $2.6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  bei 300 K und einer Phononenergie von 40 meV.

dass das chemische Potential der Bandlücke entspricht. Trupke et al. deuten dies so, dass das chemische Potential gerade der Energie des direkten optischen Übergangs entspricht. Der indirekte Halbleiter unterscheidet sich dahin gehend nicht vom direkten, da auch hier die Inversion stattfindet, wenn das chemische Potential der Energie des Übergangs entspricht [72]. Dieser Punkt ist jedoch für den energetisch niedrigeren Übergang deutlich früher erreicht als für den energetisch höheren, da das chemische Potential die Bedingung  $\mu = E_{g,\text{ind}} - \hbar\Omega_{LO}$  erfüllen muss. Hierdurch ist ersichtlich, dass die Bedingung für optischen Gewinn erfüllt wird, bevor eine Ladungsträgerinversion ( $\mu = E_{c,g,\text{ind}}$ ) vorliegt. In dem oben erwähnten Zweiniveausystem veranschaulicht, bedeutet dies, dass es zu optischer Verstärkung kommen kann, obwohl die Besetzung des Zustands  $|2\rangle$  geringer ist als die des Zustands  $|1\rangle$ .

In einem indirekten Halbleiter sind die chemischen Potentiale in der Regel stark verschieden, denn das Maximum des Valenzbands liegt meist am  $\Gamma$ -Punkt und das Minimum des Leitungsbands beispielsweise am  $X$ - oder  $L$ -Punkt, den es dann vier oder sechs Mal innerhalb der Brillouinzone gibt. Dadurch ergibt sich ein deutlich geringeres chemisches Potential der Leitungsbandelektronen, und es ist nach dem Ratengleichungsmodell nicht klar, wie sich die indirekten Übergänge dabei verhalten werden, da hierbei die Gültigkeit der Ratengleichungen überschritten wird. Die mikroskopische Theorie funktioniert allerdings für beliebige Bandstrukturen und kann somit diese Frage beantworten.

Die Annahme, dass das Deformationspotential der Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Leitungsband verschwindet, führt dazu, dass sich die phononassistierten Größen  $F_{i,j,\mathbf{k}_{\parallel},\varphi}^{\pm}$  und  $G_{i,j,\mathbf{k}_{\parallel},\varphi}^{\pm}$  aufteilen lassen in Funktionen, die entweder von der Loch- oder von

der Elektronverteilung abhängen. Die Aufteilung erfolgt so, dass der energetisch niedrigere indirekte Übergang durch die Elektron- und der energetisch höhere Übergang durch die Lochbesetzung bestimmt wird.



**Abbildung 3.18.:** Maximale Absorption der beiden indirekten Übergänge als Funktion des chemischen Potentials. Der energetische höhere Übergang hängt vom chemischen Potential der Löcher am  $\Gamma$ -Punkt und der energetisch niedrigere von dem der Elektronen am Rand der Brillouinzone ab.

Die Abbildung 3.18 zeigt den maximalen optischen Gewinn der beiden indirekten Übergänge für verschiedene chemische Potentiale. Der energetisch höhere Übergang (türkise Dreiecke) ist gegen das chemische Potential der Löcher im Valenzband aufgetragen und der energetisch niedrigere Übergang (grüne Quadrate) gegen das chemische Potential der Elektronen. Die Quadrate und Dreiecke repräsentieren die Ergebnisse der mikroskopischen Rechnung und die durchgezogenen Linien die des Ratenmodells. Die Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Die Abweichungen der mikroskopischen Theorie zum Ratenmodell haben verschiedene Ursachen. Durch die phänomenologische Behandlung der Dephasierung der Polarisation wird der direkte Übergang durch eine Lorentz-Funktion genähert, die einen sehr langsam abfallenden niederenergetischen Ausläufer besitzt. Hierdurch entsteht ein Untergrund, der dafür sorgt, dass die Absorption leicht überschätzt wird, was durch die zeitliche Auflösung bei der Berechnung verstärkt wird. Ein zweiter Grund ist, dass obwohl die Quellterme vollständig in Terme zerfallen, die entweder von der Elektron- oder der Lochdichte abhängen, es trotzdem in den Halbleiter-Bloch-Gleichungen und in dem Licht-Materie-Term der phononassistierten Gleichungen Abhängigkeiten von der jeweils andern Ladungsträgerdichte gibt. Dies führt dazu, dass der maximale Gewinn des energetisch höheren Übergangs bei der mikroskopischen Rechnung nicht so früh wie im Ratenmodell sättigt.



## 4. Nichtgleichgewichtseigenschaften von Ge/SiGe-Quantenfilmheterostrukturen

In den vorangegangenen Betrachtungen wurde für die Ladungsträgerverteilung stets ein thermisches Gleichgewicht angenommen. In diesem Teil werden die Folgen von nicht-thermischen Verteilungen am Beispiel des Ge/SiGe-Materialsystems diskutiert. Das Besondere an diesem Materialsystem ist die Existenz eines Leitungsbandminimums in Zentrum und weiteren Minima am Rand der ersten Brillouinzone. Das erste befindet sich am  $\Gamma$ -Punkt, an welchem sich auch ein Maximum des Valenzband befindet, und das zweite, welches auch das globale Minimum des Leitungsbands bildet, am  $L$ -Punkt, also beispielsweise in der  $[1\ 1\ 1]$ -Richtung.

Anhand von experimentellen Daten, die in der Gruppe von Prof. Dr. W. W. Rühle und PD Dr. S. Chatterjee an der Philipps-Universität Marburg durchgeführt wurden, werden zwei Formen von Nichtgleichgewichtseffekten diskutiert. Die erste Form ist das schnelle phononassistierte Streuen von Elektronen vom  $\Gamma$ -Punkt in das energetisch niedrigere  $L$ -Tal. Dieser Effekt findet auf einer sehr kurzen Zeitskala unmittelbar nach einer optischen Anregung statt und führt letztlich dazu, dass ein Ge/SiGe-Quantenfilm optische Verstärkung nur innerhalb der ersten 50 – 100 fs zeigt. Der zweite Effekt findet auf einer deutlich langsameren Zeitskala statt. Durch die Streuung der Elektronen in das  $L$ -Tal heizen sich die Ladungsträger sehr stark auf. Durch nahezu vollständige Trennung der Elektronen und Löcher innerhalb des reziproken Raumes kann man das Abkühlen des Lochsystems unabhängig von dem der Elektronen betrachten. Dieses Abkühlen findet zuerst durch optische und auf einer deutlich längeren Zeitskala durch akustische Phononen statt.

Die typische Methode zur Berechnung der Intervalley-Streuung von Ladungsträgern stellt die Monte-Carlo-Simulation dar [59, 83]. In dieser Arbeit wird der Zugang über die Bewegungsgleichungen verfolgt, welcher einen alternativen Zugang bietet.

### 4.1. Probenstruktur und Materialparameter

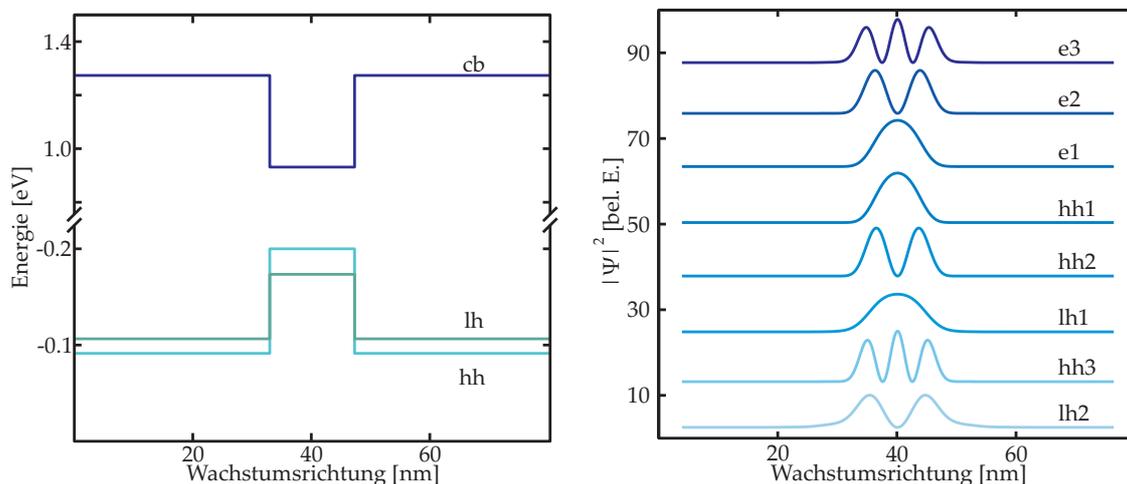
Bei der untersuchten Probe handelt es sich um eine Ge/SiGe-Quantenfilmheterostruktur. Sie wurde mittels einer besonderen Form chemischer Gasphasenepitaxie auf einem Siliziumwafer in  $(100)$ -Richtung hergestellt. Alle Details zum Wachstum der Probe und der Wachstumsmethode allgemein können [84, 85] entnommen werden. In Abbildung 4.1 ist eine schematische Darstellung der verschiedenen Schichten der untersuchten Probe gezeigt. Auf den Siliziumwafer wird zunächst eine Schicht  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  mit linear steigendem Germaniumgehalt bis  $x = 0.9$  aufgebracht. Im Anschluss wird eine vollständig relaxierte Schicht  $\text{Si}_{0.1}\text{Ge}_{0.9}$  aufgebracht. Diese Schicht bildet dann ein virtuelles Substrat für alle darauf folgenden Schichten. Dies bedeutet, dass alle weiteren Schichten bezüglich der Gitterkonstante des virtuellen Substrates verspannt sind. Es folgen

die 19.8 nm dicken Barrieren aus  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  und die 14.3 nm dicken Ge-Quantenfilme. Diese zwei Schichten werden alternierend 50 mal auf das virtuelle Substrat aufgebracht.



Abbildung 4.1.: Schematische Darstellung der untersuchten Ge/SiGe-Probe.

Aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten von Ge und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  ist der Quantenfilm kompressiv und die Barriere tensil verspannt. Dies führt zu einer Aufspaltung des Schwer- und Leichtlochbandes, was in Abbildung 4.2 (a) gezeigt ist. Das Einschlusspotential bildet sich durch die unterschiedlichen Bandlücken und einem Leitungsbandversatz von ca. 200 meV zwischen den Energieniveaus der beiden Materialien, welcher [86, 87] entnommen wurde. Durch die unterschiedlichen Verspannungen liegt in der Barriere das Leichtloch-energetisch über dem Schwerlochband wohin gegen die Situation im Quantenfilm umgekehrt ist. Unterschiedliche effektive Massen führen in Quantenfilmen stets zu einer Aufspaltung von Schwer- und Leichtlochband. Die verspannungsbedingte Verstärkung der Aufspaltung der beiden Lochbänder führt zu einer höheren Besetzung des Schwerlochbandes am  $\Gamma$ -Punkt, was die optische Verstärkung begünstigt.



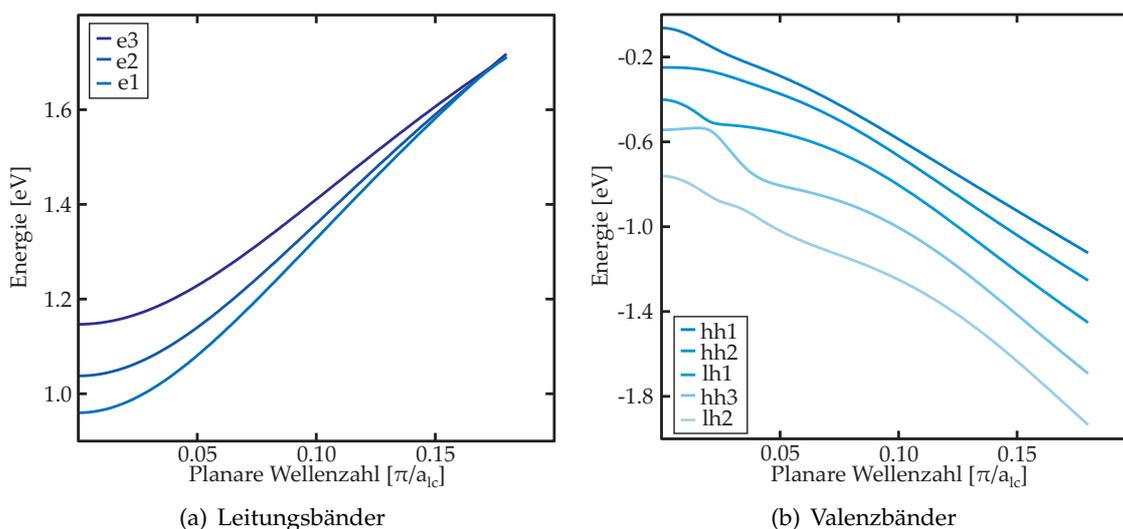
(a) Confinementpotential im Bereich des energetisch höchsten Valenz- und niedrigsten Leitungsbandes.

(b) Betragsquadrat des dominanten Anteils der  $\Gamma$ -Punkt-Wellenfunktionen der Valenz- und Leitungsbander.

Abbildung 4.2.: Elektronische Eigenschaften des verspannten  $\text{Ge}/\text{Si}_{0.15}\text{Ge}_{0.85}$ -Quantenfilms am  $\Gamma$ -Punkt. Die unteren fünf Wellenfunktionen in (b) repräsentieren die Valenz- und die oberen drei die Leitungsbandzustände. Der Versatz zwischen den Zuständen dient der besseren Darstellung.

Durch das Confinementpotential erhält man im Quantenfilm eine bestimmte Anzahl lokalisierter Zustände, welche in Abbildung 4.2 (b) gezeigt sind. Im Volumenhalbleiter sind die Zustände am  $\Gamma$ -Punkt noch reine Elektron- beziehungsweise Schwerloch- oder Leichtlochzustände, wohingegen man im Quantenfilm bereits bei  $k_{\parallel} = 0$  gemischte Zustände erhält. Dennoch verwenden wir der Einfachheit halber eine Einteilung der Zustände in den Volumenhalbleiterbändern, wobei die Zustände nach ihrem maximalen Anteil unterteilt werden. Für die gegebene Struktur erhält man demnach drei Elektron-, drei Schwer- und zwei Leichtlochsubbänder. Die zugehörigen dominanten Anteile des Betragsquadrats der  $\Gamma$ -Punkt-Wellenfunktionen sind in der Abbildung 4.2 (b) gezeigt.

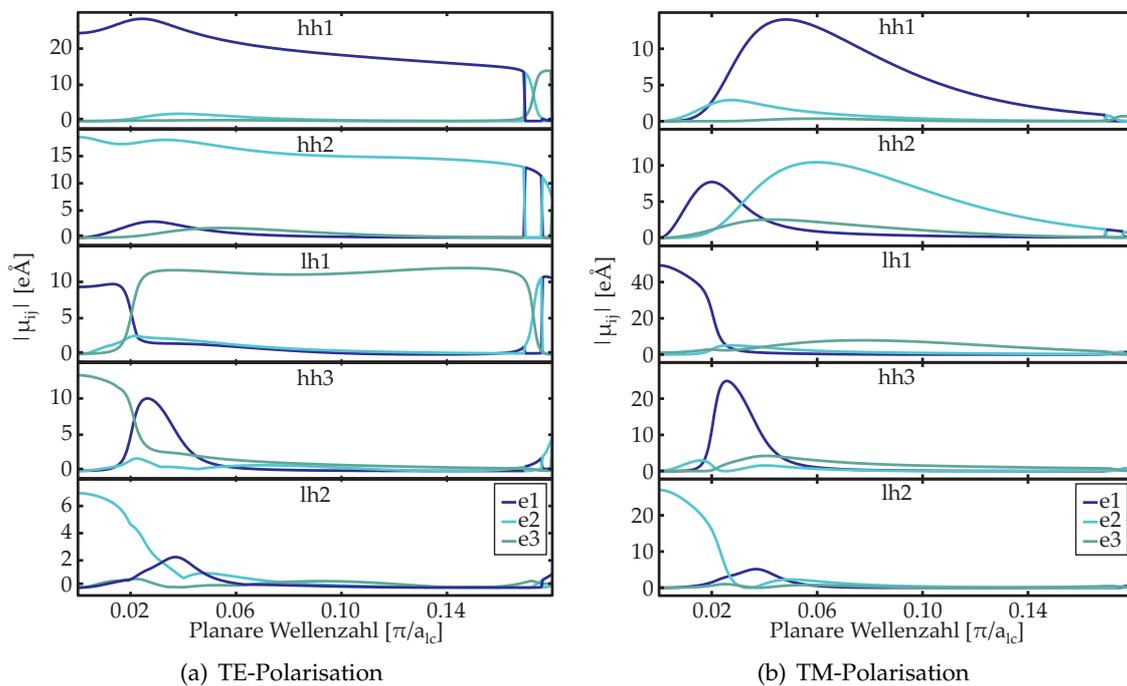
Die elektronischen Eigenschaften wurden mit der  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur-Methode aus Kapitel 2.1.1.2 berechnet und mit den Ergebnissen aus den Referenzen [86, 87] abgeglichen, in denen eine 6-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie für die Berechnung der  $\Gamma$ -Punkteigenschaften verwendet wurde. Die resultierende Bandstruktur am  $\Gamma$ -Punkt in [1 1 0]-Richtung ist in Abbildung 4.3 (a) für die Leitungs- und in (b) für die Valenzbänder gezeigt. Es wurde in den Abbildungen darauf verzichtet, die ungebundenen Volumenlösungen zu zeigen. Für die Leitungsbander erhält man ein weitestgehend parabelförmiges Verhalten. Die Valenzbänder zeigen ein deutlich komplexeres Verhalten, wobei es unter anderem zu Bandkreuzungen und Abstoßungen kommt.



**Abbildung 4.3.:** Bandstruktur des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms um den  $\Gamma$ -Punkt in [1 1 0]-Richtung. Die Nullpunktenergie entspricht dem Valenzbandmaximum Germaniums.

