

Optische Erzeugung außergewöhnlicher Ladungsträgerverteilungen in Halbleiterstrukturen



Dissertation

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

dem Fachbereich Physik
der Philipps-Universität Marburg
vorgelegt von

Bernhard Pasenow

aus
Berlin

Marburg/Lahn, Juni 2006

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg
als Dissertation angenommen am: *14. Juli 2006*

Erstgutachter: *Prof. Dr. S. W. Koch*

Zweitgutachter: *Prof. Dr. R. Noack*

Tag der mündlichen Prüfung: *14. August 2006*

Inhaltsverzeichnis

Kurzer Überblick	3
1 Photonische Kristalle	5
1.1 Einleitung	6
1.2 Die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen	8
1.2.1 Maxwell-Gleichungen in inhomogenen linearen Medien	9
1.2.2 Die makroskopische Halbleiter-Polarisation als Quellterm	10
1.2.3 Der longitudinale Feldanteil	14
1.3 Finite-Difference-Time-Domain (FDTD)	16
1.3.1 Mur-Randbedingungen zweiter Ordnung	19
1.3.2 Einkopplung des Feldes	20
1.3.3 Num. selbstkonsistente Lösung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gl.	21
1.3.4 Anwendbarkeit der Rotating-Wave-Approximation	23
1.3.5 "Messung" von Absorption und Gain in den FDTD-Simulationen	24
1.4 Ortsdarstellung des Hamilton-Operators in inhomogenen Systemen	25
1.5 Die Heisenberg-Gleichungen des Halbleiter-Systems	28
1.5.1 Näherungen für den Grenzfall schwacher Anregung	30
1.5.2 Dephasieren und Relaxation in das Quasi-Gleichgewicht	32
1.6 Exzitonische Wellenpaket-Dynamik von Quantendraht-Dichten	35
1.6.1 Das verwendete Modellsystem	36
1.6.2 Numerische Ergebnisse zu den Coulomb-Modifikationen	38
1.6.3 Räumlich inhomogene exzitonische Zustände	39
1.6.4 Kohärente Wellenpaket-Dynamik	42
1.6.5 Wellenpaket-Dynamik mit Dephasieren und Relaxieren	45
1.7 Räumlich inhomogener Halbleiter-Gain in photonischen Kristallstrukturen	49
1.7.1 Vorstellung des verwendeten Modellsystems	50
1.7.2 Lineare Absorptionsspektren der unangeregten Struktur	51
1.7.3 Dichteabhängige Quasi-Gleichgewichtsspektren	52
1.7.4 Reduzierung der Laserschwelle durch die Coulomb-Modifikationen	53
1.8 Verstärkte Licht-Materie-Wechselwirkung in 1D photonischen Kristallen	56
1.8.1 Das mikroskopische Halbleiter-Modell	57
1.8.2 Slow-Light-Propagation in der PBE-Struktur	58
1.8.3 Untersuchungen zum PBE-VCSEL	68
1.9 Kurzes Resümee	75
2 Kohärente Spin- und Ladungsströme in Halbleiter-Quantenfilmen	77
2.1 Einleitung	79
2.2 Bandstruktur und $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Störungsrechnung	82
2.2.1 Luttinger-Parameter: Effektive-Masse-Tensor	86

2.2.2	Wellenfunktionen der Leitungsband-Elektronen	89
2.2.3	Wellenfunktionen der Valenzband-Elektronen	90
2.2.4	Symmetrische Quantenfilme	93
2.2.5	Bemerkungen zum asymmetrischen Quantenfilm	96
2.3	Matrixelemente und Auswahlregeln	97
2.3.1	Optische Inter- und Intradband-Matrixelemente	98
2.3.2	Coulomb-Wechselwirkung	100
2.3.3	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	103
2.4	Heisenberg-Bewegungsgleichungen	105
2.4.1	Optische Bloch-Gleichungen	106
2.4.2	Coulomb-Anteil in Hartree-Fock-Näherung	106
2.4.3	Streuung durch Gleichgewichts-LO-Phononen	107
2.4.4	Bemerkungen zur Markov-Näherung	110
2.4.5	Zusammenfassung	111
2.5	Kohärente optische Erzeugung von Spin- und Ladungsströmen	113
2.5.1	Einführung und Definitionen	116
2.5.2	Beschreibung der untersuchten Materialsysteme	118
2.5.3	Erste Ergebnisse zu den Intraleitungsband-Strömen	132
2.5.4	Phasenabhängigkeiten	138
2.5.5	Analyse der "irregulären" Ströme	142
2.5.6	Relaxation der Intradband- und Intervenzbandströme	147
2.5.7	Numerische Ergebnisse in Markov-Näherung	157
2.6	Kurzes Resümee	161
	Literaturverzeichnis	163
	Publikationen und Vorträge zu den hier gezeigten Ergebnissen	175
	Wissenschaftlicher Werdegang	177

Kurzer Überblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der optischen Erzeugung "außergewöhnlicher" Ladungsträgerverteilungen in Halbleitern. Dieser Titel wurde allgemein gehalten, um zwei doch recht unterschiedliche Themenbereiche auf einen gemeinsamen Nenner zu bringen. Doch was sind diese "außergewöhnlichen" Verteilungen? Zum einen wird es um die optische Erzeugung räumlich inhomogener Elektrondichten in Halbleiter-Quantendrähten gehen. Die räumliche Inhomogenität wird dabei eine Folge der Strukturierung der Halbleiter-Umgebung sein. Zum anderen soll die optische Erzeugung kohärenter Ströme in Halbleiter-Quantenfilmen untersucht werden. Hierbei werden durch die Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen asymmetrische k -Raum-Besetzungen erzeugt, die zu makroskopischen Ladungs- und Spinströmen führen. Beide Themenbereiche finden in der aktuellen Forschung viel Beachtung.

Die Erforschung von photonischen Kristallen geht auf einen Vorschlag von S. John [65] und E. Yablonovitch [150] aus dem Jahr 1987 zurück. Photonische Kristalle sind im Bereich einer Lichtwellenlänge periodische dielektrische Strukturen, die aufgrund der Periodizität ähnlich wie kristalline Festkörper Bandstrukturen aufweisen. Diese Bandstrukturen beschreiben jedoch nicht die im Material erlaubten elektronischen, sondern die erlaubten photonischen Zustände. In Analogie zu Halbleitern gibt es auch hier Materialien die eine Bandlücke aufweisen, in diesem Fall ein Bereich in der Bandstruktur, in dem keine photonischen Moden vorhanden sind. Entsprechend können Frequenzanteile eines elektromagnetischen Feldes, die innerhalb dieser Bandlücke liegen, nicht durch die periodische Struktur propagieren. Dieser Effekt hat zahlreiche Anwendungen. Photonische Kristalle werden zur Optimierung von Lasern [62, 61, 128], in Antennen [18], zur Reduzierung von ungewollten Verlusten in Glasfasern [71, 117] oder als Wellenleiter und Strahlteiler [97, 7] eingesetzt. Neben diesen transversalen besitzen diese Strukturen jedoch noch weitere erstaunliche Eigenschaften. Erinnert man sich an die klassische Elektrodynamik, so ist bekannt, dass sich das elektrische Feld einer Punktladung unterhalb einer ebenen Grenzfläche durch die Einführung einer Spiegelladung beschreiben lässt. In Analogie dazu erzeugen freie Ladungen in einem photonischen Kristall Grenzflächen-Polarisationen [134], die wiederum die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei oder mehreren Ladungen modifizieren. Damit weist ein photonischer Kristall neben den weitläufig bekannten transversalen Eigenschaften auch longitudinale Eigenschaften auf. Insbesondere um letztere wird es in Kapitel 1 gehen. Die modifizierte Coulomb-Wechselwirkung hat großen Einfluss auf die exzitonischen Eigenschaften der Halbleiter und führen zu interessanten Signaturen in den Absorptionsspektren [134, 34, 35]. Die vorliegende Arbeit führt die Erforschung der longitudinalen Eigenschaften fort und erweitert die untersuchten Bereiche auf die Dynamik und Relaxation der optisch angeregten Ladungsträger. Eine detaillierte Analyse der exzitonischen Resonanzen wird dabei zeigen, dass die exzitonische Absorption durch mehrere inhomogene Resonanzen getragen wird. Regt man diese Zustände gezielt an, so zeigen die zugehörigen, ebenfalls räumlich inhomogenen Dichten eine interessante Wellenpaket-Dynamik. Im Langzeit-Limes konvergieren die Elektrondichten gegen inhomogene Gleichgewichtsverteilungen [107]. Unter Ausnutzung dieser Gleichgewichtsdichten kann die Laserschwelle des Halbleiters durch das Auftreten von lokalem Gain erniedrigt werden [113]. Zu-

letzt wird in diesem Kapitel noch die Verstärkung der Licht-Materie-Wechselwirkung im Bereich der Bandkantenmoden eines eindimensionalen photonischen Kristalls untersucht. Dieser Abschnitt wird einige interessante transversale Eigenschaften dieser Moden zeigen und analysieren. Insbesondere wird es dabei auch um so genannte PBE-VCSEL gehen [108].

Für die Untersuchung der kohärenten Ströme stellt sich die Situation grundlegend anders dar. In diesem Fall erzeugt man bei der optischen Anregung keine räumlichen Inhomogenitäten. Durch die Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergänge werden jedoch Elektronverteilungen angeregt, die zu Ladungs- oder Spinströmen führen können. Diese Ströme beruhen einzig auf Interferenzphänomenen und werden nicht durch ein statisches äußeres Feld erzeugt. Das Auftreten solcher "außergewöhnlicher" Ladungsträgerverteilungen wurde im Jahr 1996 von Atanasov et al. [2] (→ Ladungsströme) und im Jahr 2000 von R.D.R. Bhat und J.E. Sipe [11] (→ Spinströme) vorhergesagt. Beide Vorschläge konnten experimentell realisiert werden [50, 131, 130, 60]. Mögliche Anwendungen für die Spinströme könnten in Zukunft aus dem Bereich der "Spintronics" kommen [148, 153].

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entstehung und Relaxation dieser Ströme. Insbesondere soll es dabei um Effekte gehen, die aufgrund der Verwendung eines realistischen, auf der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie basierenden Halbleiter-Modells auftreten. Während mit einem idealisierten Halbleiter-Modell grundlegende Strom-Eigenschaften [30, 29] untersucht werden können, sind die Ergebnisse des hier vorliegenden Modells charakteristisch für das verwendete Material und sollten sich auch experimentell nachweisen lassen. Die zur Beschreibung des Halbleiter-Materials benötigten Parameter entstammen alle experimentellen Messungen. Das verwendete Modell ist vollständig mikroskopischer Natur und beinhaltet keine Fit-Parameter, mit denen sich die Dynamik der Halbleiter-Polarisationen und Elektron-Besetzungen beliebig manipulieren lässt. In den Numerischen Auswertungen zu Kapitel 2 werden ausgewählte Ladungs- und Spinströme mit den zugehörigen Verteilungen gezeigt, Phasenverschiebungen sowie die Relaxation aufgrund der Streuung an LO-Phononen untersucht.

Die außergewöhnlichen Ladungsverteilungen dieser Arbeit sind somit zum einen durch Ausnutzung der transversalen und longitudinalen Eigenschaften erzeugte räumlich inhomogene Elektrondichten. Zum anderen sind dies auf der Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen beruhende, im \mathbf{k} -Raum asymmetrische Besetzungen, die zu einem makroskopischen Strom führen können. Für weitere Details sei auf die Einführungen der beiden Kapitel in den Abschnitten 1.1 und 2.1 verwiesen.

1 Photonische Kristalle

Eine Studie zu den
transversalen und longitudinalen Eigenschaften
photonischer Kristallstrukturen
und deren Auswirkung auf die Dynamik
der mikroskopischen Halbleiter-Kohärenzen
im Rahmen einer
selbstkonsistenten semiklassischen Theorie

1.1 Einleitung

Symmetrien sind fundamentale Eigenschaften physikalischer Systeme. In der Festkörperphysik führt die periodische Anordnung von Gitteratomen zur Ausbildung der elektronischen Bandstrukturen. Je nach Anordnung weisen diese Bandstrukturen die unterschiedlichsten Eigenschaften aus. Die atomaren Bestandteile sowie die vorliegende Gittergeometrie bestimmen unter anderem, ob ein Festkörper ein Leiter, Halbleiter oder Isolator ist. Durch Materialzusammensetzung und Symmetrie lassen sich somit die elektronischen Eigenschaften beeinflussen. Im Jahr 1987 wurde von S. John [65] und E. Yablonovitch [150] vorgeschlagen, mit einer periodischen Anordnung dielektrischer Materialien Strukturen mit einer photonischen Bandstruktur zu erzeugen in der Hoffnung, durch geschicktes Design die photonischen Eigenschaften an gewünschte Anforderungen anpassen zu können. In Analogie zur Situation in Festkörpern sollten sich dabei Strukturen finden lassen, die Eigenschaften wie beispielsweise photonische Bandlücken aufweisen. Schon damals bekannte, einfache Vertreter solcher Strukturen sind die so genannten Bragg-Spiegel, in denen zwei Materialschichten mit unterschiedlicher dielektrischer Konstante abwechselnd hintereinander periodisch angeordnet werden. Soll die Bragg-Struktur um eine bestimmte Frequenz herum für eine gegebene Propagationsrichtung eine photonische Bandlücke aufweisen, müssen dafür lediglich die Schichtdicken jeweils einem Viertel der zu dieser Frequenz gehörenden lokalen Materialwellenlänge entsprechen. Frequenzanteile von elektromagnetischen Wellen, die innerhalb der Bandlücke liegen, werden in Richtung der Periodizität vollständig von der Bragg-Struktur reflektiert, da in diesem Bereich keine optischen Moden vorhanden sind, die eine Propagation ermöglichen.

Photonische Kristalle werden im Allgemeinen nach der Anzahl der Raumrichtungen, in denen eine periodische Strukturierung vorliegt, charakterisiert. Abbildung 1.1 zeigt drei einfache Beispiele für verschieden dimensionale photonische Kristalle. Seit dem Vorschlag aus dem

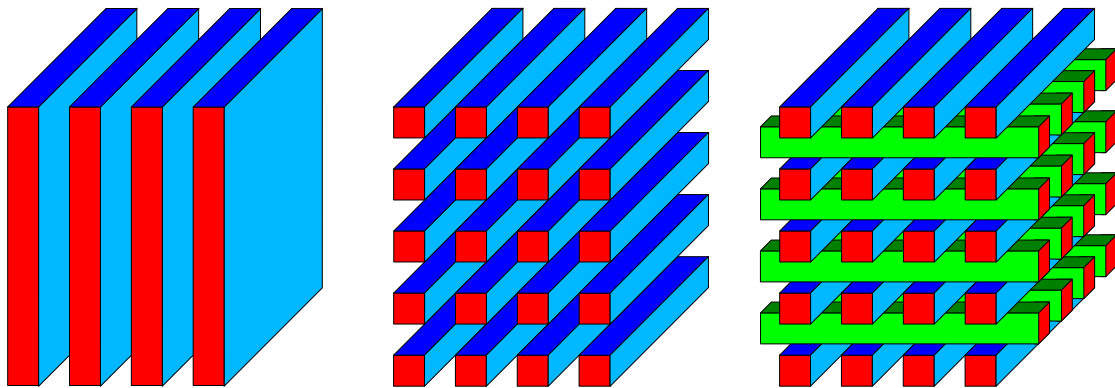


Abbildung 1.1: Von links nach rechts: Beispiele für ein-, zwei und dreidimensionale photonische Kristalle. Der dreidimensionale photonische Kristall stellt eine so genannte Woodpile-Struktur (Holzstapel) dar.

Jahr 1987 widmete man sich in den folgenden Jahren intensiv der theoretischen und experimentellen Erforschung geeigneter Strukturen sowie deren Realisierung. Bei der Herstellung werden die unterschiedlichsten Verfahren verwendet.

Für eindimensionale Strukturen werden im Wesentlichen die Techniken und Fabrikationsschritte verwendet, die auch bei der Herstellung von Quantenfilm-Strukturen zum Einsatz kommen. Dabei wird in der Regel Atomlage für Atomlage auf ein Basismaterial aufgebracht. Die Fabrikationsschritte sind mittlerweile sehr weit entwickelt und erlauben die Herstellung

von Strukturen mit nahezu atomarer Präzision.

Bei der Fabrikation von zweidimensionalen photonischen Kristallen kommen häufig Ätztechniken zum Einsatz. Hierbei wird zunächst eine Ätzmaske auf das zu bearbeitende Material aufgebracht, die dann über den Ätzvorgang auf den Kristall übertragen wird. Danach wird die Maske in der Regel wieder entfernt. Wie man sich leicht vorstellen kann, eignen sich diese Ätztechniken im Wesentlichen nur zur Herstellung zweidimensionaler photonischer Kristalle. Diese werden vor allem als quadratisch oder hexagonal innerhalb eines homogenen Materials angeordnete zylindrische Strukturen realisiert [147, 49, 47]. Durch das Einbringen von Störstellen, d.h. das Weglassen einzelner Zylinder oder auch ganzer Zylinderreihen, eignen sich diese Strukturen hervorragend als Resonatoren oder Wellenleiter.

Bei der Herstellung dreidimensionaler photonischer Kristalle wurden in den letzten Jahren häufig von mehreren Laserstrahlen erzeugte Interferenzmuster auf spezielle Photolacke übertragen [96]. Die belichteten Bereiche härten dabei aus, die unbelichteten Bereiche können sich danach leicht entfernt werden. Mit dieser Technik lassen sich photonische Kristalle mit beachtlicher Größe und hoher Qualität herstellen. Typische Vertreter dreidimensionaler photonischer Kristalle sind Yablonivite-, Lincoln-log-, Woodpile- oder inverse Opal-Strukturen [58, 80, 79, 23, 26, 96, 43]. Dabei konnten teilweise sogar Materialien hergestellt werden, die eine komplette dreidimensionale photonische Bandlücke aufweisen.