Mithilfe der  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie lassen sich auch die  $\mathbf{k}$ -abhängigen Dipolmatrixelemente berechnen. Da es eine relativ starke Abhängigkeit dieser optischen Matrixelemente von der Wellenzahl gibt, ist deren Betrachtung sehr wichtig, um die korrekte Wichtung der Übergänge über einen großen Energiebereich zu erhalten. Die Dipolmatrixelemente des Quantenfilms in der TE-Polarisation und in der TM-Polarisation, ebenfalls in [1 1 0]-Richtung, sind in Abbildung 4.4 gezeigt. Um die Bedeutung der  $k_{\parallel}$ -abhängigen Dipolmatrixelementen etwas hervorzuheben, werden exemplarisch die Übergänge des ersten Schwerlochsubbands mit den Elektronsubbändern diskutiert. Aufgrund der Symmetrie der Zustände am  $\Gamma$ -Punkt ist der Dipolübergang hh1-e2 verboten. Für steigende  $k_{\parallel}$ -Werte sieht man allerdings, dass diese Auswahlregel nicht mehr gilt, da die Wellenfunktion ihren dominanten Schwerlochanteil nach und nach verliert und es größere Bei-

träge vom Leichtloch, Spin-Bahn-abgespaltenem Loch und den Leitungsbändern gibt. Der Einfluss dieser Abhängigkeit macht sich in berechneten Absorptionsspektren beson-

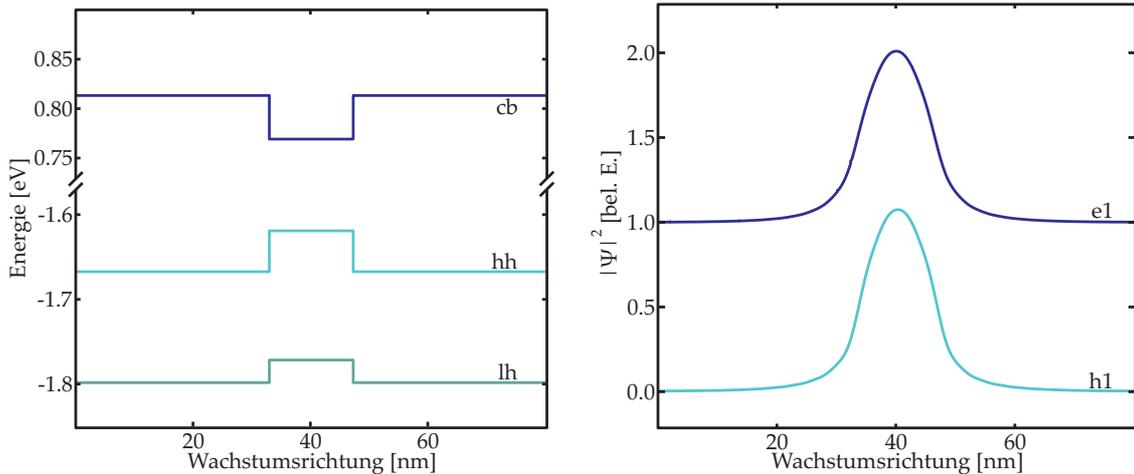


**Abbildung 4.4.:** Dipolmatrixelemente des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms um den  $\Gamma$ -Punkt in [1 1 0]-Richtung.

ders in den Kontinuumszuständen bemerkbar. Verwendet man lediglich eine Effektive-Masse-Theorie für die Bandstruktur, so unterschätzt man häufig die Absorption innerhalb des Kontinuums. Wie sich später zeigen wird, liegt die Stärke eines solchen Modells für die Bandstruktur in der leichteren Anpassbarkeit der Parameter.

Ein wichtiger Vorteil der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie gegenüber denen mit geringerer Anzahl von Bändern ist der, dass man die Bandstruktur über der gesamten ersten Brillouinzone ausrechnen kann. Da das Leitungsbandminimum von Germanium am  $L$ -Punkt liegt, werden die Eigenschaften des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms dort diskutiert.

Aufgrund des Leitungsbandversatzes zwischen Silizium und Germanium entsteht – wie auch am  $\Gamma$ -Punkt – ein Confinement der Elektronen am  $L$ -Punkt. Da hier die Schwer- und Leichtlochzustände bei ca.  $-1.6$  eV liegen, spielen sie für die in Kapitel 4.2 beobachteten Effekte keine entscheidende Rolle. Das resultierende Confinementpotential am  $L$ -Punkt ist in Abbildung 4.5 (a) gezeigt. Der Potentialtopf fällt hier deutlich kleiner aus als am  $\Gamma$ -Punkt, was auf die indirekte Bandlücke des Siliziums zurückzuführen ist, die am  $L$ -Punkt der von Germanium ähnlicher ist als im Zentrum der ersten Brillouinzone. Man erhält bereits für das Germaniumvolumenmaterial am  $L$ -Punkt eine starke Aufspaltung zwischen Leicht- und Schwerlochband von ca. 150 meV, sodass die Leichtlochsubbänder komplett vernachlässigt werden können. Der dominante Anteil der Wellenfunktionen ist erneut als Betragsquadrat in Abbildung 4.5 (b) gezeigt. Dass diese hier deutlich kleiner als die der  $\Gamma$ -Punkt-Wellenfunktionen sind, liegt daran, dass die Bänder am  $L$ -Punkt nicht mehr näherungsweise als reiner Volumenhalbleiterzustand bezeichnet werden können, sondern einen Mischzustand aus allen Volumenbändern bilden.

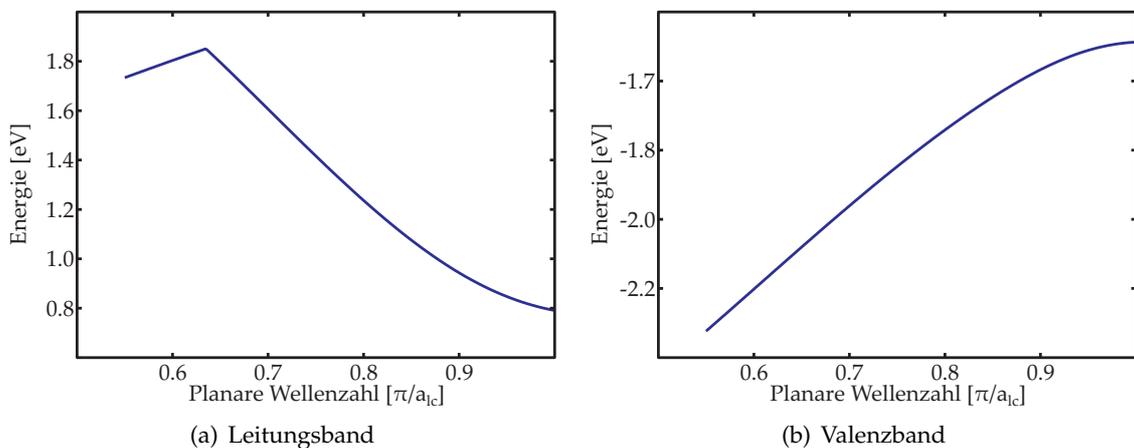


(a) Confinementpotential im Bereich des energetisch höchsten Valenz- und niedrigsten Leitungsband.

(b) Betragsquadrat des dominanten Anteils der L-Punkt-Wellenfunktionen der Valenz- und Leitungsbander.

**Abbildung 4.5.:** Elektronische Eigenschaften des verspannten Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms am L-Punkt. Der Versatz zwischen den Wellenfunktionen dient nur der besseren Darstellung.

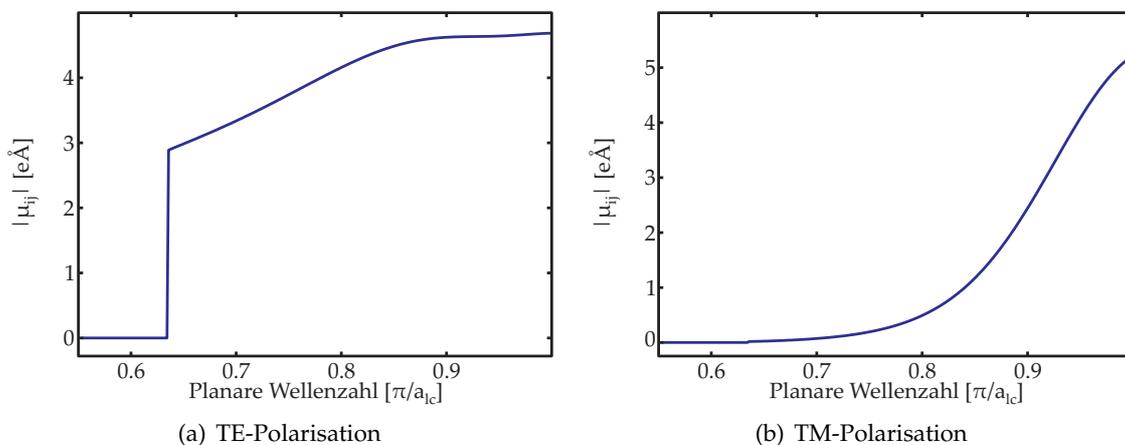
Durch das geringere Confinement erhält man am L-Punkt lediglich ein Elektronenband. Alle höheren Subbänder sind nicht mehr innerhalb des Quantenfilms lokalisiert und verhalten sich dadurch wie Zustände eines Volumenmaterials. Das Maximum des Leitungsbandes liegt, wie beim dreidimensionalen Germaniumkristall, in der Nähe von 2 eV. Die Bandstruktur ist in Abbildung 4.6 gezeigt.



**Abbildung 4.6.:** Bandstruktur des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms um den L-Punkt in [1 1 0]-Richtung. Die Nullpunktenergie entspricht dem Valenzbandmaximum aus dreidimensionalem Germanium.

Auch am L-Punkt lassen sich die  $\mathbf{k}_{\parallel}$ -abhängigen Dipolmatrixelemente berechnen, welche in der Abbildung 4.7 für die TE- (a) und für die TM-Polarisation (b) in der [1 1 0]-Richtung gezeigt sind. In der TM-Polarisation wird das Dipolmatrixelement mit kleiner werdendem  $\mathbf{k}_{\parallel}$  monoton kleiner, bis der Übergang dipolverboten wird. Dieses Ergebnis ist konsistent mit den Dipolmatrixelementen im Bereich des  $\Gamma$ -Punktes aus Abbil-

derung 4.4 (b), die ebenfalls zur Mitte der Brillouinzone in [1 1 0]-Richtung verschwinden. In der TE-Polarisation fällt das Dipolmatrixelement ebenfalls zur Mitte der ersten Brillouinzone hin ab, zunächst deutlich langsamer als in der TM-Polarisation, zum Schluss dann allerdings sprunghaft. Dieser Sprung liegt vermutlich an einem Kreuzen mit anderen Subbändern in der Mitte der Brillouinzone, wie es ebenfalls schon bei den  $\Gamma$ -Punkt-Matrixelementen der Fall war. In diesem Bereich der Brillouinzone wechselt vermutlich die Zahl der gebundenen Elektronsubbänder, was auch das starke Abknicken der Bandstruktur erklären würde. Des Weiteren ist die Konvergenz der gesamten  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie in diesem Bereich relativ gering, da die Wellenfunktionen weder der Form der  $\Gamma$ - noch der  $L$ -Punktswellenfunktionen genügen. Für die weitere Betrachtung ist dieser Fakt nicht weiter von Bedeutung, da die Energien der Subbänder sehr weit von der Bandlücke entfernt sind, an der sich die im Folgenden diskutierten Effekte abspielen.



**Abbildung 4.7.:** Dipolmatrixelemente des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms um den  $L$ -Punkt entlang der [1 1 0]-Richtung.

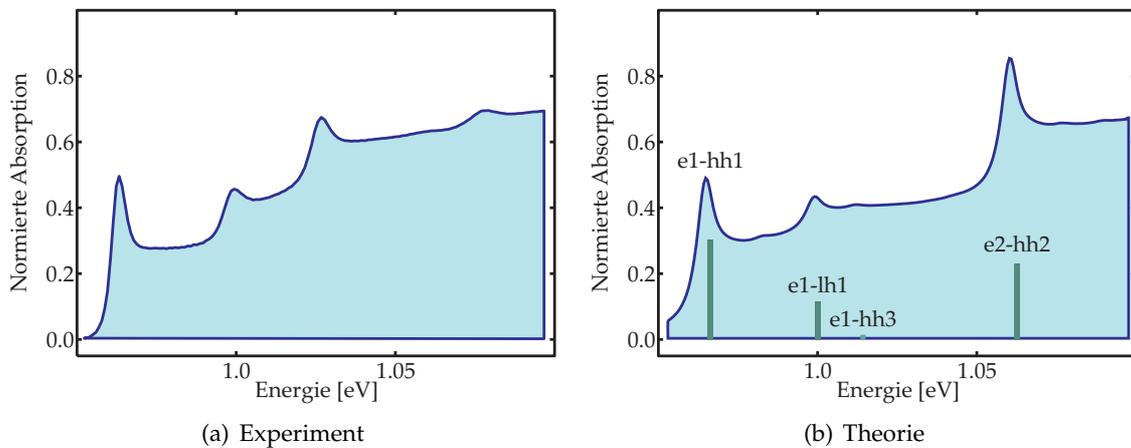
## 4.2. Experimentelles Vorgehen

Alle Experimente an der in Kapitel 4.1 vorgestellten Probe wurden in der Gruppe von Prof. Dr. W. W. Rühle und PD Dr. S. Chatterjee an der Philipps-Universität Marburg durchgeführt. Hierbei konnte der gleiche Versuchsaufbau für die beiden hier diskutierten Experimente verwendet werden.

Die *lineare Absorption* wurde in einer Standardtransmissionsgeometrie unter Verwendung einer Wolframlampe gemessen. Um das Signal zu detektieren wurde ein Spektrometer, bestehend aus einer Matrix gekühlter (InGa)As-Photodioden, verwendet. Lineare Absorption bedeutet in diesem Kontext, dass die Probe weder optisch noch elektrisch stark angeregt wurde und in der Probe das Valenzband fast vollständig gefüllt und das Leitungsband fast vollständig leer ist.

Das gemessene lineare Absorptionsspektrum des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms bei  $T = 10$  K ist in Abbildung 4.8 (a) gezeigt. In dem ausgewählten Energiebereich sind die energetisch niedrigsten Intersubbandübergänge am  $\Gamma$ -Punkt anhand ihrer deutlichen exzitonischen Resonanz zu erkennen. Das lineare Absorptionsspektrum eignet sich hervor-

ragend für die Probencharakterisierung, da nicht nur der niedrigste Intersubbandübergang, sondern auch höhere Übergänge zu erkennen sind.



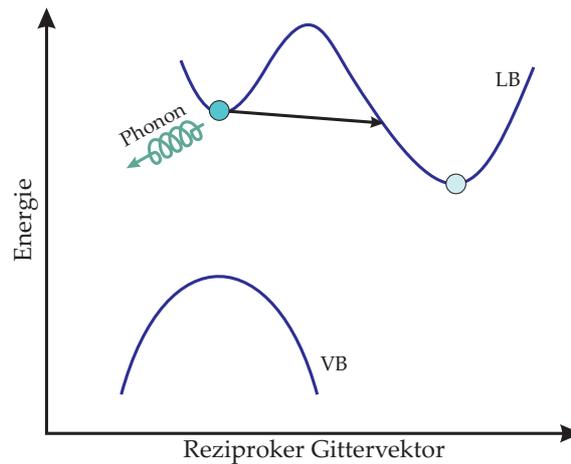
**Abbildung 4.8.:** (a) Gemessenes und (b) berechnetes Absorptionsspektrum des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms bei  $T = 10$  K.

Die Abbildung 4.8 (b) zeigt das berechnete Absorptionsspektrum unter Verwendung der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstrukturrechnung. Man erhält mit den im Anhang B angegebenen Parametern eine sehr gute Übereinstimmung der ersten Übergänge. Höhere Übergänge reagieren sehr sensibel auf die  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Parameter, und geringe Änderungen führen somit leicht zu Abweichungen. So erhält man, wie in Referenz [86], eine zu große Energie der höheren Übergänge. Die Balken in der Abbildung 4.8 (b) repräsentieren das Betragsquadrat der Dipolmatrixelemente der jeweiligen Übergängen bei  $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$  und sind an der Energie des Intersubbandübergangs im Einteilchenmodell aufgetragen. Die Energiedifferenz zwischen der Einteilchenenergie und dem tatsächlichen Übergang wird durch die Coulomb-Wechselwirkung verursacht.

### 4.3. Intervalley-Streuung von Elektronen

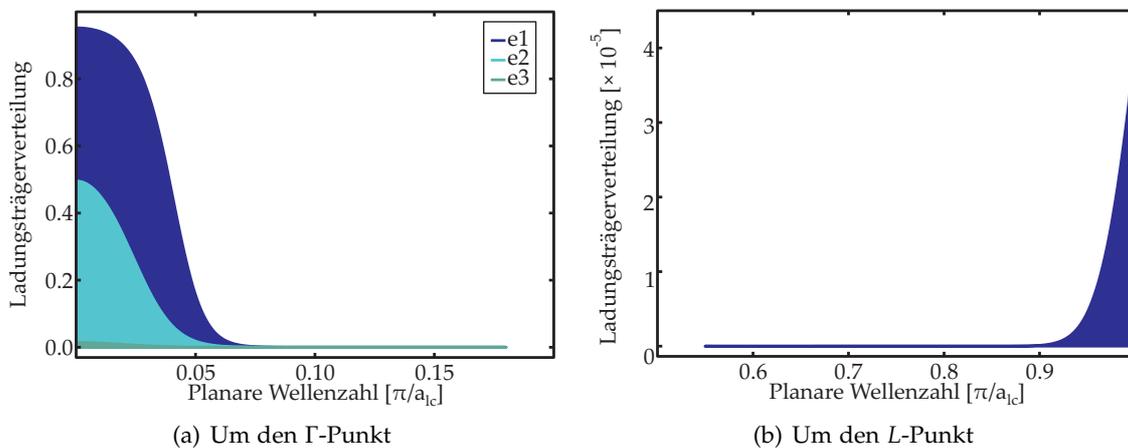
Erzeugt man eine Besetzung des Leitungsbandes im Bereich des  $\Gamma$ -Punkts innerhalb eines Ge/SiGe-Quantenfilms, so befinden sich diese Ladungsträger nicht im Gleichgewicht, da sich an diesem Punkt der ersten Brillouinzone nur ein lokales Minimum befindet. Durch die Intervalley-Deformationspotentialstreuung (s. Kapitel 2.1.3.2) bewegen sich die Elektronen allerdings in das globale Minimum am  $L$ -Punkt. In diesem Kapitel wird diese Elektron-Phonon-Streuung auf zwei Wegen berechnet und der Einfluss verschiedener Parameter auf die Streuzeit diskutiert. In beiden Fällen werden die phononassistenten Gleichungen, einmal in Markov-Näherung und das andere Mal unter Berücksichtigung der Gedächtniseffekte, gelöst.

Eine schematische Darstellung des Intervalley-Streuprozesses ist in Abbildung 4.9 gezeigt. Durch optische Anregung kann ein Elektron am  $\Gamma$ -Punkt erzeugt werden. Da es sich dort nicht im globalen Minimum des Leitungsbandes befindet, kann es durch die Emission (oder aber auch Absorption) eines Phonons an den Rand der Brillouinzone streuen.