Photonische Kristalle haben einige praktische Anwendungen. Sie werden zur Optimierung von Lasern [62, 61, 128], in Antennen [18], zur Reduzierung von ungewollten Verlusten in Glasfasern [71, 117] oder als Wellenleiter und Strahlteiler [97, 7] eingesetzt. Viele Ergebnisse und Vorschläge sind insbesondere für die Telekommunikationsbranche interessant, die sich neue Möglichkeiten in der optischen Datenübertragung erhofft. Die meisten Forschungsprojekte sind daher auf die Erforschung und Anwendung der transversalen Eigenschaften von photonischen Kristallen fokussiert. Einen guten Überblick über den aktuellen Forschungsstand einiger deutscher Arbeitsgruppen liefert das aus dem DFG-Schwerpunkt "Photonische Kristalle" hervorgegangene Buch "Photonic Crystals - Advances in Design, Fabrication, and Characterization" [21].

In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, ob sich photonische Kristalle wirklich nur auf ihre transversalen Eigenschaften reduzieren lassen. Für homogene Medien liefern die Maxwell-Gleichungen neben den für die Lichtpropagation relevanten Wellengleichungen schließlich auch die Grundlagen für die Coulomb-Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen [63]. Die Antwort auf diese Frage geben T. Stroucken et. al. in dem Artikel "Excitons in photonic crystals" [134]. In einem photonischen Kristall führen durch freie Ladungen induzierte Grenzflächenpolarisationen zu einer Modifizierung der Coulomb-Wechselwirkung. Diese stark abstandsabhängigen, longitudinalen Eigenschaften photonischer Kristalle führen jedoch nur in der unmittelbaren Umgebung dieser Grenzflächen zu merklichen Modifikationen. Für die reine Propagation von elektromagnetischen Wellen spielen die longitudinalen Effekte nur eine untergeordnete Rolle. Viele untersuchte photonische Kristallstrukturen beinhalten jedoch auch optisch aktive Materialien wie Halbleiter. In diesen Systemen können durch optische Anregung freie Ladungsträger erzeugt werden. Die Coulomb-Wechselwirkung spielt für die mikroskopischen Vorgänge innerhalb der Halbleiter eine große Rolle und führt unter anderem zum Auftreten von Exzitonen. Je nach Lage des Halbleiters innerhalb der photonischen Kristallstruktur sollten sich die longitudinalen Beiträge als mehr oder weniger signifikante Änderungen der Halbleiter-Eigenschaften zeigen. In den letzten Jahren sind entsprechende Untersuchungen zu den modifizierten exzitonischen Eigenschaften solcher Strukturen durchgeführt worden [35, 34, 106]. Diese Untersuchungen sollen im Folgenden fortgeführt werden.

Dafür soll zunächst in Abschnitt 1.2 mit Hilfe der klassischen Lagrangedichten und des Übergangs zur zweiten Quantisierung eine semiklassische Theorie eingeführt werden, mit der sich die Licht-Materie-Wechselwirkung zwischen einem klassischen elektromagnetischen Feld und den quantenmechanischen Halbleiter-Kohärenzen beschreiben lässt. Hierbei werden die transversalen und longitudinalen Feldanteile durch Verwendung der verallgemeinerten Coulomb-Eichung [137, 143] von einander getrennt. Die finalen Ergebnisse dieses Abschnitts stellen die so genannten Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen für den transversalen Anteil und die Selbstkonsistenzgleichung des dielektrischen Verschiebungsfeldes für den longitudinalen Anteil dar. Für die numerische Implementierung der Maxwell-Gleichungen wird in Abschnitt 1.3 mit dem FDTD-Algorithmus ein geeignetes Verfahren vorgestellt, mit dem die Lichtfeld-Propagation simuliert werden kann. Durch Kombination mit dem Predictor-Corrector-Algorithmus [110], der für die Halbleiter-Dynamik verwendet wird, lässt sich das vollständige gekoppelte Gleichungssystem, d.h. die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen, selbstkonsistent lösen. Damit sind alle radiativen Zerfallsprozesse der Halbleiter-Kohärenzen sowie die Absorption und optische Verstärkung des Lichtfeldes berücksichtigt. In diesem Zusammenhang wird auch beschrieben, wie man den FDTD-propagierten, selbstkonsistenten Feldern Absorptionsspektren entnehmen kann. Mit der Herleitung des Hamilton-Operators und den zugehörigen Heisenberg-Gleichungen für das durch den photonischen Kristall räumlich inhomogene Halbleiter-System sowie einigen Bemerkungen zu möglichen Näherungen bei der Beschreibung von Dephasierungs- und Relaxationsmechanismen in den Abschnitten 1.4 und 1.5 wird die Beschreibung der theoretischen Grundlagen abgeschlossen.

Die folgenden drei Abschnitte 1.6–1.8 liefern einige Anwendungen. Dabei konzentrieren sich die ersten beiden Abschnitte mehr auf die durch die Coulomb-Modifikationen hervorgerufenen exzitonischen Effekte in räumlich inhomogenen Halbleitern, während im dritten Abschnitt die verstärkte Licht-Materie-Kopplung in eindimensionalen photonischen Kristallen mit räumlich homogenen Halbleiter-Quantenfilmen untersucht wird. Diese separate Untersuchung der transversalen und longitudinalen Eigenschaften wurde gewählt, da zum einen die Trennung eine einfachere Zuordnung der Effekte ermöglicht und zum anderen eine gemeinsame Untersuchung beider Effekte numerisch sehr aufwendig gewesen wäre. Abschließend soll in Abschnitt 1.9 ein kurzes Resümee über das gesamte Kapitel gezogen werden.

1.2 Die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen

In diesem Abschnitt sollen kurz die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen eingeführt und die Zerlegung der elektromagnetischen Felder in ihre longitudinalen und transversalen Anteile gezeigt werden. Zudem sollen die dabei üblichen Näherungen und Methoden an das durch den photonischen Kristall inhomogene System angepasst werden. Das Ziel der theoretischen Betrachtungen ist eine selbstkonsistente Theorie für die gekoppelte zeitliche Entwicklung des elektromagnetischen Feldes und der optischen Anregung des Halbleiter-Materials, die gleichzeitig auch die elektrostatischen Eigenschaften des Materials korrekt beschreibt. Dafür soll eine semi-klassische Theorie verwendet werden, d.h. der Halbleiter wird mit einer mikroskopischen Theorie beschrieben, während die Dynamik des elektromagnetischen Feldes über die Maxwell-Gleichungen klassisch behandelt wird.

1.2.1 Maxwell-Gleichungen in inhomogenen linearen Medien

Die Propagation von elektromagnetischen Wellen durch ein makroskopisches inhomogenes Material wird durch die räumlich inhomogenen Maxwell-Gleichungen bestimmt:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = 0, \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} = \mathbf{j}. \quad (1.4)$$

Dabei ist \mathbf{E} und \mathbf{H} die makroskopischen elektrischen und magnetischen Felder, \mathbf{D} und \mathbf{B} das dielektrische Verschiebungsfeld und die magnetische Induktion sowie ρ und \mathbf{j} die freien Ladungs- und Stromdichten im inhomogenen Material. Neben den Maxwell-Gleichungen müssen auch die Bewegungsgleichungen der darin vorkommenden Quellterme, d.h. der Ladungs- und Stromdichten, bekannt sein sowie die grundlegenden Zusammenhänge $\mathbf{D} = \mathbf{D}[\mathbf{E}]$ und $\mathbf{B} = \mathbf{B}[\mathbf{H}]$, welche die makroskopischen mit den mikroskopischen Feldern verbinden. Diese Relationen können je nach Situation beliebig kompliziert sein, wenn z.B. anisotrope, nicht-lokale, frequenzabhängige und vielleicht sogar nicht-lineare Medien vorliegen. Im Folgenden soll ein einfaches Modell eines dielektrischen photonischen Kristalls aus nicht magnetischen Materialien ($\Rightarrow \mu(\mathbf{r}) = 1$) verwendet werden. Dafür sollen die Zusammenhänge $\mathbf{D}[\mathbf{E}]$ und $\mathbf{B}[\mathbf{H}]$ über lineare Gesetze beschreiben werden:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} \quad \text{und} \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (1.5)$$

Dabei sind $\epsilon(\mathbf{r})$ die dielektrische Konstante und μ_0 die magnetische Suszeptibilität. Die dielektrische Funktion ist im gewählten Modell unabhängig von der Frequenz und nimmt den Wert des lokalen Mediums an, d.h. sie ist innerhalb eines homogenen Teilvolumens räumlich konstant. Alle anderen auch nicht-linearen Beiträge von $\mathbf{D}[\mathbf{E}]$ werden durch die Licht-Materie-Wechselwirkung beim Lösen der mikroskopischen Gleichungen des Halbleiter-Materials berücksichtigt.