**Abbildung 4.9.:** Schematische Darstellung der Intervalley-Streuung vom  $\Gamma$ -Punkt über die Erzeugung eines Phonons zum  $L$ -Punkt in Germanium

Die Intervalley-Deformationspotentiale sind nicht exakt bekannt, da sie experimentell schwer zugänglich sind und zusätzlich stark vom Bandindex, der Temperatur und der Richtung abhängen. Des Weiteren hängen die hier diskutierten Prozesse noch von der ebenfalls nicht exakt bekannten Phonon-Kohärenzlänge ab, welche im Produkt mit dem Deformationspotential auftauchen. Es soll hier keine Aussage über die Größe dieses Parameters getroffen werden. Ziel dieses Kapitels ist es, auf der einen Seite den Einfluss dieses Parameters auf die Streuzeit zu untersuchen und auf der anderen Seite den Einfluss von Gedächtniseffekten bei dieser Form der Elektron-Phonon Streuung zu untersuchen.



**Abbildung 4.10.:** Startverteilung der Ladungsträger für die drei Elektronsubbänder im Bereich des  $\Gamma$ -Punkts (a) und des  $L$ -Punkts (b) bei  $T = 300$  K

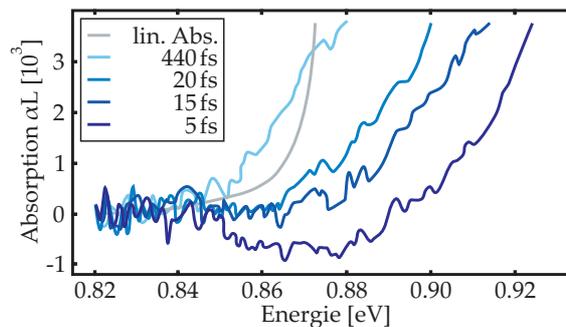
Als Anfangsbedingung für die Berechnung der Streuzeit ist, dass alle Ladungsträger zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Bereich des  $\Gamma$ -Punkts sind und sich in einem thermischen Gleichgewicht befinden. Die Ladungsträgerverteilung über dem reziproken Raum ist Abbildung 4.10 gezeigt. Bei der Berechnung werden die drei Elektronsubbänder am  $\Gamma$ - und das Elektronsubband am  $L$ -Punkt betrachtet. Die Löcher befinden sich zum Zeitpunkt  $t = 0$  ebenfalls in der Umgebung des  $\Gamma$ -Punkts. Da aber sie sich dort bereits im globalen Maximum des Valenzbandes befinden, wird deren Dynamik im Folgenden

nicht weiter diskutiert. Sie verweilen im thermischen Gleichgewicht, da keine Elektron-Loch-Streuungen implementiert wurden.

Streut ein Ladungsträger vom  $\Gamma$ -Punkt in das  $L$ -Tal, so besitzt er weiterhin eine überschüssige Energie von ca.  $180 \text{ meV} \pm \hbar\Omega_{LO}$ , je nachdem ob der Streuprozess durch die Emission (-) oder Absorption (+) eines Phonons zustande kam. Des Weiteren bildet sich eine hohe Ladungsträgerbesetzung bei diesen Energien im reziproken Raum im  $L$ -Tal aus. Die Elektronen verweilen allerdings nicht lange an diesem Punkt, sondern sie relaxieren in eine thermische Gleichgewichtsverteilung. Dieser Prozess des Equilibrierens wird durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung erzeugt, weshalb hierbei die Energie- und Ladungsträgererhaltung nach den Gleichungen (2.76) und (2.77) gelten muss. Dieser Relaxationsprozess wurde in dieser Arbeit phänomenologisch behandelt und durch eine Relaxationszeit von 50 fs modelliert. Aufgrund des Energieüberschusses heizt sich das elektronischen Ladungsträgersystem sehr stark auf. Dadurch steht das Ladungsträgersystem nicht mehr im thermischen Gleichgewicht mit dem Gitter. Durch die Streuung der Elektronen mit Phononen geht es dann auf einer größeren Zeitskala wieder in eine thermische Gleichgewichtsfunktion mit der Gittertemperatur über. Diese Form des Ladungsträgerabkühlens wird in Kapitel 4.4 für das Lochsystem im Vergleich mit experimentellen Daten diskutiert.

#### 4.3.1. Experimenteller Nachweis von optischer Verstärkung

In der Referenz [88] wurde auf einer Femtosekunderskala optische Verstärkung an dem in Kapitel 4.1 vorgestellten Quantenfilm gemessen. Die Abbildung 4.11, welche [88] entnommen wurde, zeigt eine negative Absorption bei 5 fs nach der Anregung. Diese Verstärkung verschwindet allerdings schon nach 15 fs aufgrund der Streuung der Elektronen vom  $\Gamma$ -Punkt in eins der  $L$ -Täler. Details zu dem Experiment können der Referenz [88] entnommen werden.



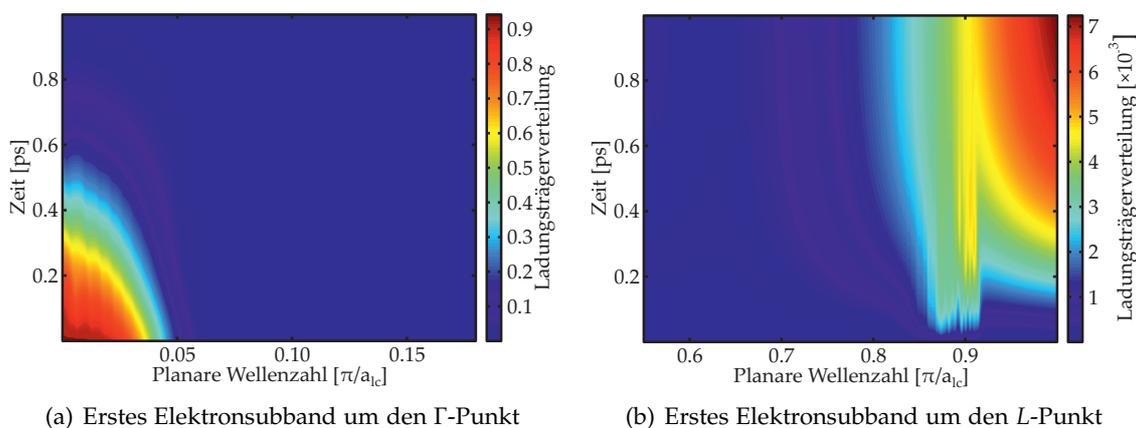
**Abbildung 4.11.:** Gemessene Absorption des 14.3 nm verspannten  $\text{Ge}/\text{Si}_{0.15}\text{Ge}_{0.85}$ -Quantenfilms zu verschiedenen Zeiten nach der Anregung bei  $T = 300 \text{ K}$  [88].

Anhand eines Zweibandmodells und unter Verwendung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen mit Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Streuung in zweiter Born-Markov-Näherung wurden in Referenz [89] die zugehörigen Ladungsträgerdichten und eine daraus resultierende Streuzeit der Elektronen von 140 fs in das  $L$ -Tal abgeschätzt.

### 4.3.2. Markov-Näherung

Die Markov-Näherung der phononassistierten Gleichungen ist in Kapitel 2.2.4 gezeigt und werden hier mit den oben genannten Anfangsbedingungen für den Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilm gelöst. Alle Rechnungen werden bei einer Temperatur von 300 K durchgeführt.

Die resultierende Ladungsträgerdynamik des ersten Elektronsubbands ist in der Abbildung 4.12 in einer Falschfarbendarstellung gezeigt. Die Wellenzahl  $k_{\parallel}$  verläuft entlang der Abszisse und die Zeitachse entlang der Ordinate. In Falschfarben ist die Ladungsträgerdichte von blau (keine Besetzung) bis rot (hohe Besetzung) um den  $\Gamma$ - (a) und um den  $L$ -Punkt (b) gezeigt. Betrachtet man zunächst die Besetzung um den  $\Gamma$ -Punkt,



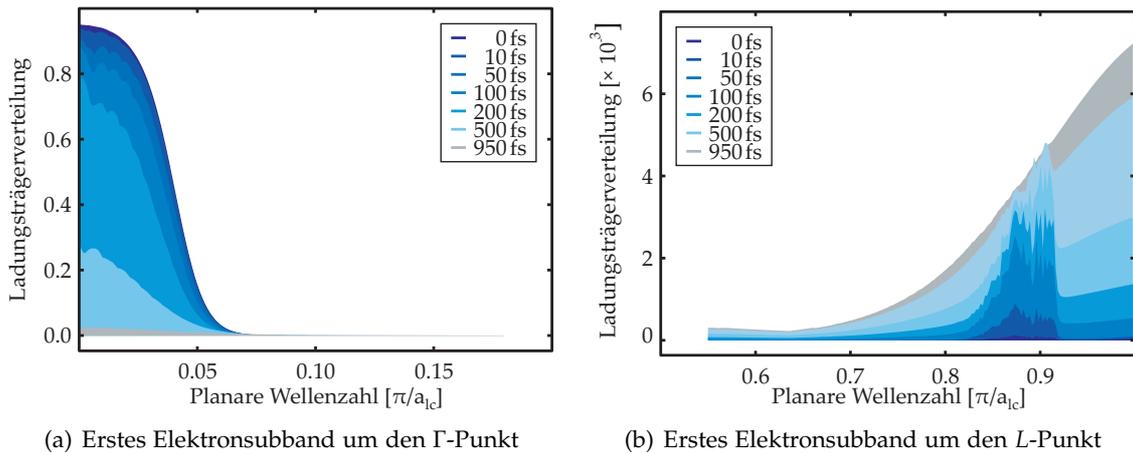
(a) Erstes Elektronsubband um den  $\Gamma$ -Punkt

(b) Erstes Elektronsubband um den  $L$ -Punkt

**Abbildung 4.12.:** Falschfarbendarstellung der zeitabhängigen Ladungsträgerbesetzung um den  $\Gamma$ - (a) und um den  $L$ -Punkt des jeweils ersten Elektronsubbands des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms bei der Verwendung eines Intervalley-Deformationspotentials von  $d_{ivdp} = 7 \cdot 10^8 \text{ eV cm}^{-1}$  bei  $T = 300 \text{ K}$ .

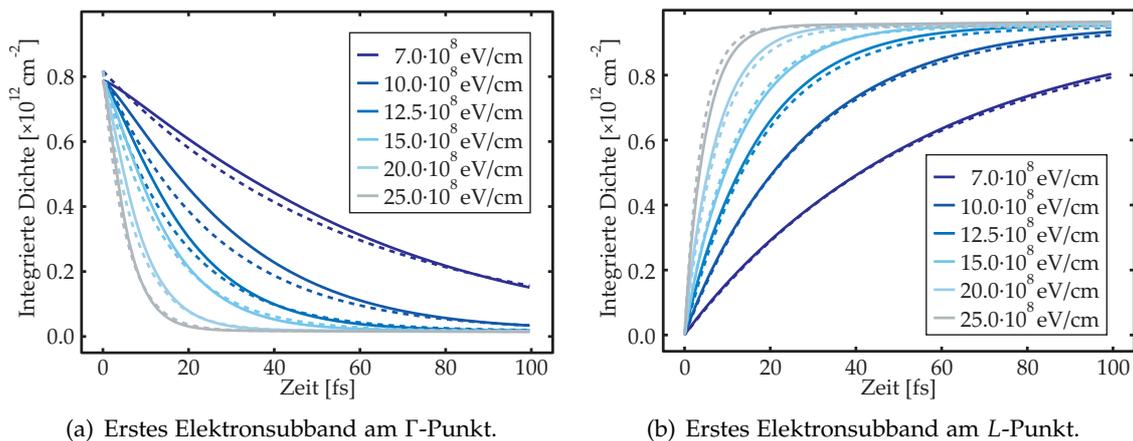
so ist zu erkennen, dass die Besetzung sich weitestgehend in der Höhe, nicht aber in der Form ändert. Dies liegt daran, dass die Relaxationszeit von 50 fs sehr viel größer als die Intervalley-Streuzzeit bei dem in dieser Rechnung verwendeten Deformationspotential ist. Die kleineren Unregelmäßigkeiten entlang der Abszisse sind numerischen Fehlern geschuldet. Um den  $L$ -Punkt bildet sich ein Bereich zwischen  $k_{\parallel} \approx 0.82 (\pi/a_{lc})$  bis  $k_{\parallel} \approx 0.92 (\pi/a_{lc})$  heraus, in den die Ladungsträger streuen. Diese verweilen nicht lange dort, sondern relaxieren in eine thermische Verteilung so das für  $t \rightarrow 1 \text{ ps}$  sich das Maximum der Ladungsträgerverteilung am  $L$ -Punkt befindet.

Betrachtet man Querschnitte parallel zur Abszisse, also Ladungsträgerverteilungen in Abhängigkeit von der Wellenzahl  $k_{\parallel}$  bei fester Zeit  $t$ , erhält man ein konkreteres Bild der Verteilungsfunktion. Die resultierenden Verteilungen sind in Abbildung 4.13 für die Zeiten  $t = 0, 50, 100, 200, 500$  und  $950 \text{ fs}$  gezeigt. Der oben bereits angesprochene  $k_{\parallel}$ -Bereich hört auf der Seite zum  $L$ -Punkt hin sehr abrupt auf, wohingegen auf der gegenüberliegenden Seite bei  $k_{\parallel} \approx 0.82 (\pi/a_{lc})$  der Übergang kontinuierlicher wirkt. Dies lässt sich dadurch erklären, dass es aufgrund der Bandstruktur keine weiteren Zustände um den  $\Gamma$ -Punkt gibt, die durch Emission eines Phonons zu tieferen Zuständen streuen können.



**Abbildung 4.13.:** Ladungsträgerverteilungen bei verschiedenen Zeiten  $t$  des jeweils ersten Elektronensubbands. Das Rauschen der Verteilungsfunktionen wird durch die geringe numerische Auflösung im reziproken Raum erzeugt.

Beim Lösen der Halbleiter-Bloch-Gleichungen unter Verwendung der Elektron-Phonon-Streuung kommt das Wechselwirkungsmatrixelement quadratisch vor. Für den Fall, dass es kein Auffüllen des Phasenraums gibt, erwartet man eine quadratische Abhängigkeit von den Streuzeiten vom Deformationspotential. Aufgrund der sehr hohen Zustandsdichte am  $L$ -Punkt, die durch das Vernachlässigen der Winkelabhängigkeit entsteht, bildet sich auch bei schnellen Streuzeiten kein Auffüllen des Phasenraums. Die Streuzeit der Ladungsträger lässt sich bestimmen, indem man die über den reziproken Raum integrierte Ladungsträgerdichte des energetisch niedrigsten Elektronensubbands in Abhängigkeit von der Zeit betrachtet. Dies ist in Abbildung 4.14 für verschiedene Intervalley-Deformationspotentiale gezeigt.



**Abbildung 4.14.:** Integrierte Elektron-Ladungsträgerdichten in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Intervalley-Deformationspotentiale.

Die Ladungsträgerdichten konvergieren am  $\Gamma$ -Punkt alle gegen eine Dichte von  $n_{\Gamma} \approx 1.7 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  und am  $L$ -Punkt gegen  $n_L \approx 9.7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Die Differenz zwischen der Anfangsladungsträgerdichte von  $n_{\text{ges}} = 1.0 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  und der Summe der beiden Endzuständen ist auf die beiden anderen Elektronensubbänder verteilt. Dass die Dichte

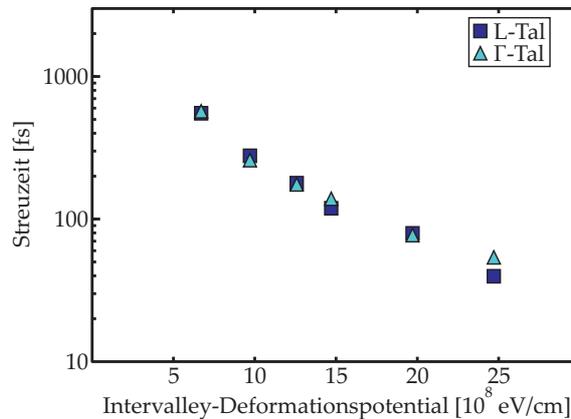
am  $\Gamma$ -Punkt nicht weiter sinkt, sondern gegen einen endlichen Wert konvergiert, liegt daran, dass sich das Ladungsträgersystem sehr stark aufheizt und die Gleichgewichtsverteilung nicht vollständig am  $L$ -Punkt lokalisiert ist, sondern bis zum  $\Gamma$ -Punkt weiter läuft.

Die gestrichelten Linien in der Abbildung 4.14 sind nach der Formel

$$N(t) = N_0 + N_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (4.1)$$

mithilfe eines nichtlinearen Anpassungsalgorithmus den integrierten Ladungsträgerdichten angepasst worden. Die Anpassung ist relativ gut, allerdings nicht perfekt, was daran liegt, dass das Streuverhalten nicht einer so einfachen Formel folgt, sondern sich die Streuzeiten aufgrund der jeweils aktuellen Besetzung und Ladungsträgertemperatur ändert. Da der Einfluss dieser Parameter aber aufgrund der hohen Zustandsdichte im  $L$ -Tal ziemlich gering ist, erhält man dennoch eine sehr gute Übereinstimmung.

Die resultierenden Streuzeiten sind in der Abbildung 4.15 für den Abfall der Besetzung am  $\Gamma$ -Punkt und den Anstieg am  $L$ -Punkt dargestellt. Die einfache Vorstellung, dass die Streuzeit quadratisch von der Größe des Intervalley-Streupotentials abhängt, erfüllt sich nicht. Gründe hierfür sind das Entleeren des Phasenraumes am  $\Gamma$ -Punkt, da die Elektronen von dort mittels Intervalleystreuung genauso schnell wegstreuen, wie sie aus höheren  $k$ -Zuständen mittels Coulomb-Streuung an den  $\Gamma$ -Punkt streuen. Am  $L$ -Punkt füllt sich der Phasenraum hingegen sehr schnell bei bestimmten Wellenzahlen und verringert so die Streuung.



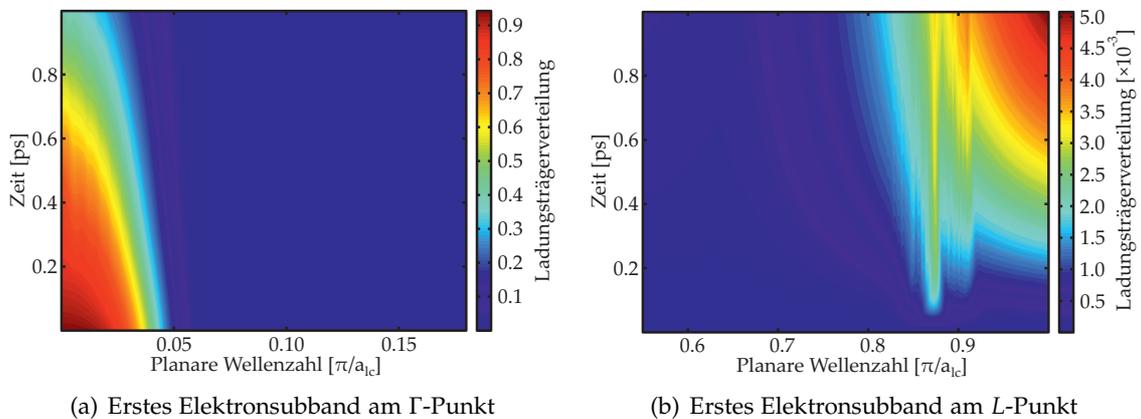
**Abbildung 4.15.:** Intervalley-Streuzeiten in Abhängigkeit von dem Deformationspotential. Um eine Vorstellung über den Fehler der Streuzeit zu bekommen, sind die Streuzeiten für das Wegstreuen aus dem  $\Gamma$ - und das Hinstreuen in das  $L$ -Tal aufgetragen.

### 4.3.3. Lösung unter Berücksichtigung von Gedächtniseffekten

Für die Berechnung der Intervalley-Streuung unter Berücksichtigung der Gedächtniseffekte wird der Anfangszustand genauso präpariert wie im Kapitel 4.3.2, was bedeutet, dass sich zum Zeitpunkt  $t = 0$  alle Ladungsträger am  $\Gamma$ -Punkt befinden. Die Gedächtniseffekte werden bei der Lösung der vollen phononassistierten Gleichungen berücksichtigt, welche in den phononassistierten Dichten ( $i_c = j_c$ ) beziehungsweise in den Kohärenzen ( $i_c \neq j_c$ )  $F_{i_c j_c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  und  $G_{i_c j_c, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  enthalten sind.

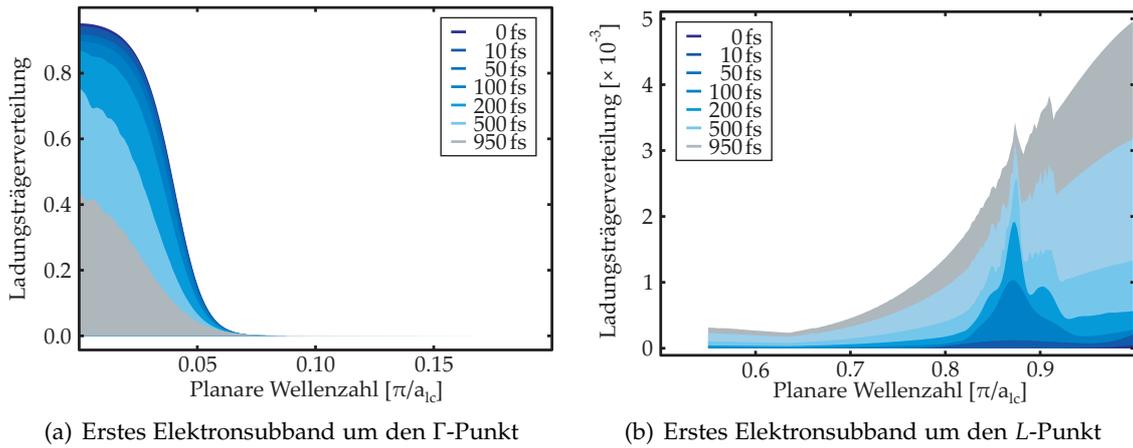
Die Anfangsbedingung der phononassistierten Polarisierungen kann man auf null setzen, da es zu Zeiten  $t \leq 0$  keine Polarisation und kein Lichtfeld gibt, welches diese Größe hätte erzeugen können. Bei den phononassistierten Dichten ist dies nicht der Fall, da diese von den Ladungsträgerdichten zu Zeiten  $t \leq 0$  abhängt. Allerdings handelt es sich bei den phononassistierten Dichten um komplexe Größen, für die die Gleichgewichtsfunktionen nicht bekannt sind, weshalb die Größe zum Zeitpunkt  $t = 0$  auf null gesetzt wird. Hierdurch befinden sich diese Größen aber in einem starken Nichtgleichgewichtszustand, welcher sich in der Streuung der Ladungsträger bemerkbar machen wird.

Die Falschfarbendarstellung in Abbildung 4.16 zeigt die Ladungsträgerdichte in Abhängigkeit von der Zeit (Ordinate) und der Wellenzahl  $k_{\parallel}$  (Abszisse). Zunächst ist, wie unter Verwendung der Markov-Näherung ein Streuen der Elektronen vom  $\Gamma$ -Punkt in das  $L$ -Tal zu erkennen, wobei sich das Ladungsträgersystems aufgrund des Energieüberschusses deutlich aufheizt. Als Unterschied lässt sich hier jedoch feststellen, dass das Ladungsträgerstreuen langsamer als in der Markov-Näherung ist.



**Abbildung 4.16.:** Falschfarbendarstellung der zeitabhängigen Ladungsträgerbesetzung um den  $\Gamma$ - (a) und um den  $L$ -Punkt des jeweils ersten Elektronensubbands des  $\text{Ge}/\text{Si}_{0.15}\text{Ge}_{0.85}$ -Quantenfilms bei der Verwendung eines Intervalley-Deformationspotentials von  $d_{\text{ivdp}} = 10 \cdot 10^8 \text{ eV cm}^{-1}$  bei  $T = 300 \text{ K}$  unter Berücksichtigung der Gedächtniseffekte.

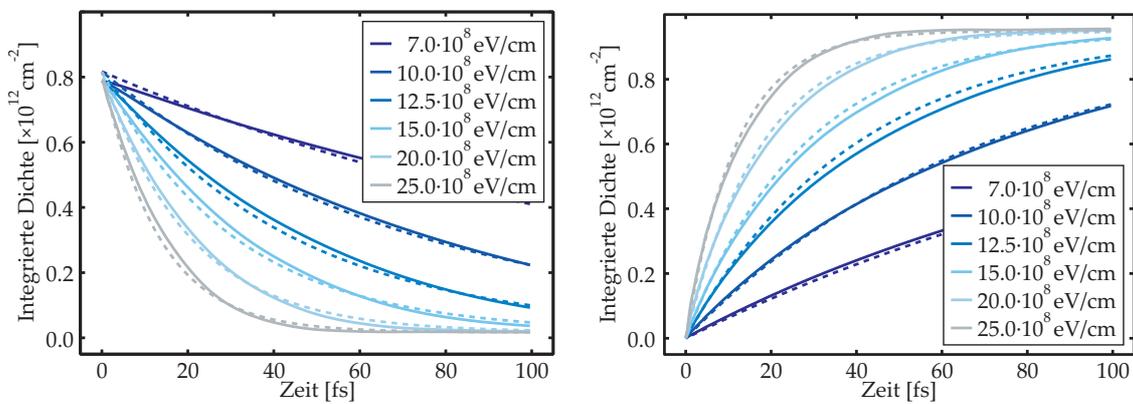
Betrachtet man erneut Querschnitte des Falschfarbenbildes, wie in Abbildung 4.17 gezeigt, so ergibt sich ein stark unterschiedliches Bild zu den Ergebnissen der Markov-Näherung in Abbildung 4.13. Die Ladungsträgerdichte um den  $\Gamma$ -Punkt (a) verringert sich für den Fall ohne Gedächtniseffekte deutlich schneller als bei Lösung der vollen Gleichungen, wobei sich die Form allerdings nicht stark ändert, da es sich in beiden Fällen um die Gleichgewichtsfermiverteilung handelt. Auch der Aufheizvorgang scheint in beiden Fällen gleich zu verlaufen. Im  $L$ -Tal (b) sieht man neben dem geringeren Anstieg der Dichte mit der Zeit auch einen großen Unterschied in der Form der Verteilung. Für kurze Zeiten bildet sich bei der vollständigen Rechnung zunächst eine sehr breite Verteilung aus, die sich mit der Zeit in ein immer schärfer werdendes Maximum verändert, welches für lange Zeiten wieder verschwindet. Hier macht sich die Energie-Zeit-Unschärfe deutlich, da der Anfangszustand der phononassistierten Dichten exakt bestimmt ist. Indem man die Anfangsbedingung der phononassistierten Dichten für  $t = 0$  auf null setzt, lässt sich die Energie nicht exakt bestimmen und die Streuung ist zunächst energetisch unscharf, was dann erst mit der Zeit verschwindet. Die Existenz

(a) Erstes Elektronensubband um den  $\Gamma$ -Punkt(b) Erstes Elektronensubband um den  $L$ -Punkt

**Abbildung 4.17.:** Ladungsträgerverteilungen bei verschiedenen Zeiten  $t$  des jeweils ersten Elektronensubbands.

des später sehr scharfen Maximums, welches auch noch für lange Zeiten zu erkennen ist, ist vermutlich auf die starke Nichtgleichgewichtsverteilung der phononassistierten Dichten zurückzuführen, da diese Resonanz mit steigender Zeit immer geringer wird und sich die Form der Ladungsträgerverteilung im  $L$ -Tal immer mehr der Verteilung anpasst, welche sich unter Verwendung der Markov-Näherung ergeben hat.

Diese Unterschiede bei den Berechnungen führen jetzt dazu, dass sich die Intervalley-Streuung der Elektronen deutlich langsamer verhält als bei Vernachlässigung der Gedächtniseffekte. Die resultierenden, über dem jeweiligen Tal integrierten, Ladungsträ-

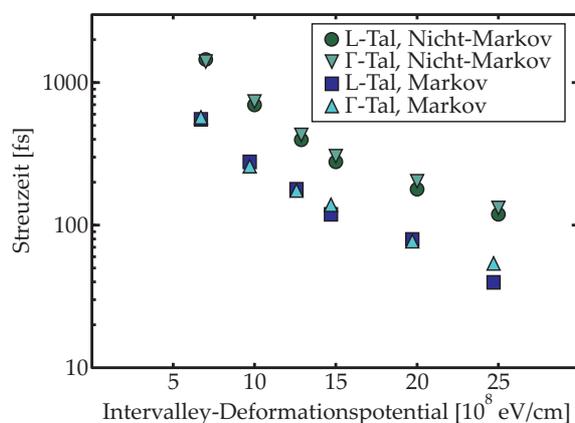
(a) Erstes Elektronensubband um den  $\Gamma$ -Punkt.(b) Erstes Elektronensubband um den  $L$ -Punkt.

**Abbildung 4.18.:** Integrierte Elektron-Ladungsträgerdichten in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Intervalley-Deformationspotentiale.

gerdichten in Abbildung 4.18 zeigen, dass die Dichten deutlich länger brauchen, um sich an den Gleichgewichtszustand anzupassen, als bei der Markov-Näherung, welche in Abbildung 4.14 dargestellt sind.

Die Änderung der integrierten Ladungsträgerdichten wurde wieder nach dem einfachen exponentiellen Zerfall aus Gleichung (4.1) angepasst, was durch die gestrichelten Linien in Abbildung 4.18 repräsentiert wird. Die daraus resultierenden Streuzeiten sind in Abhängigkeit von den Phononmatrixelementen in Abbildung 4.19 gezeigt. Im Vergleich mit

den Ergebnissen aus der Markov-Näherung ergibt sich zwar die gleiche Abhängigkeit von dem Phononmatrixelement, allerdings eine deutlich größere Streuzeit bei gleichem Intervalley-Deformationspotential.



**Abbildung 4.19.:** Intervalley-Streuzeiten in Abhängigkeit des Deformationspotentials. Um eine Vorstellung über den Fehler der Streuzeit zu bekommen sind die Streuzeiten für das Wegstreuen aus dem  $\Gamma$ - und das Hinstreuen in das  $L$ -Tal aufgetragen.

Das Problem bei der Beurteilung, ob die Markov-Näherung anwendbar ist, ist die Unkenntnis darüber, wieweit die Anfangsbedingung der phononassistierten Dichten von der tatsächlichen Verteilung abweichen. Zunächst könnte man argumentieren, dass nach einer starken optischen Anregung, die zu der Ladungsträgerdichte am  $\Gamma$ -Punkt geführt hat, die phononassistierten Dichten auch nicht instantan im Gleichgewicht sind, sondern erst in dieses relaxieren müssen. Doch ist eben auch nicht klar, ob die verwendete Anfangsbedingung der phononassistierten Dichten besser dem dadurch präparierten Nichtgleichgewicht entspricht. Es kann an dieser Stelle nicht entschieden werden, ob die Markov-Näherung zulässig ist oder nicht. In der Arbeit sollte gezeigt werden, dass das Phänomen der Intervalleystreuung auch mit der hier vorgestellten mikroskopischen Theorie beschrieben werden kann und welchen Einfluss die Vernachlässigung der Gedächtniseffekte auf die Streuung hat. Für eine genauere Beurteilung müssen weitere Untersuchungen durchgeführt werden, und es ist zu erwarten, dass es stark von den Materialien und Anregungsbedingungen abhängen wird. Auf theoretischem Wege könnte man in einem ersten Schritt die Gleichgewichtsfunktionen der phononassistierten Dichten bestimmen und überprüfen, wie sich die Streuzeiten für die veränderte Anfangsbedingung verhalten. In einem zweiten Schritt könnte man dann die optische Anregung, die zur Erzeugung der Ladungsträger um den  $\Gamma$ -Punkt führt mit simulieren und untersuchen, wie sich die Intervalleystreuung mit und ohne Beachtung der Gedächtniseffekte verhält.

#### 4.4. Phononassistiertes Abkühlen von heißen Löchern

Durch die Trennung der Ladungsträger im reziproken Raum aufgrund der Lage der Bandextrema und der sehr langsam stattfindenden phononassistierten Ladungsträgerrekombinationen kann das Lochsystem nach der Anregung unabhängig von den Elektronen betrachtet werden. Die Absorption am  $\Gamma$ -Punkt wird maßgeblich durch die Lö-

cher bestimmt [90]. Nach der Intervalley-Streuung der Elektronen in das  $L$ -Tal der ersten Brillouinzone kann das Lochsystem weitestgehend unabhängig von dem der Elektronen untersucht werden [91].

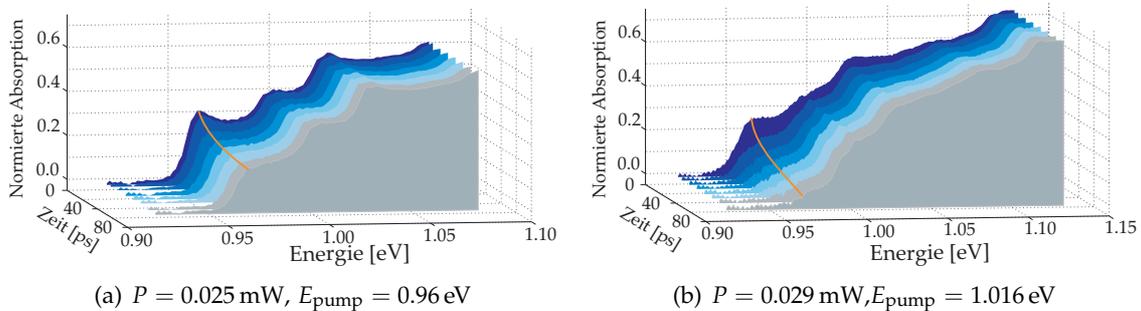
Im Experiment kann die Änderung der Absorption am  $\Gamma$ -Punkt zeitaufgelöst untersucht werden. Es wird das gleiche Experiment wie bei der Betrachtung des optischen Gewinns durchgeführt, wobei man in diesem Fall solange wartet, bis die Elektronen in das  $L$ -Tal gestreut sind. Die Absorption am  $\Gamma$ -Punkt ist dann ausschließlich durch die Löcher und deren Verteilung im reziproken Raum bestimmt.

Das Auftreten heißer Löcher und deren Abkühlen wurde in volumenartigem Germanium von Woerner et al. [92, 93] experimentell untersucht, und die Ergebnisse wurden mit Hilfe einer Monte-Carlo-Simulation reproduziert [94]. Das Abkühlen des Lochsystems wird zu Beginn durch optische Phononen bestimmt [92] und erst auf langen Zeitskalen nach mehreren 100 ps durch akustische Phononen voran getrieben.

#### 4.4.1. Experimenteller Befund

Die Absorption am  $\Gamma$ -Punkt wird durch die Ladungsträgerbesetzung der Elektronen und Löcher der jeweiligen Subbänder und deren Bandstruktur bestimmt. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, diese Faktoren experimentell zu variieren und somit deren Eigenschaften zu untersuchen.

Die Abbildung 4.20 zeigt die Absorption des 14.3 nm Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms bei 10 K für verschiedene Zeiten nach der Anregung. Der Versatz zwischen den Absorptionen zu verschiedenen Zeiten dient der schnelleren Erfassung der Daten und hat keine physikalische Bedeutung. Die Abbildungen 4.20 (a) und (b) zeigen beide den



**Abbildung 4.20.:** Experimentelle Absorption des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms bei einer Gittertemperatur von 10 K für zwei Anregungsszenarien.

gleichen experimentellen Befund und unterscheiden sich durch die geringfügig unterschiedlichen Anregungsleistungen und die deutlich unterschiedlicheren Anregungsenergien, mit denen das Experiment durchgeführt wurde. In 4.20 (a) erkennt man, dass mit zunehmender Zeit der Übergang  $e_1$ - $h_1$  ausbleicht beziehungsweise die exzitoni-sche Signatur verschwindet. Die übrigen Übergänge bleiben in ihrer Form und Stärke nahezu unverändert. Dies lässt sich wie folgt erklären: Zum Zeitpunkt  $t = 0$  wird über eine starke optische Anregung eine Ladungsträgerbesetzung am  $\Gamma$ -Punkt erzeugt. Durch die Intervalley-Streuung streuen die Elektronen auf einer sehr kurzen Zeitskala, wie in Kapitel 2.1.3.2 beschrieben, in das  $L$ -Tal, wobei sie eine Überschussenergie von ca. 180 meV besitzen, die zu einem Aufheizen der Ladungsträgersysteme über die

Coulomb-Wechselwirkung führt. Zum Zeitpunkt  $t = 1$  ps befinden sich nahezu alle Elektronen im  $L$ -Tal, und die Löcher sind immer noch am  $\Gamma$ -Punkt, allerdings nicht im thermischen Gleichgewicht mit dem Gitter, sondern mit einer hohen Ladungsträgertemperatur. Über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung beginnt das Ladungsträgersystem abzukühlen, wodurch die Besetzung bei  $k_{\parallel} = 0$  steigt, was ein Ausbleichen der exzitonischen Signatur zur Folge hat. Dass die höheren Übergänge sich dabei nicht in ihrer Form ändern, liegt an der geringen Ladungsträgerdichte, die hier betrachtet wird, und daran, dass selbst bei hohen Temperaturen keine signifikante Besetzung der höheren Zustände vorhanden ist. In der Abbildung 4.20 (b) ist der gleiche experimentelle Befund zu erkennen. Zwar sind die beiden Experimente bei einer gleichen Anregungsleistung durchgeführt worden, doch lässt sich daraus nicht der Schluss ziehen, dass die Ladungsträgerdichten deshalb gleich sein müssten. Aufgrund der höheren Zustandsdichte lassen sich bei höheren Anregungsenergien auch deutlich mehr Ladungsträger erzeugen. Hierdurch folgt ein stärkeres Ausbleichen der exzitonischen Resonanz aufgrund der größeren Besetzung der Löcher am  $\Gamma$ -Punkt. Die Absorption energetisch höherer Übergänge scheint sich nicht mit der Zeit zu ändern, was darauf schließen lässt, dass die Ladungsträgerdichten nicht so hoch sind, dass eine signifikante Besetzung dieser Zustände vorläge.