Wie üblich sollen die Maxwell-Gleichungen im Folgenden durch Einführung des Vektor- und Skalarpotentials

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{und} \quad \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}} - \nabla \phi \quad (1.6)$$

gelöst werden. Durch Einsetzen in die inhomogenen Maxwell-Gleichungen erhält man zwei gekoppelte Gleichungen:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = -\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \nabla \dot{\phi} + \mu_0 \mathbf{j}, \quad (1.7)$$

$$\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r}) \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} + \nabla \phi \right) = -\rho / \epsilon_0 \quad (1.8)$$

Damit ist das Skalarpotential keine wirklich unabhängige Variable. Bei der Einführung des Vektor- und Skalarpotentials hat man jedoch noch die Freiheit, eine geeignete Eichtransformation [63] vorzunehmen. In homogenen Medien, d.h. $\epsilon(\mathbf{r}) = \text{const}$, verwendet man häufig zur Trennung der transversalen und longitudinalen Feldanteile die Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Im homogenen Fall hängt das Skalarpotential damit nur noch von der Ladungsdichte ab. In der

semiklassischen Näherung wird dieser Anteil des elektrischen Feldes voll quantenmechanisch behandelt (\rightarrow Coulomb-Wechselwirkung), während der zum Vektorpotential gehörende Anteil (\rightarrow Lichtfeld-Propagation, etc.) klassisch behandelt wird. In inhomogenen Medien führt die Ortsabhängigkeit der dielektrischen Konstante bei Verwendung der gewöhnlichen Coulomb-Eichung zu nicht verschwindenden Beiträgen zum Skalarpotential, selbst bei Abwesenheit von externen Ladungen. Daher ist anstelle der normalen die verallgemeinerte Coulomb-Eichung [143, 137]

$$\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{verallgemeinerte Coulomb-Eichung}) \quad (1.9)$$

zu verwenden. Diese Eichung zerlegt das dielektrische Verschiebungsfeld in seine longitudinalen und transversalen Anteile:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_L + \mathbf{D}_T \quad \text{mit } \mathbf{D}_T = -\epsilon(\mathbf{r})\dot{\mathbf{A}} \quad \text{und } \mathbf{D}_L = -\epsilon(\mathbf{r})\nabla\phi \quad (1.10)$$

Für Teilvolumina G_i mit konstanter dielektrischer Funktion, d.h. $\epsilon(\mathbf{r}) = \text{const}$ für $\mathbf{r} \in G_i$, geht die verallgemeinerte in die herkömmliche Coulomb-Eichung über.

In der semiklassischen Theorie werden die transversalen Anteile des dielektrischen Verschiebungsfeldes und des magnetischen Feldes klassisch behandelt. Dafür sind die gekoppelten Wellengleichungen

$$\nabla \times \frac{\mathbf{D}_T}{\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})} + \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B} = 0 \quad (1.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \mu_0 \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D}_T = \mu_0 \mathbf{j}_T \quad (1.12)$$

zu lösen, wobei \mathbf{j}_T der transversale Anteil der Stromdichte ist, der als Quellterm für den klassischen Anteil des elektromagnetischen Feldes dient.

1.2.2 Die makroskopische Halbleiter-Polarisation als Quellterm der transversalen Wellengleichungen

Für ein inhomogenes Material, das aus einem passiven photonischen Kristall und einem aktiven Halbleiter zusammengesetzt ist, soll im Folgenden gezeigt werden, welche Beziehung zwischen den mikroskopischen Halbleiter-Kohärenzen und dem transversalen Anteil der Stromdichte besteht. Dafür muss zunächst der Hamilton-Operator des Gesamtsystem aufgestellt werden. Für die klassischen Anteile entspricht dieser der Hamilton-Funktion. Der Hamilton-Operator besteht im Wesentlichen aus drei Termen [56] $H = H_0 + H_I + H_C$, wenn man von der Wechselwirkung mit Phononen absieht. Dabei berücksichtigt H_0 die Einteilchen-Bandstruktur, H_I die Licht-Materie- und H_C die Coulomb-Wechselwirkung, wobei H_I auf die Wechselwirkung mit einem klassischen Lichtfeld beschränkt wird. Die Coulomb-Wechselwirkung wird durch den longitudinalen Anteil des elektromagnetischen Feldes bestimmt. Im Folgenden soll die exakte Form des semiklassischen Hamilton-Operators ausgehend vom klassischen Lagrange-Formalismus hergeleitet werden. Dafür wird für die Wechselwirkung zwischen den Halbleiter-Elektronen und dem Lichtfeld die so genannte minimale Kopplung [25]

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A} \quad \text{und} \quad V \rightarrow q\phi \quad (1.13)$$

eingeführt. Mit dieser Ersetzung liefert die klassische Hamilton-Funktion $H = p^2/(2m) + V$ für ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{m} \sum_i (p_i - qA_i) \nabla A_i - q \nabla \phi \\ \dot{\mathbf{r}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) = \mathbf{v}\end{aligned}\quad (1.14)$$

Bildet man von der zweiten Gleichung die Zeitableitung, erhält man durch Einsetzen der ersten Gleichung die klassische Newton'sche Bewegungsgleichung mit der Lorentz-Kraft:

$$\begin{aligned}m \frac{d}{dt} \dot{\mathbf{r}} &= \dot{\mathbf{p}} - q \dot{\mathbf{A}} - q(\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla) \mathbf{A} \\ &= q \left[-(\dot{\mathbf{A}} + \nabla \phi) + \underbrace{\sum_i (v_i \nabla A_i)}_{=\mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{A}} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} \right] = q[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]\end{aligned}\quad (1.15)$$

Unter Verwendung der minimalen Kopplung hat die Schrödinger-Gleichungen für die Elektron-Feldoperatoren nach der Quantisierung, d.h. $H(\mathbf{p}, \dots) \rightarrow H(-i\hbar\nabla, \dots)$, aufgrund des Korrespondenzprinzips folgende Form:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= [(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2/(2m) + V_{ext} + q\phi] \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} &= [(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2/(2m) + V_{ext} + q\phi] \psi^+\end{aligned}\quad (1.16)$$

Hierbei ist $\psi^+(\mathbf{r})$ der Erzeuger und $\psi(\mathbf{r})$ der Vernichter eines Elektrons am Ort \mathbf{r} . Zur Aufstellung des Hamilton-Operators, der neben der Einteilchen-Bandstruktur der Teilchen auch die Wechselwirkung mit dem semiklassischen elektromagnetischen Feld beinhaltet, muss zunächst die klassische Lagrange-Funktion durch die Lagrange-Dichte \mathcal{L} dargestellt werden [143, 25]:

$$\begin{aligned}L(t) = \int d^3r \mathcal{L}(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r \frac{1}{2} [\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) (\dot{\mathbf{A}} + \nabla \phi)^2 - \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2] \\ &\quad - \int d^3r \frac{i\hbar}{2} [\dot{\psi}^+(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) - \psi^+(\mathbf{r}) \dot{\psi}(\mathbf{r})] \\ &\quad - \int d^3r \psi^+(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V_{ext} + q\phi \right] \psi(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (1.17)$$

Dieser Ausdruck lässt sich in drei Teile aufspalten. Der erste Teil der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_0 = -\frac{i\hbar}{2} \left[\dot{\psi}^+(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) - \psi^+(\mathbf{r}) \dot{\psi}(\mathbf{r}) \right] + \psi^+(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} - V_{ext} \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

ist der Anteil des Schrödinger-Feldes eines geladenen Teilchens in einem externen Potential, der zweite Teil

$$\mathcal{L}_{em} = \frac{1}{2} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}) \quad (1.19)$$

entspricht dem Anteil des freien elektromagnetischen Feldes und der dritte Teil

$$\mathcal{L}_I = -\psi^+(\mathbf{r}) \left[\frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 - \mathbf{p}^2}{2m} + q\phi \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (1.20)$$

steht für die Wechselwirkung zwischen beiden Systemen. Unter Anwendung der Funktionalableitung [48] liefert die Lagrange-Funktion die klassischen Bewegungsgleichungen, wobei bei der Auswertung der Ableitungen $\dot{\pi}_q = \partial\mathcal{L}/\partial q$ jeweils die Lagrange-Gleichung

$$\dot{\pi}_q = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}} \quad (1.21)$$

verwendet wird. Damit erhält man für die elektromagnetischen Felder die beiden inhomogenen Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned} \pi_\phi &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}} = 0 \\ \dot{\pi}_\phi &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} = -\nabla\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})(\dot{\mathbf{A}} + \nabla\phi) - q\psi^+\psi = 0 \\ \Rightarrow \nabla \cdot \mathbf{D} &= q\psi^+\psi = \rho \end{aligned} \quad (1.22)$$

$$\begin{aligned} \pi_A &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\mathbf{A}}} = \epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})(\dot{\mathbf{A}} + \nabla\phi) = -\mathbf{D} \\ \dot{\pi}_A &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{A}} = -\frac{1}{\mu_0}\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \frac{q}{m}\psi^+(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\psi = -\dot{\mathbf{D}} \\ \Rightarrow \nabla \times \mathbf{H} - \dot{\mathbf{D}} &= \frac{q}{m}\psi^+(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\psi = \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.23)$$

und für die Feldoperatoren die Schrödinger-Gleichungen (1.16)

$$\begin{aligned} \pi_\psi &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}} = \frac{i\hbar}{2}\psi^+ \\ \dot{\pi}_\psi &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi} = -\frac{i\hbar}{2}\dot{\psi}^+ - \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V_{ext} + q\phi \right] \dot{\psi}^+ = \frac{i\hbar}{2}\dot{\psi}^+ \end{aligned} \quad (1.24)$$

$$\begin{aligned} \pi_{\psi^+} &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}^+} = -\frac{i\hbar}{2}\psi \\ \dot{\pi}_{\psi^+} &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^+} = \frac{i\hbar}{2}\dot{\psi} - \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V_{ext} + q\phi \right] \dot{\psi} = -\frac{i\hbar}{2}\dot{\psi}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Wegen $\pi_\phi = 0$ ist das Skalarpotential ϕ keine unabhängige Variable und soll im Folgenden durch die anderen dynamischen Größen ersetzt werden. Unter Ausnutzung der verallgemeinerten Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r})$ wird dafür zunächst der erste Term der Lagrange-Funktion (1.17) umgeformt:

$$\begin{aligned} \int \epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})(\dot{\mathbf{A}} + \nabla\phi)^2 d^3r &= \int \epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})[\dot{\mathbf{A}}^2 + (\nabla\phi)^2] d^3r \\ \Leftrightarrow \int \frac{\mathbf{D}^2}{\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})} d^3r &= \int \left(\frac{\mathbf{D}_T^2}{\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})} + \frac{\mathbf{D}_L^2}{\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})} \right) d^3r \end{aligned} \quad (1.26)$$

In dieser Eichung entspricht die Ladungsdichte der Divergenz des longitudinalen dielektrischen Verschiebungsfeldes:

$$\rho = \nabla \cdot \mathbf{D} = -\nabla \cdot [\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})(\dot{\mathbf{A}} + \nabla \phi)] = -\nabla \cdot [\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \nabla \phi] = \nabla \cdot \mathbf{D}_L \quad (1.27)$$

Damit kann das longitudinale dielektrische Verschiebungsfeld in Gleichung (1.26) durch die Ladungsdichte ersetzt

$$\begin{aligned} \int \frac{\mathbf{D}_L^2}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} d^3r &= \int \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) (\nabla \phi)^2 d^3r = - \int d^3r \nabla \phi \cdot \mathbf{D}_L \\ &= \int d^3r \phi \nabla \cdot \mathbf{D}_L = \int d^3r \phi(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.28)$$

und die Hamilton-Funktion aufgestellt werden:

$$\begin{aligned} H &= \int \pi_\phi \dot{\phi} + \pi_A \dot{\mathbf{A}} + \pi_\psi \dot{\psi} + \pi_{\psi^+} \dot{\psi}^+ d^3r - L \\ &= \frac{1}{2} \int \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \dot{\mathbf{A}}^2 + \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 d^3r \\ &\quad + \int \psi^+(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V_{ext} + \frac{q\phi}{2} \right] \psi(\mathbf{r}) d^3r \end{aligned} \quad (1.29)$$

Wird noch das Coulomb-Potential als Lösung der Poisson-Gleichung mit Delta-Inhomogenität

$$-\nabla \cdot \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \nabla V^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \Rightarrow \quad \phi(\mathbf{r}) = \int V^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d^3r' \quad (1.30)$$

eingeführt und die Darstellung der Ladungsdichte über die Feldoperatoren $\rho(\mathbf{r}) = q\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ verwendet, erhält man den üblichen semiklassischen Hamilton-Operator:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int \frac{\mathbf{D}_T^2}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} + \frac{\mathbf{B}^2}{\mu_0} d^3r \quad (H_{Feld}) \\ &\quad + \int \psi^+(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V_{ext} \right] \psi(\mathbf{r}) d^3r \quad (H_0 + H_I) \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint \rho(\mathbf{r}) V_C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d^3r d^3r' \quad (H_{Coulomb}) \end{aligned} \quad (1.31)$$

Die Bewegungsgleichungen der transversalen Felder erhält man weiterhin nach dem klassischen Hamilton-Formalismus. Mit der Definition aus Gleichung (1.23) kann man damit folgende Relation

$$\mathbf{j} = -\frac{\delta H_I}{\delta \mathbf{A}} = \frac{q}{m} \psi^+ (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \psi \quad (1.32)$$

für die Stromdichte angeben. Mit dem Kommutator $[(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2, \mathbf{r}] = -2i\hbar(\mathbf{p} - q\mathbf{A})$ und den Schrödinger-Gleichungen für die Feldoperatoren (1.16) lässt sich damit der Zusammenhang zwischen der Stromdichte und der makroskopischen Polarisation

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+ q\mathbf{r} \psi) = \frac{q}{m} \psi^+ (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \psi = \mathbf{j} \quad (1.33)$$

angeben. Der makroskopische Polarisationsstrom wird über die Heisenberg-Gleichung bestimmt, so dass insgesamt folgendes Gleichungssystem, die so genannten Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen, zu lösen ist:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{P} \rangle &= \langle [\mathbf{P}, H] \rangle, \\ \nabla \times \frac{\mathbf{D}_T}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} &= 0 \quad \text{und} \quad \nabla \times \mathbf{B} - \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}_T = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{P} \rangle \end{aligned} \quad (1.34)$$

Damit muss nun nur noch der longitudinale Anteil weiter ausgewertet werden.

1.2.3 Der longitudinale Feldanteil

Im vorigen Abschnitt wurde das Coulomb-Potential $V^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ formal über die Poisson-Gleichung (1.30) eingeführt. Bis auf wenige Ausnahmen wie ein homogenes Medium, zwei dielektrische Medien, die durch eine ebene Grenzfläche getrennt sind, oder eine dielektrische Kugel in einem homogenen Medium (vgl. dazu [63, 106, 6, 33]) kann die Poisson-Gleichung (1.30) nicht analytisch gelöst werden. Für eine numerische Lösung ist es vorteilhafter mit einer Integralgleichung zu arbeiten [135, 95, 106]:

$$V^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r'' \nabla'' \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}|} \cdot \mathbf{E}^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'), \quad (1.35)$$

Hierbei ist $\mathbf{E}^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\nabla V^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ das elektrische Feld am Ort \mathbf{r} , das durch eine am Ort \mathbf{r}' positionierte Einheitsladung erzeugt wird. Bei der Herleitung wird lediglich folgende Darstellung der Delta-Distribution

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') = -\frac{1}{4\pi} \Delta_r \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \quad (1.36)$$

aus [63] verwendet und partiell integriert. Die dielektrische Funktion wird als stückweise konstant angesetzt, was eine übliche Näherung in photonischen Kristallen ist. Das Volumenintegral in (1.35) kann teilweise ausgeführt werden, wenn man die Randbedingungen

$$\mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{D}_i(\mathbf{r}) = \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{D}_j(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in \partial G_{ij} \quad (1.37)$$

$$\mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \times \mathbf{E}_j(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in \partial G_{ij} \quad (1.38)$$

für das elektrische Feld \mathbf{E}^l und das dielektrische Verschiebungsfeld \mathbf{D}^l an den Grenzflächen G_{ij} zwischen zwei Medien G_i und G_j mit unterschiedlicher dielektrischer Konstante ausnutzt. Der Vektor $\mathbf{n}_i(\mathbf{r})$ ist dabei die Normale auf der Grenzfläche ∂G_{ij} am Ort \mathbf{r} in Richtung G_j . Zudem ist zu beachten, dass die dielektrische Funktion $\epsilon(\mathbf{r})$ innerhalb der Gebiete G_i konstant ist

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_i = \text{const} \quad \text{für } \mathbf{r} \in G_i \quad (1.39)$$

und dadurch innerhalb der Volumen G_i beliebig mit den Ableitungsoperatoren vertauscht werden kann. Zunächst wird Gleichung (1.35) jedoch mit Hilfe der Produktregel auf folgende Form gebracht:

$$\begin{aligned} V^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_i \frac{1}{4\pi} \int_{G_i} d^3r'' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} (\nabla_{r''} \mathbf{E}_i^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')) \\ &\quad - \sum_i \frac{1}{4\pi} \int_{G_i} d^3r'' \nabla_{r''} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \mathbf{E}_i^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \right) \end{aligned} \quad (1.40)$$

Unter Ausnutzung der Poisson-Gleichung (1.30) wird aus dem ersten Teil nichts anderes als das mit der lokalen dielektrischen Konstante abgeschirmte Coulomb-Potential einer Punktladung:

$$V_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r}')} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.41)$$