Die experimentellen Ergebnisse werfen Fragen auf, die im weiteren Verlauf durch eine Analyse der experimentellen Daten und durch einen Experiment-Theorie-Vergleich beantwortet werden sollen. Ziel ist es, ein konsistentes Bild über die Vorgänge für die Zeiten  $t = 0$  bis  $t = 100$  ps nach der optischen Anregung zu erlangen.

Die erste Frage, die sich stellt, ist, weshalb sich das Lochsystem überhaupt so stark aufheizt, da durch die Überschussenergie zwischen dem Leitungsbandminimum am  $\Gamma$ - und am  $L$ -Punkt sich zunächst nur die Elektronen aufheizen können. Erzeugt man die Löcher durch optische Anregung nicht im ersten, sondern in höheren Subbändern, so haben diese auch einen Überschussenergie, die zu einem Aufheizen führen könnte. Doch es wird gezeigt, dass die Temperatur der Löcher nur geringfügig von der Anregungswellenlänge abhängt, was diese Möglichkeit ausschließt. Die wahrscheinlichere Erklärung ist durch die Elektron-Loch-Streuung gegeben. In Kapitel 3.3.2 wurde diskutiert, dass der Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung in der Hartree-Fock-Näherung zwar gering ist, es aber in der Literatur Hinweise auf eine starke Wechselwirkung zwischen  $L$ -Punkt-Elektronen und  $\Gamma$ -Punkt-Löchern gibt. Dies könnte ein Aufheizen der Löcher auf einer Subpikosekundenskala erklären. Da in dieser Arbeit die Elektron-Elektron-Wechselwirkung allerdings nur auf Singlet-Ebene betrachtet wurde, lässt sich diese Frage nicht mittels theoretischer Betrachtungen beantworten.

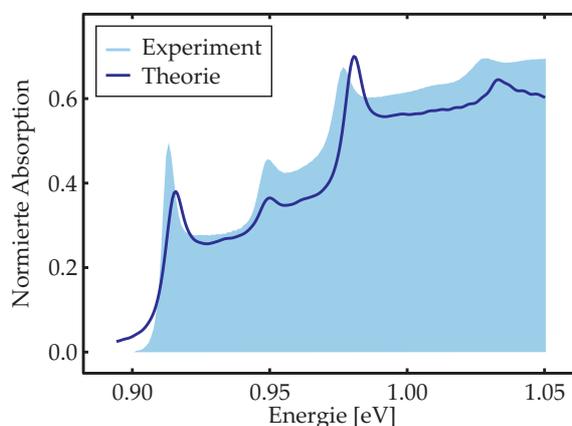
Die zweite Frage ist, wie das Abkühlen des Lochsystems von den experimentellen Gegebenheiten wie beispielsweise der Anregungsleistung oder der Anregungswellenlänge abhängt und ob sich der Abkühlvorgang über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung mit optischen Phononen auf der Zeitskala bis 100 ps nach der Anregung erklären lässt. Hierbei ist ferner zu klären, ob es bei den Experimenten zur Erzeugung heißer Phononen gekommen ist. Phononen, die nicht der Bose-Einstein-Verteilung aus Gleichung (2.85) genügen (heiße Phononen), können bei starker optischer Anregung durch die Energieabgabe der Elektronen an das Gitter erzeugt werden. Hierfür sind in nicht-polaren Kristallen aufgrund der schwächeren Elektron-Phonon-Wechselwirkung deutlich höhere Dichten als in polaren Kristallen notwendig [95, 96]. Der Effekt heißer Phononen konnte in Germaniumvolumenkristallen nachgewiesen werden [91]. Wo die Schwelle für diesen Effekt in Quantenfilmsystemen liegt, lässt sich aber hieraus nicht ableiten.

#### 4.4.2. Experiment-Theorie-Vergleich

Um die experimentellen Befunde aus dem Kapitel 4.4.1 zu verifizieren, wird unter Verwendung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen die Absorption des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms berechnet und die Ladungsträgertemperaturen in Abhängigkeit von der Zeit durch einen Vergleich der experimentellen Daten mit den simulierten Spektren bestimmt. In einem zweiten Schritt wird der Abkühlvorgang mithilfe der phononassistierten Gleichungen berechnet und die Abhängigkeit des Abkühlens von den Materialparameter diskutiert.

Für die Simulation der Spektren wird die Absorption des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms für unterschiedliche Ladungsträgertemperaturen und Dichten berechnet und mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Bei der Berechnung der Absorption wird eine konstante Ladungsträgertemperatur angenommen. Diese Näherung ist gerechtfertigt, da sich die Ladungsträgertemperaturen auf einer langsameren Zeitskala abkühlen als in der Zeit, die für die Absorption simuliert wird.

Obwohl die höheren Übergänge im Vergleich der linearen Absorption in Abbildung 4.8 keine exakte Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie zeigten, lassen sich die Abkühlprozesse aus zwei Gründen trotzdem vergleichen. Zunächst ändert sich die Absorption der höheren Übergänge, wie beispielsweise der  $e1-hh2$ - oder auch der  $e1-lh1$ -Übergang, aufgrund der geringen Ladungsträgerdichte nicht oder nur sehr gering, weshalb deren Betrachtung nicht relevant ist. Der zweite Grund ist, dass es einen deutlichen Hinweis gibt, dass die Elektronmasse unterschätzt wird und somit die energetische Position der höheren Elektronsubbänder überschätzt wird. Die Position der Lochsubbänder hingegen hat einen geringeren Fehler, weshalb die Verteilungsfunktionen der Löcher ebenfalls einem geringen Fehler unterliegen.

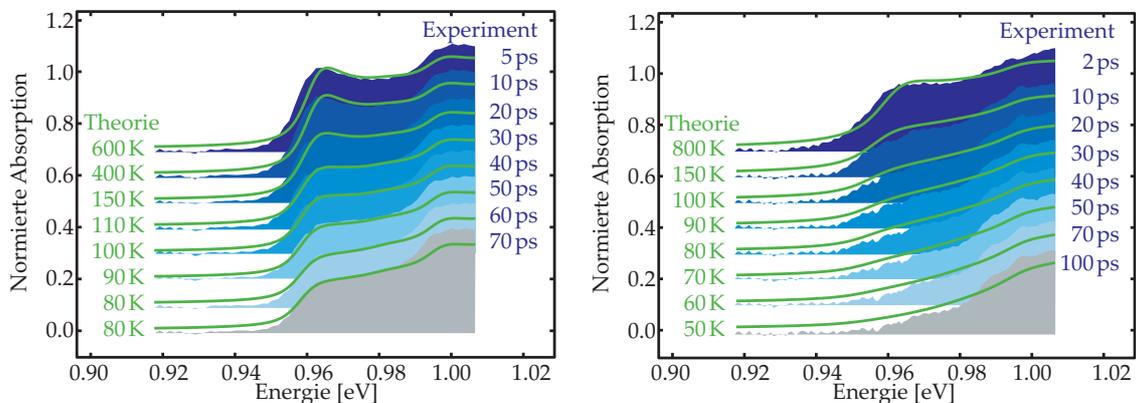


**Abbildung 4.21.:** Experimentelle (hellblaue Fläche) und simulierte (durchgezogene dunkelblaue Linie) Absorption des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms. Bei der Simulation wurde das zweite Elektron-Subband um 30 meV zu niedrigeren Energien verschoben.

Die Abbildung 4.21 zeigt die gemessene (hellblaue Fläche) und berechnete (durchgezogene dunkelblaue Linie) Absorption der Probe, wobei das zweite Elektron-Subband um 30 meV zu niedrigeren Energien verschoben wurde. Hierdurch erreicht man eine ausgezeichnete Übereinstimmung der höheren Übergängen mit dem zweiten Elektron-Subband. Es ist daher anzunehmen, dass die energetische Lage der Lochsubbänder kor-

rekt ist und lediglich die höheren Elektronsubbänder mit den Literaturparametern der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie zu höheren Energien verschoben sind. In Folge dessen ist anzunehmen, dass mit der richtigen Lage der Lochsubbänder auch die korrekten Lochbesetzungen der jeweiligen Subbänder berechnet werden. Die Abweichungen zwischen Experiment und Theorie beschränken sich auf die Linienform, die erst bei der Berechnung des Dephasierens über die Elektron-Elektron-Streuung korrekt wiedergegeben werden kann.

Ein möglicher Grund für die nicht exakte Übereinstimmung der Quantenfilm-Bandstruktur mit dem Experiment, obwohl die Bandstruktur für das Volumenmaterial Germanium und Silizium perfekt wiedergegeben werden kann, wäre eine Mehrdeutigkeit der verwendeten Kopplungsparameter in der  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie. Eine anderer Grund könnte in der Berechnung der Verspannung liegen. Der Einfluss der Verspannung auf die höheren Leitungsbänder, die bei der 30-Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie verwendet werden, wurde bisher nicht ausführlich untersucht.



(a) Experiment:  $P = 0.025 \text{ mW}$ ,  $E_{\text{pump}} = 0.96 \text{ eV}$ ;  
Theorie:  $d = 0.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

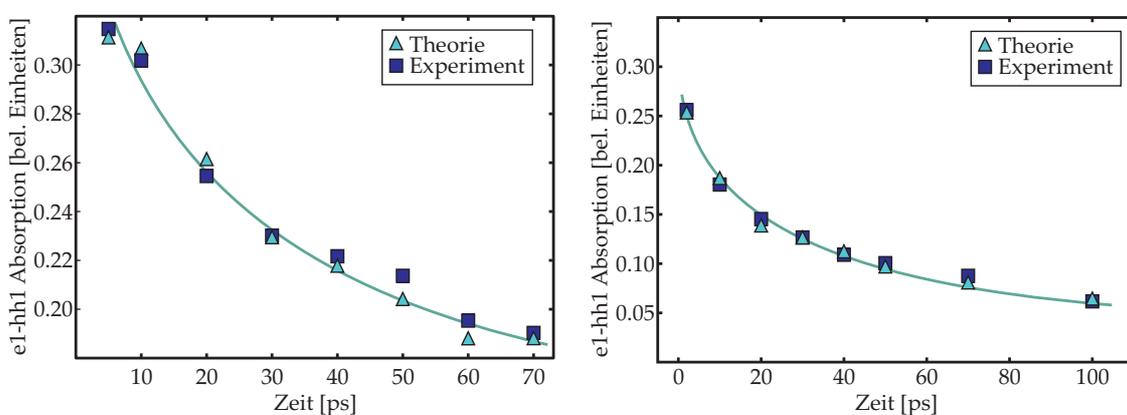
(b) Experiment:  $P = 0.029 \text{ mW}$ ,  $E_{\text{pump}} = 1.016 \text{ eV}$ ;  
Theorie:  $d = 0.5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

**Abbildung 4.22.:** Vergleich der Absorptionsspektren des Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub>-Quantenfilms bei einer Gittertemperatur von  $T_{\text{lc}} = 10 \text{ K}$ . Die experimentellen Daten (gestrichelte Linien) zeigen die Absorption für verschiedene Zeiten nach der Anregung für die beiden Anregungsszenarien. Die simulierten Spektren (durchgezogenen Linien) sind für verschiedenen Ladungsträgertemperaturen berechnet worden.

Ein Vergleich der simulierten und gemessenen Absorptionsspektren der beiden oben diskutierten Anregungsszenarien sind in Abbildung 4.22 gezeigt. In (a) sind die Messungen für eine Anregungsleistung von  $P = 0.025 \text{ mW}$  und einer Anregungsenergie von  $E_{\text{pump}} = 0.96 \text{ eV}$  und in (b) für von  $P = 0.029 \text{ mW}$  beziehungsweise  $E_{\text{pump}} = 1.016 \text{ eV}$  für verschiedene Zeiten nach der optischen Anregung gezeigt. Die simulierten Spektren sind in (a) mit einer Lochdichte von  $d = 0.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  und in (b) von  $d = 0.5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  berechnet worden, wobei die Dichte solange variiert wurde, bis eine Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie erreicht wurde. Um die zeitliche Verzögerung zu simulieren, wurde für die unterschiedlichen Spektren die Ladungsträgertemperatur variiert. Man erhält für den  $e1-hh1$ - und den  $e1-lh1$ -Übergang eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie. In beiden Fällen wird das Ausbleichen der exzitonischen Resonanz des  $e1-hh1$ -Übergangs reproduziert, während der energetisch nächst höhere Übergang nahezu unverändert bleibt. Bei den Berechnungen wurde in beiden Fällen eine Dephasierungszeit von  $T_2 = 0.2 \text{ fs}$  verwendet. Da es sich bei dieser

Zeit allerdings um eine phänomenologische Größe handelt, die sowohl von der Ladungsträgertemperatur als auch von der Ladungsträgerdichte abhängt, wird die exakte Form des Absorptionsspektrums nicht wiedergegeben. Die berechneten Spektren wurden um 5 meV zu niedrigeren Energien verschoben. Im Experiment wurde vermutlich eine andere Stelle der Probe untersucht, was diese Verschiebung rechtfertigt. Die Dicke der Quantenfilme kann sich leicht über der Probe um ein paar Monolagen ändern, was eine Verschiebung der Spektren in der Größenordnung von wenigen meV zur Folge hat.

Damit die zeitliche Veränderung der Absorption etwas deutlicher zu erkennen ist, ist in Abbildung 4.23 die maximale Absorption des energetisch niedrigsten Übergangs in Abhängigkeit von der Zeit für die beiden Anregungsbedingungen gezeigt und mit den simulierten Werten für die verschiedenen Ladungsträgertemperaturen verglichen. Man findet konsistent mit den vorherigen Ergebnissen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie. Im Vergleich zwischen (a) und (b) zeigt sich ein unter-



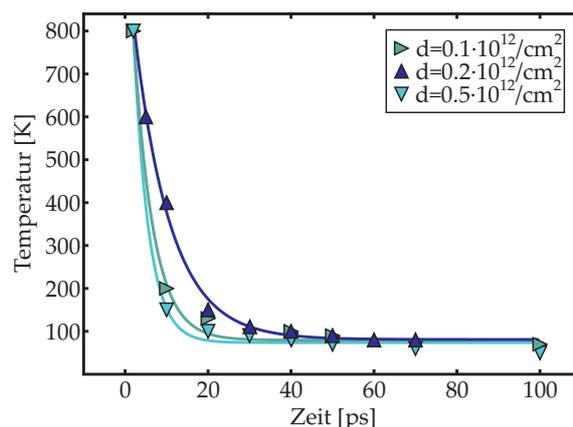
(a) Experiment:  $P = 0.025$  mW,  $E_{\text{pump}} = 0.96$  eV; Theorie:  $d = 0.1 \cdot 10^{12}$  cm $^{-2}$

(b) Experiment:  $P = 0.029$  mW,  $E_{\text{pump}} = 1.016$  eV; Theorie:  $d = 0.5 \cdot 10^{12}$  cm $^{-2}$

**Abbildung 4.23.:** Vergleich der maximalen Absorption des  $e1-hh1$ -Übergangs bei einer Gittertemperatur von  $T_{lc} = 10$  K. Die blauen Quadrate repräsentieren die experimentellen Daten und die türkisen Dreiecke die berechneten.

schiedliches Verhalten der maximalen Absorption mit der Zeit. In (a) scheint die Absorption sich relativ linear mit der Zeit zu verringern, während es in (b) eher nach einer exponentiellen Abhängigkeit aussieht. Die Absorption des  $e1-hh1$ -Übergangs folgt keiner einfachen Funktion in der Zeit, da die Bandstruktur stark von einer quadratischen Dispersion abweicht, was dazu führt, dass die Besetzungsverteilung ebenfalls keine einfache Funktion in der Zeit oder Temperatur darstellt. Rückschlüsse über den Zusammenhang zwischen Ladungsträgertemperatur und Absorption können demnach nur über einen Vergleich zwischen den simulierten und gemessenen Spektren erfolgen.

Mithilfe des Experiment-Theorie-Vergleichs können die Ladungsträgertemperaturen der Löcher bestimmt werden. Dafür wird die Ladungsträgertemperatur der Löcher bei der Berechnung solange variiert, bis eine Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie erreicht wird. Hierdurch ergibt sich die in Abbildung 4.24 gezeigte Lochtemperatur als Funktion der Zeit. Neben den beiden bisherigen Anregungsszenarien wurde hier noch ein weiterer Fall ( $P_{\text{pump}} = 0.0045$  mW,  $E_{\text{pump}} = 1.016$  eV) betrachtet, um die Aussagekraft zu erhöhen. Vergleicht man das zeitliche Temperaturverhalten der drei Anregungsszenarien, so erhält man eine extrapolierte Anfangstemperatur von ca. 800 K und ein Abkühlen der Löcher, das unabhängig von Energie und Leistung der Anregung ist.

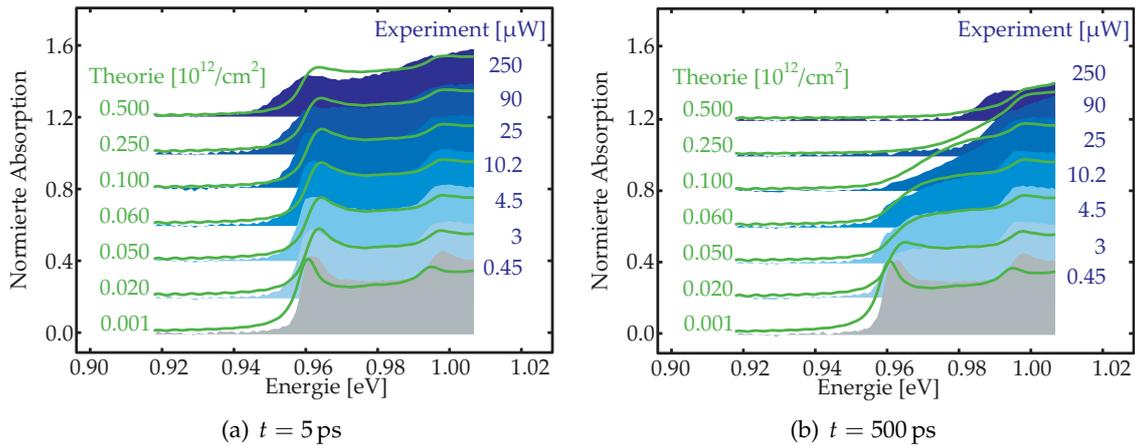


**Abbildung 4.24.:** Ladungsträgertemperatur der Löcher am  $\Gamma$ -Punkt als Funktion der Zeit für verschiedenen Anregungsleistungen und Anregungsenergien.

Selbst für den Fall, dass die Anregung resonant mit dem  $e1-hh1$ -Übergang ( $\triangleright$ ) erfolgt, erhält man ein starkes Aufheizen des Lochsystems. Dies wird als starkes Indiz für eine schnelle Elektron-Loch-Kopplung interpretiert. Die Leitungsbandelektronen besitzen durch die Streuung vom  $\Gamma$ - zum  $L$ -Tal eine Überschussenergie, die zu einem Aufheizen der Elektronen führt. Jetzt heizt sich das Lochsystem ebenfalls auf einer Sub-Pikosekundenskala auf, obwohl sich die Löcher am  $\Gamma$ -Punkt bereits im energetischen Maximum des Valenzbandes befinden. Die zusätzliche Energie kann nur durch eine starke Elektron-Loch-Kopplung zwischen den beiden Ladungsträgersystemen ausgetauscht werden. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung für optische Phononen führt zu einem Abkühlen der Löcher auf einer Pikosekundenskala, wie später noch diskutiert wird. Die Wechselwirkung mit akustischen Phononen ist dann noch einmal Größenordnungen langsamer und führt zu einem langsamen Abkühlen über mehrere 100 ps. Es bleibt nach diesen Überlegungen nur die Coulomb-Wechselwirkung übrig, die auf einer Sub-Pikosekundenskala zu diesem Energieaustausch führen kann.

Um die Ergebnisse weiter zu verifizieren, wird anhand von anregungsleistungsabhängigen Messungen bei konstant gehaltener Anregungsenergie bei zwei verschiedenen Zeiten erneut eine Anpassung von Theorie und Experiment durchgeführt. Dabei wird die Absorption bei den Zeiten  $t = 5$  ps und 500 ps für Anregungsleistungen von  $P = 0.00045$  mW bis zu 0.25 mW bei quasiresonanter Anregungsenergie von  $E_{\text{pump}} = 0.963$  eV gemessen. Durch Variieren der Ladungsträgertemperatur und Dichte kann bei der Berechnung der Spektren eine hervorragende Übereinstimmung erreicht werden, wie in Abbildung 4.25 gezeigt ist. Nach 5 ps besitzt das Lochsystem in allen Fällen eine Temperatur von ca. 300 K, was konsistent mit den Ergebnissen aus den zeitabhängigen Betrachtungen des Abkühlens ist. Da sich das Lochsystem nach dem anfänglich schnellen Abkühlen bis ca. 40 ps sehr langsam der Gittertemperatur anpasst, besitzt das Lochsystem nach 500 ps noch eine Temperatur von ca. 20 K.

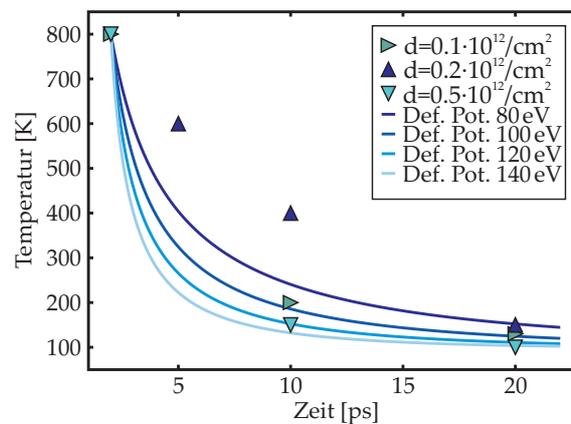
Es muss demnach für dieses Materialsystem angenommen werden, dass das Relaxieren der Ladungsträger zu einer Gleichgewichtsfunktion auf derselben Zeitskala wie das Thermalisieren beider Ladungsträgertypen stattfindet. Diese Erkenntnis ist hinsichtlich der Beurteilung der Laserfähigkeit dieses Materialsystems von großer Bedeutung. Es ist daher nicht ausreichend, wie im Kapitel 2.1.3.2 diskutiert, eine genügend große Ladungsträgerbesetzung am  $\Gamma$ -Punkt zu erzeugen, um optische Verstärkung zu erreichen.



**Abbildung 4.25.:** Anregungsleistungsabhängige Absorption zu zwei verschiedenen Zeiten nach der Anregung. Die Anregungsenergie liegt bei  $E_{\text{pump}} = 0.963$  eV. In (a) ergibt sich eine Ladungsträgertemperatur von  $T = 300$  K und in (b) von  $T = 20$  K

Denn neben dem schnellen Streuen der Elektronen vom  $\Gamma$ -Punkt ins  $L$ -Tal heizt sich das Lochsystem zusätzlich auf gleicher Zeitskala stark auf, was die optische Verstärkung ebenfalls verringert.

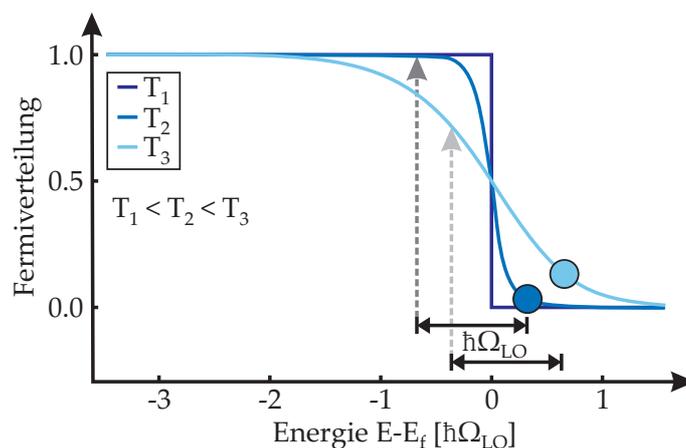
Das phononassistierte Abkühlen mittels longitudinal-optischer Phononen kann ebenfalls mit Hilfe der mikroskopischen Theorie berechnet werden. Hierfür werden die phononassistierte Gleichungen unter Verwendung der Markov-Näherung gelöst. Die Markov-Näherung für die Elektron-Phonon-Streuung von Löchern am  $\Gamma$ -Punkt der Brillouinzone für kleine Impulse  $q$  ist sehr etabliert und Gedächtniseffekte können vernachlässigt werden [17, 64]. Bei der Simulation des Abkühlens wird ferner angenommen, dass sich die Verteilung der Phononen nicht ändert und stets einer Bose-Einstein-Verteilung mit konstanter Gittertemperatur von 10 K genügt. Der von Othonos et al. [91] beobachtete Effekt heißer Phononen, also einer Nichtgleichgewichtsverteilung der Phononen, wird vernachlässigt, da dieser Effekt nur bei starken Anregungen auftrat.



**Abbildung 4.26.:** Temperatur der Löcher für die ersten 20 ps. Die durchgezogenen Linien repräsentieren den unter Verwendung der Markov-Näherung simulierten Abkühlprozess und die Dreiecke die Ergebnisse aus dem Angleich der experimentellen Absorptionsspektren.

Die Abbildung 4.26 zeigt das Abkühlen der Löcher als Funktion der Zeit für verschiedene optische Deformationspotentiale. Im Vergleich zu der Annahme, dass das Abkühlen der einfachen exponentiellen Funktion (4.1) folgt, wie es in Abbildung 4.24 eingezeichnet ist, erhält man bei der mikroskopischen Berechnung ein deutlich schnelleres Abkühlen der Löcher in den ersten zehn Pikosekunden. Obwohl eine Gittertemperatur von 10 K angenommen wurde, konvergiert die Ladungsträgertemperatur unabhängig vom optischen Deformationspotential gegen eine Temperatur von ca. 100 K. Leider gibt es in dem gezeigten Ausschnitt des Temperaturverlaufs nicht ausreichend Messpunkte, um den Verlauf der Temperatur zu verifizieren. Sollte doch so etwas wie der von Othonos et al. [91] beobachtete Effekt heißer Phononen bei diesem Experiment auftreten, so würde sich dieser in den ersten Pikosekunden des Abkühlens in Form eines verlangsamten Abkühlens gegenüber dem in Abbildung 4.26 gezeigten bemerkbar machen.

Die Streuung mit longitudinal-optischen Phononen mit wellenzahlunabhängiger Energie wird für kleine Temperaturen ineffektiv und kann nicht zu einem weiteren Abkühlen beitragen. Verstehen lässt sich das, wenn man sich die Fermiverteilung der Ladungsträger als Funktion der Energie vor Augen führt, wie sie in Abbildung 4.27 dargestellt ist. Für hohe Temperaturen gleicht die Verteilung einer Boltzmannverteilung, und es exis-



**Abbildung 4.27.:** Fermifunktion für drei verschiedene Temperaturen. Für tiefe Temperaturen wird ein weiteres Abkühlen über die Emission optischer Phononen ineffektiv, da die Energiedifferenz zwischen den besetzten Zuständen oberhalb der Fermienergie  $E_f$  und den freien Zuständen unterhalb kleiner wird als die Phononenergie  $\hbar\Omega_{LO}$ .

tieren für alle Energien freie Zustände. Es ist für Ladungsträger fast immer möglich, ein Phonon mit der Energie  $\hbar\Omega_{LO}$  zu emittieren und zu einem Zustand mit niedrigerer Energie und Wellenzahl zu gelangen. Für tiefere Temperaturen gleicht die Fermiverteilung einer Stufe, bei der nur noch in einem schmalen Bereich unter dem chemischen Potential freie Zustände existieren. Die Ladungsträger mit Energien größer als dem chemischen Potential können nicht mehr in die freien Zustände streuen, wenn die Energiedifferenz zwischen den Zuständen kleiner als die Phononenergie wird. Ein weiteres Abkühlen der Ladungsträger ist dann nur noch über akustische Phononen möglich, die für kleine Wellenzahlen einen näherungsweise linearen Zusammenhang zwischen Wellenzahl und Energie aufweisen. Dieser durch akustische Phononen bedingte Abkühlprozess findet dann auf einer Zeitskala von einigen 100 ps bis zu wenigen Nanosekunden statt.



## 5. Zusammenfassung

Luke: "What's in there?"  
Yoda: "Only what you take  
with you."

---

*(Star Wars: Episode V -  
The Empire Strikes Back)*

Durch die wachsende Bedeutung indirekter Halbleitermaterialien hinsichtlich optischer und opto-elektronischer Anwendungen entsteht auch eine Notwendigkeit für eine mikroskopische Theorie über die optischen Eigenschaften dieser Materialien. Bisherige Theorien beschäftigen sich entweder nur mit dem direkten Übergang oder sind phänomenologischer Natur, wenn es um die Beschreibung der indirekten Übergänge geht. In dieser Arbeit wird eine mikroskopische und, abgesehen von der klassischen Behandlung des Lichtfelds, vollständig quantenmechanische Theorie entwickelt, die es ermöglicht, Gleichgewichts- und Nicht-Gleichgewichtseffekte in indirekten Materialien zu beschreiben.

Als Ausgangspunkt für die theoretische Behandlung des Problems diente der Festkörper-Hamiltonoperator, der in der Born-Oppenheimer-Näherung behandelt wurde. Auf Basis der Heisenberg-Bewegungsgleichungen wurden die Gleichungen für phonon-assistierte Prozesse, welche an die wohlbekannten Halbleiter-Bloch-Gleichungen koppeln, hergeleitet. Im Zuge dessen wurde das Problem der dabei auftretenden unendlichen Hierarchie mithilfe der sogenannten Cluster-Entwicklung behandelt. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wurde auf Hartree-Fock-Ebene genähert und die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in der Singlet-Doublet-Näherung. Die dabei entstehenden Doublets entsprechen den phononassistierten Größen, da sie unter anderem die indirekte Absorption unter der gleichzeitigen Absorption oder Emission eines Phonons beschreiben. Für eine mögliche Vereinfachung des Rechenaufwands und zur späteren Beurteilung der Bedeutung der Gedächtniseffekte bei der Elektron-Phonon-Streuung wurde die Markov-Näherung durchgeführt. Für die Berechnung der Absorption oder auch der optischen Verstärkung hat sich jedoch gezeigt, dass es bei der Markov-Näherung nicht zu einem Aufbau von Kohärenzen kommt und die Berechnung der phononassistierten Absorption nicht mit der Vernachlässigung von Gedächtniseffekten verträglich ist.

Anhand eines Modellsystems eines indirekten Halbleiters wurden Absorption und optische Verstärkung unter der Annahme, dass sich das System im thermischen Gleichgewicht befindet, berechnet. Dabei wurden die Ergebnisse der mikroskopischen Rechnung mit früheren Vorhersagen aus Ratengleichungsmodellen verglichen. Trupke et al. [72] prognostizierte ein fundamental anderes Verhalten der optischen Verstärkung als das in direkten Halbleitern. Seine Vorhersage, dass die optische Verstärkung eines indirekten Übergangs um Größenordnungen stärker sein kann als die maximale Absorption dieses Übergangs, konnte, genau wie die Abhängigkeiten der Absorption von Phononenergie und Gittertemperatur, bestätigt werden. Die These, dass für indirekte Übergänge optische Verstärkung vor der Ladungsträgerinversion stattfinden kann, wurde ebenfalls

durch die mikroskopische Berechnung bestätigt. Der Einfluss der Zustandsdichte auf die Absorption zeigte eine direkte Proportionalität und gleicht somit dem direkten Halbleiter unter Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung. Die Ergebnisse, die zunächst unter einer stark vereinfachten, nämlich rotationssymmetrischen, Bandstruktur angefertigt wurden, lassen sich auch auf kompliziertere, winkelabhängige Bandstrukturen übertragen. Hierbei ergab sich die gleiche Abhängigkeit von der Zustandsdichte wie im Falle der winkelabhängigen Rechnung.

Bei direkten Halbleitern sorgt die Coulomb-Wechselwirkung für eine starke Änderung des Absorptionsspektrums. Hierbei entstehen neben einer Verstärkung der Absorption im Bereich des Kontinuums auch exzitonische Signaturen im Bereich der Bandlücke. Das Auftauchen von indirekten exzitonischen Signaturen, wie es beispielsweise von R. J. Elliott vorhergesagt wurde, konnte in dieser Arbeit nicht gezeigt werden. Es zeigte sich stattdessen ein vernachlässigbarer Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung hinsichtlich der Stärke der Absorption. Zwar zeigte sich eine Coulomb-bedingte Verschiebung der Absorption zu kleineren Energien für hohe Ladungsträgerdichten, doch keine exzitonischen Zustände innerhalb der indirekten Bandlücke. Für dieses Verhalten wurden verschiedene mögliche Gründe aufgeführt, und es sind weitere Untersuchungen notwendig, diesen Sachverhalt abschließend zu klären.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden Nichtgleichgewichtsphänomene an einem Ge/SiGe-Quantenfilm untersucht. Die Beschreibung der elektronischen Zustände der verspannten Quantenfilm-Heterostruktur erfolgte über eine 30 Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie, die es ermöglicht, die Bandstruktur über die gesamte erste Brillouinzone zu reproduzieren. Ferner wurden hiermit die Wellenfunktionen, die Dipol-, Coulomb- und Phonon-Matrixelemente berechnet.

Durch starke optische Anregung eines Ge/SiGe-Quantenfilms konnten C. Lange et al. [88] optische Verstärkung auf einer sehr kurzen Zeitskala nachweisen. Dieser hielt, aufgrund der schnellen Intervalley-Streuung der Elektronen vom  $\Gamma$ -Punkt ins  $L$ -Tal, nicht für sehr lange Zeit an, sondern verschwand nach wenigen Pikosekunden. Dies wurde zum Anlass genommen, die Ladungsträgerstreuung mithilfe der phononassistierten Gleichungen zu berechnen. Frühere Zugänge gab es über phänomenologische Ansätze oder mittels Monte-Carlo-Simulationen. Die Behandlung dieses Problems über die Lösung der Heisenberg-Bewegungsgleichung stellt eine alternative Methode dar. Für die Intervalley-Streuzeiten ergab sich eine Abweichung bei der Lösung der Gleichungen unter Beachtung oder Vernachlässigung der Gedächtniseffekte. Der Grund für diese Abweichung lässt sich auf die unbekannte Anfangsverteilung der phononassistierten Dichten zurückführen. Ob die Markov-Näherung bei der Behandlung dieser Probleme anwendbar ist, müssen weitere Untersuchungen zeigen. Durch einen Experiment-Theorie-Vergleich der Absorption für verschiedene Zeiten kann, wie das in der Referenz [88] ausgeführt wurde, die  $\Gamma$ -Punktsbesetzung bestimmt werden. Hieraus erhält man die tatsächliche Intervalley-Streuzeit der Elektronen. Mit der 30 Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie muss die Bandstruktur winkelabhängig am  $\Gamma$ -Punkt und sowohl am  $X$ - als auch am  $L$ -Punkt berechnet werden und im Anschluss darauf die phononassistierten Gleichungen gelöst werden. Der numerische Aufwand bei dieser Berechnung ist aufgrund der Bandstrukturechnung sehr groß, kann aber parallelisiert werden. Gleichwohl beläuft sich die Berechnung der Bandstruktur auf die Diagonalisierung der  $30N \times 30N$ - $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix für die Anzahl der  $k$ -Stützstellen mal die Anzahl der Winkelstützstellen.

---

Die Auswertung der zeitabhängigen Absorption für mehrere Pikosekunden nach der optischen Anregung in der Gruppe von Dr. Sangam Chatterjee gab Hinweise auf ein starkes Abkühlen des Lochsystems. Für einen Abkühlprozess muss allerdings auch ein Aufheizen voran gehen, für das es zunächst mehrere Möglichkeiten gibt. Um auszuschließen, dass das Aufheizen der Löcher durch die Überschussenergie bei nicht-resonanter Anregung entsteht, wurde das Experiment für verschiedene, unter anderem auch resonante Anregungen durchgeführt, und mithilfe eines Experiment-Theorie-Vergleichs wurden die Ladungsträgertemperaturen in Abhängigkeit von der Zeit bestimmt. Es konnte keine Abhängigkeit von der Anregungsenergie festgestellt werden. Der zweite Prozess, der ausgeschlossen werden konnte, ist, dass die Anregungsleistung das Aufheizen beeinflusst. Durch Anregungsleistungsabhängige Experimente und zugehörige Simulationen konnte auch diese Möglichkeit ausgeschlossen werden. Es ergab sich in allen Fällen das gleiche Abkühlen mit der gleichen Anfangstemperatur von ca. 800 K. Dieses Ergebnis wird als starker Hinweis auf eine schnelle Elektron-Loch-Kopplung zwischen  $\Gamma$ -Punkt-Löchern und  $L$ -Punkt-Elektronen interpretiert, der auf der gleichen Zeitskala stattfindet wie die Intervalley-Streuung der Elektronen. Hinsichtlich der Anwendung von Ge/SiGe-Quantenfilmheterostrukturen als optisch verstärkende Medien zeigt dieses Phänomen, dass nicht nur die Reduktion der  $\Gamma$ -Punktbesetzung durch die Intervalley-Streuung sondern auch das Aufheizen des Lochsystems zu einer Verringerung der optischen Verstärkung beiträgt. Der mikroskopische Prozess, der zu diesem schnellen Thermalisieren der beiden Ladungsträgerdichten führt, konnte bisher nicht identifiziert werden und stellt Teil von zukünftigen Untersuchungen dar. Die Hinweise auf exzitonische Resonanzen in indirekten Absorptionsspektren deuten ebenfalls auf eine starke Kopplung der  $\Gamma$ -Punkt-Löcher und der  $L$ -Punkt-Elektronen, obwohl eine  $1/q$ -Abhängigkeit zunächst auf eine schwache Coulomb-Wechselwirkung hindeutet.