Der zweite Teil von Gleichung (1.40) umfasst die Coulomb-Modifikationen durch den photonischen Kristall. Unter Verwendung des Gauß'schen Satzes kann dieser Anteil auf folgende Form gebracht werden:

$$\delta V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \sum_i \frac{1}{4\pi} \int_{\partial G_i} da'' \frac{\mathbf{n}_i(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \cdot \mathbf{E}_i^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \quad (1.42)$$

Das Oberflächenintegral ∂G_i kann nun in eine Summe von Integralen über die Grenzflächen ∂G_{ij} zerlegt werden:

$$\delta V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \sum_{i < j} \frac{1}{4\pi} \int_{\partial G_{ij}} da'' \frac{\mathbf{n}_i(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \cdot [\mathbf{E}_i^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') - \mathbf{E}_j^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')] \quad (1.43)$$

mit $\mathbf{n}_i(\mathbf{r}) = -\mathbf{n}_j(\mathbf{r})$ für $\mathbf{r} \in \partial G_{ij}$

Mit den Stetigkeitsbedingungen (1.37) und der Material-Gleichung (1.5) ergeben sich daraus folgende durch den photonischen Kristall hervorgerufene Coulomb-Korrekturen:

$$\delta V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i < j} \left(\frac{1}{\epsilon_i} - \frac{1}{\epsilon_j} \right) \int_{\partial G_{ij}} da'' \frac{\mathbf{n}_i(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \cdot \mathbf{D}_i^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \quad (1.44)$$

Damit hat das Coulomb-Potential V^C zwei Beiträge. V_0 ist das gewöhnliche Coulomb-Potential, das mit dem lokalen Wert der dielektrischen Funktion statisch abgeschirmt wird. Der zweite Term, die Coulomb-Inhomogenität δV , wird durch die an den Grenzflächen ∂G_{ij} induzierten Oberflächenpolarisationen erzeugt. Für einen großen Beitrag von δV sollte der dielektrische Kontrast groß und der Abstand der Ladung zur Oberfläche möglichst klein sein. Im Gegensatz zu homogenen Medien ist das Coulomb-Potential in inhomogenen Medien nicht nur vom Relativabstand, sondern explizit von beiden Koordinaten \mathbf{r} und \mathbf{r}' abhängig.

Für die numerische Berechnung sollte das Coulomb-Potential durch Anwendung des Operators $-4\pi\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r}_\gamma)\mathbf{n}_i \cdot \nabla[\dots]$ auf den homogenen (1.41) und inhomogenen (1.44) Anteil in eine Selbstkonsistenz-Gleichung für die Normalkomponente des dielektrischen Verschiebungsfeldes

$$D_{n_i}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{D}_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (1.45)$$

transformiert werden:

$$4\pi D_{n_i}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} - \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \sum_{k < j} \left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_k} - \frac{\epsilon_i}{\epsilon_j} \right) \times \int_{\partial G_{kj}} da'' \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r}_\gamma - \mathbf{r}''}{|\mathbf{r}_\gamma - \mathbf{r}''|} D_{n_k}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \quad (1.46)$$

Hierbei ist $\mathbf{r}_\gamma = \mathbf{r} - \gamma \mathbf{n}_i(\mathbf{r})$ eine infinitesimale Verschiebung des Ortes \mathbf{r} von der Grenzfläche G_{ij} weg in das Gebiet G_i hinein. Dieses Konstrukt wird notwendig, da man anstelle eines stetigen Verlaufs der dielektrischen Funktion an den Grenzflächen näherungsweise einen sprunghaften Übergang angesetzt hat. Durch die infinitesimale Verschiebung ist zum einen die dielektrische Konstante eindeutig definiert, zum anderen wird das Auftreten von Singularitäten vermieden. Ein solcher Grenzprozess ist aufgrund der Stetigkeitsbedingung (1.37) wohl definiert. Gleichung (1.46) lässt sich noch weiter vereinfachen, wenn der Limes vor dem Integral ausgeführt wird:

$$\begin{aligned} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \left[\mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r}_\gamma - \mathbf{r}''}{|\mathbf{r}_\gamma - \mathbf{r}''|^3} \right] &= \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}''}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|^3} - \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \left[\frac{\gamma}{|\mathbf{r}_\gamma - \mathbf{r}''|^3} \right] \\ &= \mathbf{n}_i(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}''}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|^3} - 2\pi \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \end{aligned} \quad (1.47)$$

Die Gültigkeit des Limes (1.47) lässt sich für einfache Geometrien (ebene Grenzfläche, Zylindermantel, Kugel) durch kurze Rechnung analytisch nachweisen, dürfte aber auch für beliebige glatte Oberflächen erhalten bleiben. Für den einfachen Fall von nur zwei Medien mit dielektrischer Konstante ϵ_1 und ϵ_2 erhält man damit

$$\begin{aligned} D_{n_1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{1}{4\pi} \frac{2 \cdot \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \cdot \mathbf{n}_1(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &+ \frac{1}{2\pi} \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \int_{\partial G} da'' \mathbf{n}_1(\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}''}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|^3} \cdot D_{n_1}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (1.48)$$

als Selbstkonsistenzgleichung für die Normalkomponente des dielektrischen Verschiebungsfeldes. Dies ist eine Fredholm-Integralgleichung vom Typ 2 [3]. Eine numerische Lösung ist mit den in Referenz [110] vorgeschlagenen Methoden möglich (vgl. dazu auch [106]).

1.3 Finite-Difference-Time-Domain (FDTD)

In diesem Abschnitt sollen kurz die Grundlagen der Finite-Difference-Time-Domain (FDTD) Methode vorgestellt werden, mit deren Hilfe die Lichtpropagation in diesem Kapitel numerisch gelöst werden soll. Wie der Name schon besagt, basiert der FDTD-Code im Wesentlichen auf der Finite-Differenz-Formel

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (1.49)$$

für die erste Ableitung [110]. Für die Herleitung dieser so genannten zentralen Differenz subtrahiert man die Taylor-Darstellung

$$f(x \pm \Delta x) = f(x) \pm \Delta x \frac{df(x)}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \pm O(\Delta x^3) \quad (1.50)$$

der Funktionswerte zu den Orten $x \pm dx$ voneinander. Diese Zentrale-Differenzen-Formel wird nun auf die Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{dt} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{d\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{dt} &= -\frac{1}{\mu_0 \mu(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.51)$$

angewendet. Hierbei sind $\epsilon(\mathbf{r})$ die Dielektrizitätskonstante und $\mu(\mathbf{r})$ die magnetische Permeabilität. Wie schon bei der Herleitung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen erwähnt, soll die photonische Kristallstruktur näherungsweise als Zusammensetzung verlustfreier, linearer, unmagnetischer ($\mu(\mathbf{r}) = 1$) und frequenzunabhängiger Medien betrachtet werden kann. Damit sind beide Funktionen reell und stückweise konstant.

Bei dem gekoppelten Gleichungssystem hängt die zeitliche Entwicklung des elektrischen Feldes nur vom aktuellen magnetischen Feld ab. Denkt man an eine numerische Implementierung der Zeitableitung, hängt der neue Wert des elektrischen Feldes $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ nur vom vorherigen Wert $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \Delta t)$ und dem aktuellen Wert des magnetischen Feldes $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ ab. Analoges gilt für das magnetische Feld:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r}, t + \Delta t/2) - \mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \Delta t/2)}{\Delta t} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\mathbf{H}(\mathbf{r}, t + \Delta t/2) - \mathbf{H}(\mathbf{r}, t - \Delta t/2)}{\Delta t} &= -\frac{1}{\mu_0 \mu(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.52)$$

Damit müssen beide Felder bei der numerischen Lösung der Maxwell-Gleichungen nicht zum gleichen Zeitpunkt bekannt sein. Man kann also das magnetische Feld zu den Zeitpunkten $t \in \{\dots, -2\Delta t, -\Delta t, 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots\}$ und das elektrische Feld zu den um $\Delta t/2$ verschobenen Zeitpunkten $t \in \{\dots, -3\Delta t/2, -\Delta t/2, \Delta t/2, 3\Delta t/2, \dots\}$ berechnen.