Diese Arbeit bildet einen Anfang in der mikroskopischen Beschreibung indirekter Halbleiter und hat neben der erfolgreichen Beschreibung zahlreicher Phänomene auch eine Reihe von Fragen aufgeworfen, die es wert sind, in Zukunft untersucht zu werden. Durch die Verwendung der Cluster-Entwicklung kann möglicherweise, wenn es dann die Leistung der Computer erlaubt, die Coulomb-Wechselwirkung in höherer Ordnung berechnet werden. Auch kann durch die Verwendung eines quantisierten Lichtfelds eine vollständig quantenmechanische Beschreibung der indirekten Halbleiter erfolgen, die es dann ermöglicht, die Photolumineszenz von Silizium oder Germanium zu berechnen.



# A. Rotating Wave Approximation (RWA)

Die *Rotating Wave Approximation* (RWA) stellt ein Näherungsverfahren dar, um die Zeitschritte für die numerische Lösung der Differentialgleichungen wie die Halbleiter-Bloch-Gleichungen möglichst groß wählen zu können. Die Idee beruht auf der Annahme, dass die Zeitabhängigkeit der Größe, die berechnet werden soll, sich aufteilen lässt in einen schnell und einen langsam mit der Zeit veränderlichen Anteil. Damit die Näherungsmethode leicht nachvollziehbar ist und sich die Gleichungen leichter erfassen lassen, werden die Subbandindices nicht explizit angegeben.

## A.1. RWA der mikroskopischen Polarisation

Die Halbleiter-Bloch-Gleichung (2.66) haben in vereinfachter Schreibweise die Form

$$\begin{aligned} \frac{dp_{\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} = & -\frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,\mathbf{k}_{\parallel}} - \epsilon_{v,\mathbf{k}_{\parallel}}) p_{\mathbf{k}_{\parallel}} - \frac{i}{\hbar} (n_{c,\mathbf{k}_{\parallel}} - n_{v,\mathbf{k}_{\parallel}}) \Omega_{\mathbf{k}_{\parallel}} - \frac{p_{\mathbf{k}_{\parallel}}}{T_2} \\ & - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \hbar g_{\mathbf{q}_{\parallel}}^v (F_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^+ + F_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^-) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \hbar g_{\mathbf{q}_{\parallel}}^c (G_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^+ + G_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^-). \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Die mikroskopische Polarisation kann nach der Gleichung

$$p_{\mathbf{k}_{\parallel}}(t) = \tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}}(t) e^{-i\omega t} \quad (\text{A.2})$$

in einen zeitlich langsam veränderlichen Teil  $\tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}}(t)$  und einen schnell oszillierenden Teil  $\exp(i\omega t)$  zerlegt werden. Die bei dieser Zerlegung auftretende Frequenz  $\omega$  ist in der Größenordnung der Energie der Bandlücke des Halbleiterquantenfilms. Durch Einsetzen von Gleichung (A.2) in (A.1) und anschließendem Multiplizieren mit  $\exp(i\omega t)$  ergibt sich die Halbleiter-Bloch-Gleichung in der RWA:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} = & -\frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,\mathbf{k}_{\parallel}} - \epsilon_{v,\mathbf{k}_{\parallel}} - \hbar\omega) \tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}} - \frac{i}{\hbar} (n_{c,\mathbf{k}_{\parallel}} - n_{v,\mathbf{k}_{\parallel}}) \tilde{\Omega}_{\mathbf{k}_{\parallel}} - \frac{\tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}}}{T_2} \\ & - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \hbar g_{\mathbf{q}_{\parallel}}^v (\tilde{F}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ + \tilde{F}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^-) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \hbar g_{\mathbf{q}_{\parallel}}^c (\tilde{G}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^+ + \tilde{G}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^-). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Die neue renormierte Rabifrequenz  $\tilde{\Omega}_{\mathbf{k}_{\parallel}}$  ist durch

$$\tilde{\Omega}_{\mathbf{k}_{\parallel}} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} V_{q_{\parallel}} \tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}} + d_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} \quad (\text{A.4})$$

gegeben. Als optische Anregung verwendet man einen gaußförmigen Lichtpuls der Form

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\mathcal{E}_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}} (e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}) \quad (\text{A.5})$$

mit der Standardabweichung  $\sigma$  und der Intensität  $\mathcal{E}_0$ . Die Frequenz des Lichtpulses  $\omega_L$  liegt ebenfalls im Bereich der Bandkantenenergie. Die Multiplikation von  $\mathcal{E}(t)$  mit der Exponentialfunktion  $\exp i\omega t$  bei der Berechnung der renormierten Rabifrequenz in Gleichung (A.4) führt dazu, dass das Lichtfeld einen mit  $\omega + \omega_L$  und einen mit  $\omega - \omega_L$  oszillierenden Anteil erhält. Die Näherung in der RWA besteht darin, den Term mit der großen Frequenz gegenüber dem langsam oszillierendem Term zu vernachlässigen, da dieser die Absorption im Bereich der Bandkante nicht stark beeinflussen wird. Hierdurch hängt die Halbleiter-Bloch-Gleichung (A.3) für die mikroskopische Polarisation  $\tilde{p}_{\mathbf{k}_{\parallel}}$  ausschließlich von zeitlich langsam veränderlichen Größen ab, und die Schrittweite des numerischen Lösungsalgorithmus kann ohne Beachtung der schnell oszillierenden Terme gewählt werden. Dies gilt allerdings nur, wenn die phononassistierten Größen sich ebenfalls in einen schnell und einen langsam oszillierenden Anteil zerlegen lassen, was im Anhang A.2 gezeigt wird.

Die Ladungsträgerdichten vertragen sich mit dieser Näherung, da hier ein Produkt von mikroskopischer Polarisation und renormierter Rabifrequenz auftaucht. Die Gleichung für die Ladungsträgerdichte 2.67 kann als

$$\begin{aligned} \frac{dn_{c\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} &= -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[ p_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}} \Omega_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}} \right] + \left. \frac{dn_{c\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr}} \\ &= -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[ \tilde{p}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}} \tilde{\Omega}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel}} \right] + \left. \frac{dn_{c\mathbf{k}_{\parallel}}}{dt} \right|_{\text{corr}} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

geschrieben werden, wobei hier erneut der Term des klassischen Lichtfeldes vernachlässigt wird, der sich mit der Frequenz  $\omega + \omega_L$  zeitlich ändert.

## A.2. RWA der phononassistierten Polarisation

Damit die RWA angewandt werden kann, muss diese auch mit phononassistierten Polarisationen und Dichten aus Kapitel 2.2.3 verträglich sein. In der genäherten Gleichung für die mikroskopische Polarisation wurden bereits die Größen  $\tilde{F}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  und  $\tilde{F}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^{\pm}$  verwendet, die die phononassistierten Größen in der RWA bezeichnen. Sie beruhen auf der gleichen Annahme, wie die für die Polarisation (vergleiche Gleichung (A.2)), nämlich dass die phononassistierte Polarisation sich schreiben lässt als

$$\tilde{F}_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^{-} = F_{cv,\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{q}_{\parallel}}^{-} e^{-i\omega t}. \quad (\text{A.7})$$

Wie bereits im Kapitel 2.2.3, lassen sich die Gleichungen für die anderen phononassistierten Größen analog herleiten. In (2.86) treten ausschließlich Terme auf, die entweder von einer mikroskopischen oder einer phononassistierten Polarisation abhängen, nie von einem Produkt aus beiden. Daher lässt sich unter Verwendung der Näherung für die renormierte Rabifrequenz aus Gleichung (A.5) eine Gleichung herleiten, die nur von dem Anteil der phononassistierten Polarisation abhängt, der sich langsam mit der Zeit ändert.

Für die phononassistierten Dichten lässt sich die RWA aus dem gleichen Grund wie für die Ladungsträgerdichten anwenden, da hier ausschließlich Produkte von mikroskopischer oder phononassistierter Polarisation und renormierten Rabifrequenzen auftauchen. Diese lassen sich durch die Vernachlässigung der schnell oszillierenden Terme des

---

klassischen Lichtfeldes wieder in Gleichungen der Form wie die Ausgangsgleichungen überführen.



## B. Materialparameter

	Ge	Si		Ge	Si
$\Gamma_{8c}$	3.22	3.40	$\Gamma_{7c}$	3.01	3.40
$\Gamma_6$	0.90	4.185	$\Gamma_8$	0.0	0.0
$\Gamma_7$	-0.290	-0.044	$\Gamma_{6v}$	-13.14	-12.92
$\Gamma_{6q}$	18.36	13.46	$\Gamma_{8d}$	17.0	12.78
$\Gamma_{7d}$	17.0	12.78	$\Gamma_{8-3}$	10.47	9.66
$\Gamma_{6u}$	7.77	7.07			

**Tabelle B.1.:** Energien der 30 Bänder am  $\Gamma$ -Punkt bei  $T = 0$  K der Materialien Silizium und Germanium in eV [40].

	Ge	Si		Ge	Si
$E_p$	24.60	19.96	$E_{px}$	17.65	14.81
$E_{p3}$	5.212	4.475	$E_{p2}$	2.510	3.993
$E_{pS}$	1.071	1.092	$E_{pd}$	0.0051	1.193
$E_{pXd}$	12.23	7.491	$E_{p3d}$	15.76	9.856
$E_{p2d}$	27.59	20.76	$E_{pU}$	17.84	16.36

**Tabelle B.2.:** Kopplungsparameter für die 30 Band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstrukturparameter der Materialien Silizium und Germanium [40]. Die Parameter sind in Einheiten  $(\hbar p)^2/2m$  in eV angegeben.

	Ge	Si		Ge	Si
$C_{11}$	128.53 GPa <sup>a</sup>	167.72 GPa <sup>a</sup>	$C_{12}$	48.28 GPa <sup>a</sup>	64.98 GPa <sup>a</sup>
$a_{\Gamma_c}$	8.5 eV <sup>b</sup>	10.0 eV <sup>b</sup>	$b_{\Gamma_c}$	-	8.2 eV <sup>c</sup>
$c_{\Gamma_c}$	3.8 eV <sup>b</sup>	15.3 eV <sup>b</sup>	$a_{\Gamma_v}$	13.8 eV <sup>d</sup>	10.2 eV <sup>b</sup>
$b_{\Gamma_v}$	2.2 eV <sup>d</sup>	3.0 eV <sup>b</sup>			

**Tabelle B.3.:** Deformationspotentiale und relevante Elemente des Verspannungstensors für Germanium und Silizium. <sup>a</sup> Referenz [87]; <sup>b</sup> Referenz [42]; <sup>c</sup> Referenz [97]; <sup>d</sup> Diese Arbeit.



# Literaturverzeichnis

- [1] A. J. Steckl, J. H. Park und J. M. Zavada, *Prospects for rare earth doped GaN lasers on Si*, *Materials Today* **10**, 20 (2007).
- [2] S. S. Iyer und Y.-H. Xie, *Light emission from silicon*, *Science* **260**, 40 (1993).
- [3] D. A. B. Miller, *Silicon integrated circuits shine*, *Nature* **384**, 307 (1996).
- [4] W. Green, S. Assefa, A. Rylyakov, C. Schow, F. Horst und Y. Vlasov, *CMOS integrated silicon nanophotonics: Enabling technology for exascale computational systems*, <http://www.research.ibm.com/photonics> (2010).
- [5] *Blue waters update - NCSA/IBM joint statement*, <http://www.ncsa.illinois.edu/BlueWaters/system.html> (2011).
- [6] *Focussed session: Silicon photonics*, DPG Frühjahrstagung: Semiconductor Physics Division (2010).
- [7] T. Trupke, J. Zhao, A. Wang, R. Corkish und M. A. Green, *Very efficient light emission from bulk crystalline silicon*, *Applied Physics Letters* **82**, 2996 (2003).
- [8] A. G. Cullis und L. T. Canham, *Visible light emission due to quantum size effects in highly porous crystalline silicon*, *Nature* **353**, 335 (1991).
- [9] Z. H. Lu, D. J. Lockwood und J.-M. Baribeau, *Quantum confinement and light emission in SiO<sub>2</sub>/Si superlattices*, *Nature* **378**, 258 (1995).
- [10] Y. Q. Wang, G. L. Kong, W. D. Chen, H. W. Diao, C. Y. Chen, S. B. Zhang und X. B. Liao, *Getting high-efficiency photoluminescence from Si nanocrystals in SiO<sub>2</sub> matrix*, *Applied Physics Letters* **81**, 4174 (2002).
- [11] M. Razeghi, M. Defour, R. Blondeau, F. Omnes, P. Maurel, O. Acher, F. Brillouet, J. C. CFan und J. Salerno, *First cw operation of a Ga<sub>0.25</sub>In<sub>0.75</sub>As<sub>0.5</sub>P<sub>0.5</sub>/InP laser on a silicon substrate*, *Applied Physics Letters* **53**, 2389 (1988).
- [12] S. Bidnyk, B. D. Little, Y. H. Cho, J. Krasinski, J. J. Song, W. Yang und S. A. McPherson, *Laser action in GaN pyramids grown on (111) silicon by selective lateral overgrowth*, *Applied Physics Letters* **73**, 2242 (1998).

- [13] B. Kunert, K. Volz, J. Koch und W. Stolz, *Direct-band-gap Ga(NAsP)-material system pseudomorphically grown on GaP substrate*, *Applied Physics Letters* **88**, 182108 (2006).
- [14] Z. Mi, P. Bhattacharya, J. Yang und K. Pipe, *Room-temperature self-organised  $In_{0.5}Ga_{0.5}As$  quantum dot laser on silicon*, *Electronics Letters* **41**, 742 (2005).
- [15] J. H. Park und A. J. Steckl, *Demonstration of a visible laser on silicon using Eu-doped GaN thin films*, *Journal of Applied Physics* **98**, 056108 (2005).
- [16] M. Lindberg und S. W. Koch, *Effective Bloch equations for semiconductors*, *Physical Review B* **38**, 3342 (1988).
- [17] J. V. Moloney, J. Hader und S. W. Koch, *Quantum design of semiconductor active materials: Laser and amplifier applications*, *Laser and Photonics Reviews* **1**, 24 (2007).
- [18] C. Bückers, G. Blume, A. Thränhardt, C. Schlichenmaier, P. J. Klar, G. Weiser, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, T. J. C. Hosea, S. J. Sweeney, J.-B. Wang, S. R. Johnson und Y.-H. Zhang, *Microscopic electroabsorption line shape analysis for Ga(AsSb)/GaAs heterostructures*, *Journal of Applied Physics* **101**, 033118 (2007).
- [19] C. Bückers, A. Thränhardt, S. W. Koch, M. Rattunde, N. Schulz, J. Wagner, J. Hader und J. V. Moloney, *Microscopic calculation and measurement of the laser gain in a (GaIn)Sb quantum well structure*, *Applied Physics Letters* **92**, 071107 (2008).
- [20] T. Feldtmann, L. Schneebeli, M. Kira und S. W. Koch, *Quantum theory of light emission from a semiconductor quantum dot*, *Physical Review B* **73**, 155319 (2006).
- [21] J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch, *Influence of internal fields on gain and spontaneous emission in InGaN quantum wells*, *Applied Physics Letters* **89**, 171120 (2006).
- [22] M. Kira und S. Koch, *Many-body correlations and excitonic effects in semiconductor spectroscopy*, *Progress in Quantum Electronics* **30**, 155 (2006).
- [23] H. Haug und S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Fünfte edition, ISBN 978-981-283-884-1 (2009).
- [24] R. J. Elliott, *Intensity of optical absorption by excitons*, *Physical Review* **108**, 1384 (1957).
- [25] W. P. Dumke, *Interband transitions and maser action*, *Physical Review* **127**, 1559 (1962).
- [26] J. L. Cheng, J. Rioux, J. Fabian und J. E. Sipe, *Theory of optical spin orientation in silicon*, *Physical Review B* **83**, 165211 (2011).

- [27] G. Czycholl, *Theoretische Festkörperphysik*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Dritte edition, (2008).
- [28] G. D. Mahan, *Many Particle Physics*, Kluwer Academic / Plenum Publishers, Dritte edition (2000).
- [29] T. Feldtmann, *Influence of Phonons on Semiconductor Quantum Emission*, Dissertation, Philipps-Universität Marburg (2009).
- [30] M. G. Burt, *Direct derivation of effective-mass equations for microstructures with atomically abrupt boundaries*, *Physical Review B* **50**, 7518 (1994).
- [31] S. Richard, F. Aniel und G. Fishman, *Energy-band structure of Ge, Si, and GaAs: A thirty-band  $k.p$  method*, *Physical Review B* **70**, 235204 (2004).
- [32] M. Cardona, N. E. Christensen und G. Fasol, *Relativistic band structure and spin-orbit splitting of zinc-blende-type semiconductors*, *Physical Review B* **38**, 1806 (1988).
- [33] J. M. Luttinger und W. Kohn, *Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields*, *Physical Review* **97**, 869 (1955).
- [34] M. Cardona und F. H. Pollak, *Energy-band structure of germanium and silicon: The  $k.p$  method*, *Physical Review* **142**, 530 (1966).
- [35] S. B. Radhia, N. Fraj, I. Saidi und K. Boujdaria, *The eight-level  $k.p$  model for the conduction and valence bands of InAs, InP, InSb*, *Semiconductor Science and Technology* **22**, 427 (2007).
- [36] J. R. Chelikowsky und M. L. Cohen, *Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*, *Physical Review B* **14**, 556 (1976).
- [37] S. Y. Ren, X. Chen und J. D. Dow, *Tight-binding  $sp^3d^5$  hamiltonian for Si*, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **59**, 403 (1998).
- [38] Y. P. Varshni, *Temperature dependence of the energy gap in semiconductors*, *Physica* **34**, 149 (1967).
- [39] J. P. Dismukes, L. Ekstrom und R. J. Paff, *Lattice parameter and density in germanium-silicon alloys*, *The Journal of Physical Chemistry* **68**, 3021 (1964).
- [40] S. Richard, *Modelisation Physique de la Structure electronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les materiaux IV-VI massifs, constraints et dans les puits quantiques*, Dissertation, Universite Paris XI Orsay (2004).
- [41] G. L. Bir und G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*, IPST, ISBN 978-0706513677 (1975).
- [42] S. Richard, F. Aniel, G. Fishman und N. Cavassilas, *Energy-band structure in strained silicon: A 20-band  $k.p$  and bir-pikus hamiltonian model*, *Journal of Applied Physics* **94**, 1795 (2003).

- [43] S. Richard, F. Aniel und G. Fishman, *Band diagrams of Si and Ge quantum wells via the 30-band  $k \cdot p$  method*, *Physical Review B* **72**, 245316 (2005).
- [44] L.-W. Wang und A. Zunger, *Pseudopotential-based multiband  $k \cdot p$  method for 250 000-atom nanostructure systems*, *Physical Review B* **54**, 11417 (1996).
- [45] J. Wang, A. Rahman, A. Ghosh, G. Klimeck und M. Lundstrom, *On the validity of the parabolic effective-mass approximation for the I-V calculation of silicon nanowire transistors*, *Electron Devices, IEEE Transactions on* **52**, 1589 (2005).
- [46] K. Nehari, M. Lannoo, F. Michelini, N. Cavassilas, M. Bescond und J. L. Autran, *Improved effective mass theory for silicon nanostructures*, *Applied Physics Letters* **93**, 092103 (2008).
- [47] S. Tsujino, A. Borak, C. Falub, T. Fromherz, L. Diehl, H. Sigg und D. Grützmacher, *Intra-valence-band mixing in strain-compensated SiGe quantum wells*, *Physical Review B* **72**, 153315 (2005).
- [48] G. Bastard und J. Brum, *Electronic states in semiconductor heterostructures*, *Quantum Electronics, IEEE Journal of* **22**, 1625 (1986).
- [49] B. A. Foreman, *Elimination of spurious solutions from eight-band  $k \cdot p$  theory*, *Physical Review B* **56**, R12748 (1997).
- [50] B. Pasenow, S. W. Koch, J. Hader und J. V. Moloney, *Inuence of LO-phonon quantum kinetics on the linear optical properties of wurtzite InGaN quantum wells* (2010).
- [51] P. Y. Yu und M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Vierte edition, ISBN 36-420-0709-0 (2010).
- [52] S. Wei und M. Y. Chou, *Ab initio calculation of force constants and full phonon dispersions*, *Physical Review Letters* **69**, 2799 (1992).
- [53] R. Trommer und M. Cardona, *Resonant raman scattering in GaAs*, *Physical Review B* **17**, 1865 (1978).
- [54] M. H. Grimsditch, D. Olego und M. Cardona, *Absolute cross section of first-order raman scattering in GaAs*, *Physical Review B* **20**, 1758 (1979).
- [55] D. Braun, W. W. Rühle, C. Trallero-Giner und J. Collet, *Spectroscopic determination of the optical deformation-potential constant in semiconductors*, *Physical Review Letters* **67**, 2335 (1991).
- [56] W. Pötz und P. Vogl, *Theory of optical-phonon deformation potentials in tetrahedral semiconductors*, *Physical Review B* **24**, 2025 (1981).
- [57] G. H. Li, A. R. Goñi, K. Syassen und M. Cardona, *Intervalley scattering potentials of Ge from direct exciton absorption under pressure*, *Physical Review B* **49**, 8017 (1994).

- [58] M. Fischetti, *Monte carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. I. homogeneous transport*, *Electron Devices, IEEE Transactions on* **38**, 634 (1991).
- [59] C. Jacoboni und P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, Springer-Verlag Wien New York, Erste edition, ISBN 3-211-82110-4 (1989).
- [60] F. Murphy-Armando und S. Fahy, *First-principles calculation of carrier-phonon scattering in n-type  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  alloys*, *Physical Review B* **78**, 035202 (2008).
- [61] V. G. Tyuterev, S. V. Obukhov, N. Vast und J. Sjakste, *Ab initio calculation of electron-phonon scattering time in germanium*, *Physical Review B* **84**, 035201 (2011).
- [62] A. Thränhardt, H. J. Kolbe, J. Hader, T. Meier, G. Weiser und S. W. Koch, *Field-dependent absorption in superlattices: Comparison of theory and experiment*, *Applied Physics Letters* **73**, 2612 (1998).
- [63] C. Schlichenmaier, H. Grüning, A. Thränhardt, P. J. Klar, B. Kunert, K. Volz, W. Stolz, W. Heimbrod, T. Meier, S. W. Koch, J. Hader und J. V. Moloney, *Type I-type II transition in InGaAs-GaNAs heterostructures*, *Applied Physics Letters* **86**, 081903 (2005).
- [64] C. Bückers, S. Imhof, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch, *Microscopic modeling of quantum well gain media for VECSEL applications*, *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of* **15**, 984 (2009).
- [65] M. P. Kesler und E. P. Ippen, *Subpicosecond gain dynamics in GaAlAs laser diodes*, *Applied Physics Letters* **51**, 1765 (1987).
- [66] K. Meissner, B. Fluegel, H. Giessen, B. P. McGinnis, A. Paul, R. Binder, S. W. Koch, N. Peyghambarian, M. Grün und C. Klingshirn, *Spectral hole burning in the gain region of an inverted semiconductor*, *Physical Review B* **48**, 15472 (1993).
- [67] K. L. Hall, J. Mark, E. P. Ippen und G. Eisenstein, *Femtosecond gain dynamics in InGaAsP optical amplifiers*, *Applied Physics Letters* **56**, 1740 (1990).
- [68] W. Kutt, W. Albrecht und H. Kurz, *Generation of coherent phonons in condensed media*, *Quantum Electronics, IEEE Journal of* **28**, 2434 (1992).
- [69] T. Pfeifer, W. Kütt, H. Kurz und R. Scholz, *Generation and detection of coherent optical phonons in germanium*, *Physical Review Letters* **69**, 3248 (1992).
- [70] A. V. Kuznetsov und C. J. Stanton, *Theory of coherent phonon oscillations in semiconductors*, *Physical Review Letters* **73**, 3243 (1994).
- [71] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Muehlig, *Taschenbuch der Mathematik*, Deutsch (Harri), 7th edition, ISBN 978-3817120079 (2008).

- [72] T. Trupke, M. A. Green und P. Würfel, *Optical gain in materials with indirect transitions*, *Journal of Applied Physics* **93**, 9058 (2003).
- [73] M. J. Chen, C. S. Tsai und M. K. Wu, *Optical gain and co-stimulated emissions of photons and phonons in indirect bandgap semiconductors*, *Japanese Journal of Applied Physics* **45**, 6576 (2006).
- [74] O. Madelung, *Semiconductors - basic data*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Zweite edition (1996).
- [75] W. W. Chow und S. W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Erste edition, ISBN 35-406-4166-1 (1999).
- [76] T. C. McLean und R. Louden, *Exciton energy levels in silicon and germanium*, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **13**, 1 (1959).
- [77] N. O. Lipari und A. Baldereschi, *Energy levels of indirect excitons in semiconductors with degenerate bands*, *Physical Review B* **3**, 2497 (1971).
- [78] N. O. Lipari und M. Altarelli, *Theory of indirect excitons in semiconductors*, *Physical Review B* **15**, 4883 (1977).
- [79] K. L. Shaklee und R. E. Nahory, *Valley-orbit splitting of free excitons? the absorption edge of Si*, *Physical Review Letters* **24**, 942 (1970).
- [80] D. Labrie, M. L. W. Thewalt, I. J. Booth und G. Kirczenow, *Detailed ground- and excited-state spectroscopy of indirect free excitons*, *Physical Review Letters* **61**, 1882 (1988).
- [81] T. Suzuki und R. Shimano, *Time-resolved formation of excitons and electron-hole droplets in Si studied using terahertz spectroscopy*, *Physical Review Letters* **103**, 057401 (2009).
- [82] C. Klingshirn, *Semiconductor Optics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Zweite edition, ISBN 3-540-21328-7 (2005).
- [83] C. Jacoboni und L. Reggiani, *The monte carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*, *Review of Modern Physics* **55**, 645 (1983).
- [84] G. Isella, D. Chrastina, B. Rössner, T. Hackbarth, H.-J. Herzog, U. König und H. von Känel, *Low-energy plasma-enhanced chemical vapor deposition for strained Si and Ge heterostructures and devices*, *Solid-State Electronics* **48**, 1317 (2004), strained-Si Heterostructures and Devices.
- [85] D. J. Paul, *Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits*, *Semiconductor Science and Technology* **19**, R75 (2004).
- [86] S. Tsujino, H. Sigg, G. Mussler, D. Chrastina und H. von Känel, *Photocurrent and transmission spectroscopy of direct-gap interband transitions in Ge/SiGe quantum wells*, *Applied Physics Letters* **89**, 262119 (2006).

- [87] D. J. Paul, *8-band  $k.p$  modeling of the quantum confined stark effect in Ge quantum wells on Si substrates*, *Physical Review B* **77**, 155323 (2008).
- [88] C. Lange, N. S. Köster, S. Chatterjee, H. Sigg, D. Chrastina, G. Isella, H. von Känel, M. Schäfer, M. Kira und S. W. Koch, *Ultrafast nonlinear optical response of photoexcited Ge/SiGe quantum wells: Evidence for a femtosecond transient population inversion*, *Physical Review B* **79**, 201306 (2009).
- [89] M. Schäfer, *Microscopic Theory of Coherent and Incoherent Optical Properties of Semiconductor Heterostructures*, Dissertation, Philipps-Universität Marburg (2008).
- [90] D. W. Bailey und C. J. Stanton, *Calculations of femtosecond differential optical transmission in germanium*, *Journal of Applied Physics* **77**, 2107 (1995).
- [91] A. Othonos, H. M. van Driel, J. F. Young und P. J. Kelly, *Correlation of hot-phonon and hot-carrier kinetics in Ge on a picosecond time scale*, *Physical Review B* **43**, 6682 (1991).
- [92] M. Woerner, T. Elsaesser und W. Kaiser, *Inter-valence-band scattering and cooling of hot holes in p-type germanium studied by picosecond infrared pulses*, *Physical Review B* **41**, 5463 (1990).
- [93] M. Woerner, T. Elsaesser und W. Kaiser, *Relaxation processes of hot holes in p-type germanium studied by picosecond infrared spectroscopy*, *Physical Review B* **45**, 8378 (1992).
- [94] P. Supancic, M. Schullatz, U. Hohenester, P. Kocevar und L. Rota, *A theoretical analysis of the picosecond and sub-picosecond infrared-absorption spectroscopy of hot holes in germanium*, *Journal of Applied Physics* **81**, 1916 (1997).
- [95] J. Young, K. Wan und H. van Driel, *Picosecond raman scattering from non-equilibrium LO and TO phonons in germanium*, *Solid-State Electronics* **31**, 455 (1988).
- [96] H. Roskos, B. Rieck, A. Seilmeier und W. Kaiser, *Cooling of a carrier plasma in germanium investigated with subpicosecond infrared pulses*, *Applied Physics Letters* **53**, 2406 (1988).
- [97] A. Blacha, H. Presting und M. Cardona, *Deformation potentials of  $k=0$  states of tetrahedral semiconductors*, *physica status solidi (b)* **126**, 11–36 (1984).



# Vielen Dank an

- Angela Thränhardt, dass Du mich als Doktorand angenommen und mich hervorragend in der gesamten Zeit betreut hast. Du hattest für meine Ideen und Probleme immer ein offenes Ohr. Durch Dein Vertrauen hast Du mir die Möglichkeit gegeben, kreativ und selbstständig an meinen Themen zu arbeiten.
- Hans Christian Schneider, dass Sie das Zweitgutachten übernehmen und trotz zahlreicher Dienstreisen sich die Zeit nehmen, meiner Verteidigung in Chemnitz beizuwohnen.
- Dorothee Misselwitz, dass Du den Umgang mit der Verwaltung vereinfacht hast, Sicherheitsbelehrungen (für Theoretiker) in Tiramisu-Schlemmereien verwandeln konntest und ich die Kosten all meiner Dienstreisen erstattet bekommen habe.
- Stephan W. Koch, dass Du mir einen Schreibtisch in Marburg gegeben hast und ich dadurch leichter hin und her pendeln konnte. Ich danke Dir ausserdem für die tolle und erfolgreiche Zusammenarbeit bei den Bismiden.
- Sangam Chatterjee, Alexej Chernikov, Niko S. Köster und Kolja Kolata, für die ausgezeichneten Experimente an den Bismiden und den Ge/SiGe-Proben. Die Zusammenarbeit mit Euch war immer spannend, zielgerichtet und nicht selten auch von Erfolg gekrönt.
- Wolfgang W. Rühle, John Sipe und dem DAAD, dass Sie mir die Möglichkeit gegeben haben, in Toronto mein Wissen und meine Fähigkeiten zu erweitern.
- Andreas Jorde, für die Nachhilfe in deutscher Rechtschreibung und Grammatik.
- meine Diplomanden Christian und Cornelius für all das Hopping, insbesondere zwischen Büro und Mensa.
- meine Freunde aus Marburg Jan, Jan, Kasi, Manuel, Moritz und Stefan, dass Ihr mich in Chemnitz besucht habt und die Distanz zwischen den beiden Städten für mich habt schrumpfen lassen. Ihr wart eine große Unterstützung.
- meine MitbewohnerInnen Corinna, Jenny, Kilian, Norbert und Tony für die schöne Atmosphäre in der „Barbarei“. Vielen Dank für die vielen spannenden Gespräche und legendären Partys, die wir gemeinsam hatten. Meine schönsten Erinnerungen an die Zeit in Chemnitz verbinde ich mit Euch.
- meine Eltern, für die große Unterstützung während meiner Zeit in Chemnitz. Von den Umzügen zwischen den Städten über den Umgang mit Behörden bis zur Motorisierung habt Ihr Euch stets um mich gekümmert. Den zahlreichen „Einbestellungen“ zum Essen sind Steffi und ich immer gerne gefolgt.
- an meine große Liebe Steffi, dafür, dass Du mich immer unterstützt hast ohne Deine eigenen Ziele zu vernachlässigen. In der Zeit der Fernbeziehung ist meine Liebe zu Dir nur gewachsen und ich freue mich darauf, mit Dir zusammen zu erleben, wie unser Sohn heranwächst.



# Erklärung über die Selbstständigkeit

Ich erkläre, dass ich die Dissertation „Mikroskopische Theorie der optischen Eigenschaften indirekter Halbleiter-Quantenfilme“ selbstständig verfasst habe und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel genutzt wurden.

Chemnitz, den 12.10.2011

Sebastian Imhof



## Lebenslauf

### Persönliche Daten:

Name: Sebastian Imhof

Geburtsdatum: 24.01.1984

### Wissenschaftlicher Werdegang:

25.11.2008 bis 19.12.2011 Doktorand in der Arbeitsgruppe  
Theoretische Physik - Simulation Neuer Materialien  
an der Technischen Universität Chemnitz

13.02.2011 bis 12.05.2011 DAAD Stipendiat,  
Auslandsforschungsaufenthalt an der  
University of Toronto, Kanada

01.04.2004 bis 29.10.2008 Studium des Fachs Physik auf Diplom  
an der Philipps-Universität Marburg („sehr gut“),  
Titel der Diplomarbeit: *Mikroskopische Modellierung  
dichteabhängiger Photoreflexionsspektren  
in Halbleiterheterostrukturen*

## Wissenschaftliche Publikationen

### Zeitschriftenbeiträge

1. S. Imhof, C. Wagner, A. Thränhardt, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, O. Rubel, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton und T. Tiedje, *Luminescence dynamics in Ga(AsBi)*, *Applied Physics Letters* **98**, 161104 (2011)
2. S. Imhof, C. Wagner, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton, T. Tiedje, O. Rubel, und A. Thränhardt, *Evidence of two disorder scales Ga(AsBi)*, *Physica Status Solidi B* **248**, 851 (2010)
3. S. Imhof und A. Thränhardt, *Phonon-assisted transitions and optical gain in indirect semiconductors*, *Physical Review B* **82**, 085303 (2010)
4. S. Imhof, A. Thränhardt, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton, T. Tiedje, und O. Rubel, *Clustering Effects in Ga(AsBi)*, *Applied Physics Letters* **96**, 131115 (2010)
5. C. Bückers, E. Kühn, C. Schlichenmaier, S. Imhof, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney, O. Rubel, W. Zhang, T. Ackemann und S. W. Koch, *Quantum modeling of semiconductor gain materials and vertical-external-cavity surface-emitting laser systems*, *Physica Status Solidi B* **247**, 789-808 (2010)
6. C. Bückers, S. Imhof, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch, *Microscopic modeling of quantum well gain media for VECSEL applications*, *IEEE Journal of selected Topics in Quantum Electronics* **15**, 984 (2009)
7. S. Imhof, C. Bückers, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch, *Microscopic theory of the optical properties of Ga(AsBi)/GaAs quantum wells*, *Semiconductor Science and Technology* **23**, 125009 (2008)

### Konferenzbeiträge (nur Erstautorbeiträge)

1. Eingeladener Vortrag: S. Imhof, C. Wagner, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, O. Rubel, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton, T. Tiedje und A. Thränhardt, *Luminescence Dynamics in Ga(AsBi)*, 2nd International Workshop on Bismuth-Containing Semiconductors: Theory, Simulation, and Experiment, Guildford, UK (2011)
2. Posterbeitrag: S. Imhof, C. Wagner, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, O. Rubel, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton, T. Tiedje und A. Thränhardt, *Disorder Effects in Ga(AsBi)*, 10th International Workshop on Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors (NOEKS), Paderborn (2010)

3. Vortrag: S. Imhof, A. Thränhardt, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, O. Rubel, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton und T. Tiedje, *Clustering Effects in Ga(AsBi)*, 1st International Workshop on Bismuth-Containing Semiconductors: Theory, Simulation, and Experiment, Ann Arbor, USA (2010)
4. Poster: S. Imhof, A. Chernikov, M. Koch, N. S. Köster, K. Kolata, S. Chatterjee, S. W. Koch, O. Rubel, X. Lu, S. R. Johnson, D. A. Beaton, T. Tiedje und A. Thränhardt, *Disorder Effects in Ga(AsBi)*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg (2010)
5. Vortrag: S. Imhof, C. Bückers, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch, *Microscopic theory of the optical properties of Ga(AsBi)/GaAs quantum wells*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden (2009)
6. Poster: S. Imhof, C. Bückers, B. Metzger, A. Thränhardt, S. Chatterjee und S. W. Koch, *Characterization of GaSb-based heterostructures by spectroscopic investigations*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin (2008)
7. Poster: S. Imhof, C. Bückers, B. Metzger, A. Thränhardt und S. W. Koch, *Systematische Analyse von Bandoffsets in GaAs-basierenden Mehrfachquantenfilmen*, Materialforschungstag Mittelhessen, Rauischholzhausen (2007)