Die Diskretisierung der Ortsableitung ist etwas aufwendiger. Eine einfache Verschiebung des H-Gitters analog zum Formalismus bei der Zeitableitung bringt jedenfalls nicht den gewünschten Erfolg. Man kann jedoch durch geeignete Platzierung der einzelnen Feldkomponenten versuchen, an jedem Punkt des Raumgitters nur eine dieser Komponenten berechnen zu müssen. Betrachtet man die Rotation

$$\nabla \times \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{dA_z}{dy} - \frac{dA_y}{dz} \\ \frac{dA_x}{dz} - \frac{dA_z}{dx} \\ \frac{dA_y}{dx} - \frac{dA_x}{dy} \end{pmatrix} \quad (1.53)$$

stellt man fest, dass zum Bilden der Finite-Differenz-Ableitungen folgende Anordnungen der Felder entlang der kartesischen Raumrichtungen bekannt sein müssen:

- x-Richtung: Abfolge $\dots, H_y, E_z, H_y, E_z, \dots$, bzw. $\dots, E_y, H_z, E_y, H_z, \dots$
- y-Richtung: Abfolge $\dots, H_z, E_x, H_z, E_x, \dots$, bzw. $\dots, E_z, H_x, E_z, H_x, \dots$
- z-Richtung: Abfolge $\dots, H_x, E_y, H_x, E_y, \dots$, bzw. $\dots, E_x, H_y, E_x, H_y, \dots$

Damit liegen z.B. die Komponenten H_y und E_z im Raumgitter in x-Richtung auf einer Geraden, wobei analog zur Zeitdiskretisierung H_z um einen halben Schritt Δx gegenüber E_z verschoben ist. Durch geschickte Anordnung aller Abfolgen im Raumgitter erhält man daraus, wie in Abbildung 1.2 dargestellt, den Yee-Würfel [136]. Definiert man nun

$$(i, j, k, n) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) \quad (1.54)$$

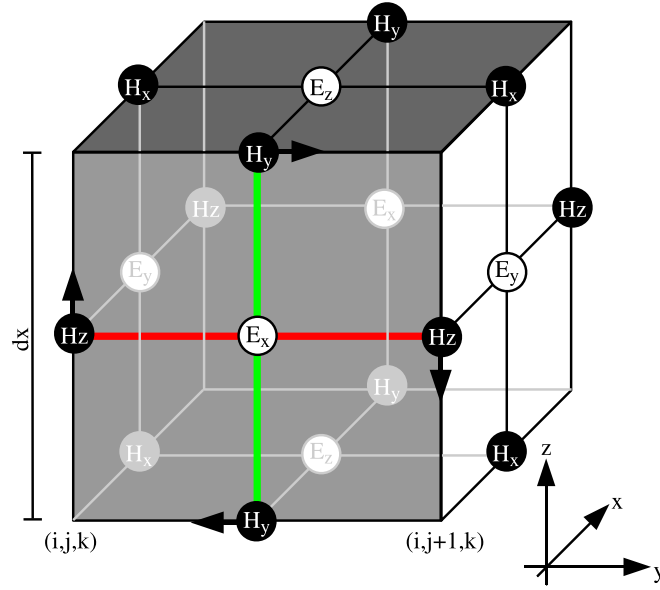


Abbildung 1.2: Platzierung der Feldkomponenten im Raumgitter nach Yee [151, 136]. Entlang der grünen Linie kann die Finite-Differenz-Ableitung $\frac{dH_y}{dz}$ sowie entlang der roten Linie die Finite-Differenz-Ableitung $\frac{dH_z}{dy}$ zur Gitterposition von E_x berechnet werden.

kann man anhand des Yee-Würfels den Feldkomponenten folgende Positionen zuordnen:

$$\begin{aligned} E_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} & \quad E_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} & \quad E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} \\ H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^n & \quad H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^n & \quad H_z \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \end{aligned} \quad (1.55)$$

Bei der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung ist zu beachten, dass die Courant-Stabilitätsbedingung $\Delta x \geq c\Delta t$ erfüllt wird. Damit kann man nun die FDTD-Gleichungen angeben, wobei hier als Beispiel nur die Gleichungen für E_x und H_x gezeigt werden sollen.

$$\begin{aligned} & \frac{E_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \\ & = \left[\frac{H_z \Big|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\epsilon_0 \epsilon \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \Delta y} - \frac{H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^n - H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^n}{\epsilon_0 \epsilon \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \Delta z} \right] \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$\begin{aligned} & \frac{H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta t} \\ & = - \left[\frac{E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\mu_0 \mu \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta y} - \frac{E_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\mu_0 \mu \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta z} \right] \end{aligned} \quad (1.57)$$

Die Gleichungen der anderen Komponenten ergeben sich durch zyklische Permutation der Raumrichtungen ($x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$), also beispielsweise $H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \rightarrow H_y \Big|_{k,i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$.

Die bisher gezeigten FDTD-Gleichungen sind nur auf einem unendlich großen Raumgitter gültig. Für eine numerische Implementierung sind daher noch Randbedingungen zu setzen, damit die Simulation auf ein endliches Volumen beschränkt werden kann.

1.3.1 Mur-Randbedingungen zweiter Ordnung [98]

Zunächst werden im Rahmen dieser Arbeit nur optische Anregungen mit einem als ebene Welle einfallenden und in eine kartesische Raumrichtung propagierenden Lichtfeld simuliert. Damit bietet sich an, für die Raumrichtungen senkrecht zur Propagationsrichtung periodische Randbedingungen zu verwenden. Propagiert das Lichtfeld in x-Richtung, muss nur noch die Behandlung der Ränder in dieser Raumrichtung geklärt werden. Die dabei wohl am häufigsten verwendete Methode ist die Beschreibung der Randbedingungen über J.-P. Berenger's Perfectly Matched Layers (PML) [9, 10, 136]. Diese Randbedingungen basieren auf der Idee, am Rand ein absorbierendes Medium einzubauen, das ohne Reflexionen die komplette elektromagnetische Welle schluckt. Da diese schon in der Doktorarbeit von Matthias Reichelt [112] ausführlich beschrieben worden sind, soll an dieser Stelle mit den nach G. Mur benannten Randbedingungen zweiter Ordnung [98, 136] eine alternative Methode vorgestellt werden. Diese sind zwar weniger effektiv, haben aber bei den FDTD-Simulationen dieser Arbeit keine merklichen Unterschiede zu den Rechnungen mit U(niformly)PML-Randbedingungen geliefert. Der Vorteil der Mur- gegenüber den UPML-Randbedingungen ist, dass sie leichter zu implementieren und numerisch weniger aufwendig sind. Zudem ist ihre Funktionsweise leicht nachvollziehbar.

Die Grundlage der Mur-Randbedingungen liefert die "one-way"-Wellengleichung von B. Engquist [37]. Dafür betrachtet man die skalare 3D-Wellengleichung

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 - \frac{1}{c^2}\partial_t^2)f = 0 \Leftrightarrow Lf = 0 \quad (1.58)$$

und zerlegt den Operator L für eine Propagation in x-Richtung formal in folgender Weise:

$$Lf = L^+L^-f = 0 \quad \text{mit} \quad S^2 = \left(\frac{c\partial_y}{\partial_t}\right)^2 + \left(\frac{c\partial_z}{\partial_t}\right)^2$$

$$L^\pm = \partial_x \pm \frac{1}{c}\partial_t\sqrt{1 - S^2} \quad (1.59)$$

Die Operatoren L^\pm sind Pseudo-Differential-Operatoren, da sie nicht direkt auf eine Funktion angewandt werden können. Formal beschreibt der Operator L^- eine Propagation in (-x)-Richtung, der L^+ -Operator eine Propagation in (+x)-Richtung. Dies wird ganz offensichtlich für eine in x-Richtung propagierende ebene Welle, da hier $S^2f = 0$ gilt:

$$L^\pm f = \partial_x \pm \frac{1}{c}\partial_t f = 0 \quad \Rightarrow \text{Lösung } f(x \mp ct) \quad (1.60)$$

Falls die Wirkung des Operators S als kleine Störung angesehen werden kann, d.h in der Praxis, falls die partiellen Ableitungen ∂_y und ∂_z klein im Vergleich zu $c^{-1}\partial_t$ sind, kann man die Wurzel in den Pseudo-Differential-Operatoren L^\pm mit Hilfe einer Taylor-Reihe entwickeln:

$$\sqrt{1 - S^2} \simeq 1 - \frac{1}{2}S^2 + O(S^4) \quad (1.61)$$

Eine solche Entwicklung funktioniert besonders gut für nahezu senkrecht auf die Grenzfläche auftreffende Wellen. Wendet man die partielle Zeitableitung ∂_t auf die Gleichungen (1.60) an und verwendet dabei die Taylor-Darstellung (1.61) erhält man folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} \partial_t L^- &\simeq \partial_t \partial_x f - \frac{1}{c}\partial_t^2 f + \frac{c}{2}(\partial_y^2 + \partial_z^2)f = 0 & \text{bei } x = 0 \\ \partial_t L^+ &\simeq \partial_t \partial_x f + \frac{1}{c}\partial_t^2 f - \frac{c}{2}(\partial_y^2 - \partial_z^2)f = 0 & \text{bei } x = x_{max} \end{aligned} \quad (1.62)$$

G. Mur entwickelte diese Gleichung in Finite-Differenz-Form. Nimmt man an, dass die Funktion f auf den Positionen (i,j,k) zum Zeitpunkt n bekannt ist, berechnet man dafür die Ableitungen auf dem Hilfspunkt $i = \frac{1}{2}$:

$$\partial_x \partial_t f \Big|_{\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{1}{2\Delta t} \left(\frac{f_{1,j,k}^{n+1} - f_{0,j,k}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{f_{1,j,k}^{n-1} - f_{0,j,k}^{n-1}}{\Delta x} \right) \quad (1.63)$$

Auch die Zeitableitungen ∂_t^2 und die Ortsableitungen ∂_y^2 und ∂_z^2 müssen auf dem Hilfspunkt $i = \frac{1}{2}$ ausgewertet werden. Dafür mittelt G. Mur die zu den regulären Punkten $i = 0$ und $i = 1$ gehörenden Ableitungen. So erhält man beispielsweise für die zweite Zeitableitung

$$\partial_t^2 f = \left(\frac{f_{\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - 2f_{\frac{1}{2},j,k}^n + f_{\frac{1}{2},j,k}^{n-1}}{\Delta t^2} \right) \quad \text{mit } f_{\frac{1}{2},j,k}^n = \frac{f_{1,j,k}^n - f_{0,j,k}^n}{2} \quad (1.64)$$

Löst man nun die Finite-Differenz-Darstellung von (1.62) nach $f_{0,j,k}^{n+1}$ auf, erhält man mit $\alpha = c\Delta t/\Delta x$ in einem quadratischen Gitter $\Delta x = \Delta y = \Delta z$:

$$\begin{aligned} f_{0,j,k}^{n+1} &= -f_{1,j,k}^{n-1} + \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1} (f_{1,j,k}^{n+1} + f_{0,j,k}^{n-1}) + \frac{2}{\alpha + 1} (f_{1,j,k}^n + f_{0,j,k}^n) \\ &+ \frac{\alpha^2}{\alpha + 1} \left[f_{\frac{1}{2},j+1,k}^n - 2f_{\frac{1}{2},j,k}^n + f_{\frac{1}{2},j-1,k}^n \right] \\ &+ \frac{\alpha^2}{\alpha + 1} \left[f_{\frac{1}{2},j,k+1}^n - 2f_{\frac{1}{2},j,k}^n + f_{\frac{1}{2},j,k-1}^n \right] \end{aligned} \quad (1.65)$$

Auf dieselbe Art und Weise lässt sich auch die Randbedingung für $x = x_{max}$ aufstellen. Diese unterscheidet sich nur unwesentlich von der hier gezeigten Randbedingung und soll daher nicht angegeben werden. Die Randbedingungen lassen sich leicht auf das Yee-Gitter übertragen. Dabei ist lediglich darauf zu achten, dass die Feldkomponenten teilweise um $\Delta x/2$ verschoben sind. Bei der numerischen Implementierung sind die Randbedingungen nur auf die Feldkomponenten anzuwenden, die genau auf dem Rand liegen. Dies sind entweder H_y , H_z oder E_y und E_z . Für H_x und E_x können die FDTD-Gleichungen normal gelöst werden, da hier keine z -Ableitung benötigt wird.

Die Mur-Randbedingungen haben sich bei den FDTD-Simulationen dieser Arbeit bewährt. Dies sollte vor allem daran liegen, dass das eingekoppelte Lichtfeld immer als eine in Richtung der Randbedingungen propagierende ebene Welle angesetzt worden ist. Die Ebene senkrecht dazu wurde an die Periode des photonischen Kristalls angepasst. Damit können hier periodische Randbedingungen verwendet werden. Das vom photonischen Kristall reflektierte und transmittierte Licht sollte daher, sofern die Ränder weit genug vom Kristall entfernt sind, weitgehend normal auf die Grenzfläche treffen, womit die Taylor-Entwicklung (1.61) eine gute Näherung darstellen sollte. Im Folgenden soll beschrieben werden, wie man das Lichtfeld in den Simulationsraum Einkoppelt.

1.3.2 Einkopplung des Feldes

Für die Einkopplung des Lichtfelds wird die "Total-Field Scattered-Field" Methode (vgl. [136]) verwendet. Dafür zerlegt man das gesamte Feld in seine einlaufenden und gestreuten Anteile:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{scat} \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_{inc} + \mathbf{H}_{scat} \quad (1.66)$$

Für eine in x -Richtung propagierende Welle ist dies nur für die E_y , E_z , H_y und H_z Komponenten notwendig. Wird die Welle in der $(x_0 = i_0\Delta x)$ -Ebene eingekoppelt, werden die FDTD-Gleichungen unterhalb $(x < x_0)$ dieser Ebene nur für das gestreute Feld gelöst. Damit muss zu den bei der Berechnung von $H_y|_{i_0,j+1/2,k}^n$ und $H_z|_{i_0,j,k+1/2}^n$ verwendeten Ortsableitungen

$$\frac{E_y|_{i_0+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \left(E_y|_{i_0-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}|_{scat} + E_y|_{i_0-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}|_{inc} \right)}{\Delta x} \quad (1.67)$$

$$\frac{E_z|_{i_0+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - \left(E_z|_{i_0-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}|_{scat} + E_z|_{i_0-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}|_{inc} \right)}{\Delta x}$$

der einlaufende Anteil addiert bzw. von den bei der Berechnung von $E_y|_{i_0-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}|_{scat}$ und $E_z|_{i_0-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}|_{scat}$ verwendeten Ortsableitungen

$$\frac{\left(H_y|_{i_0,j+\frac{1}{2},k}^n - H_y|_{i_0,j+\frac{1}{2},k}^n|_{inc} \right) - H_y|_{i_0-1,j+\frac{1}{2},k}^n|_{scat}}{\Delta x} \quad (1.68)$$

$$\frac{\left(H_z|_{i_0,j,k+\frac{1}{2}}^n - H_z|_{i_0,j,k+\frac{1}{2}}^n|_{inc} \right) - H_z|_{i_0-1,j,k+\frac{1}{2}}^n|_{scat}}{\Delta x}$$

der einlaufende Anteil subtrahiert werden. Wenn für das einlaufende Feld eine ebene Welle angesetzt wird, kann es an den Orten $x = i_0\Delta x$ und $x = (i_0 + 1/2)\Delta x$ analytisch berechnet werden. Somit muss nur noch abschließend geklärt werden, wie man die Halbleiter-Bloch-Gleichungen an die FDTD-Gleichungen koppeln kann.

1.3.3 Numerische selbstkonsistente Lösung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen

Beinhaltet der photonische Kristall als aktives Medium einen Halbleiter, müssen neben den FDTD-Gleichungen auch die Halbleiter-Bloch-Gleichungen gelöst werden:

$$\frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{1}{\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})} \left(\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \frac{d\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{dt} \right)$$

$$\frac{d\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (1.69)$$

$$\frac{dp(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H(\mathbf{E}), p(\mathbf{r}, t)] \rangle \quad \text{mit } \mathbf{P} = d\mathbf{p} + c.c.$$

Hierbei ist \mathbf{P} die makroskopische, p die mikroskopische Polarisation und d das Dipol-Matrixelement. Über den Licht-Materie-Anteil H_I vom Hamilton-Operator H können im Halbleiter Elektron-Loch-Paare durch das E-Feld erzeugt werden. Dieses gekoppelte Gleichungssystem kann in folgender Weise numerisch gelöst werden: Bei der Zeitschritt-Integration der Halbleiter-Bloch-Gleichung wird entweder der Leap-Frog oder der Predictor-Corrector-Algorithmus verwendet. Beides sind von der Genauigkeit her Algorithmen zweiter Ordnung in der Zeitschrittweite Δt . Im Gegensatz zum Leap-Frog-Algorithmus weist

der Predictor-Corrector-Algorithmus in der praktischen Anwendung wie der Runge-Kutta-Algorithmus eine hohe numerische Stabilität auf. In dieser Arbeit wird für numerisch unproblematische Situationen der Leap-Frog-Algorithmus [110]

$$\begin{aligned}\frac{df(t)}{dt} &\simeq \frac{f(t + \Delta t) - f(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \\ \Rightarrow f(t + \Delta t) &\simeq f(t - \Delta t) + 2\Delta t \frac{df(t)}{dt}\end{aligned}\quad (1.70)$$

verwendet. Berechnet man beim Lösen der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen \mathbf{P} und \mathbf{E} zum gleichen Zeitpunkt, kann die neue Polarisation ohne Näherungen aus den aktuellen Werten für Polarisation und elektrischem Feld sowie der vorherigen Polarisation berechnet werden. Je nach Situation erhält man mit der Leap-Frog-Methode hervorragende Ergebnisse, sobald die Zeitschritt-Integration stabil verläuft, oder man scheitert kläglich, wenn numerische Instabilitäten auftreten. In diesem Fall muss man auf den Predictor-Corrector-Algorithmus zurückgreifen. Dieser läuft bei Wahl geeigneter Zeitschrittweiten für die hier vorliegenden Problemklassen immer stabil.

In der Predictor-Corrector-Methode wird zunächst mit Hilfe der Ableitung und des aktuellen Wertes der zu berechnenden Funktion $f(t)$ über einen Euler Schritt eine erste Näherung des neuen Funktionswerts abgeschätzt (Vorhersage):

$$\begin{aligned}\frac{df(t)}{dt} &= \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \\ \Rightarrow \tilde{f}(t + \Delta t) &\simeq f(t) + \Delta t \frac{df(t)}{dt}\end{aligned}\quad (1.71)$$

Von $\tilde{f}(t + \Delta t)$ wird dann die erste Ableitung gebildet und mit der Ableitung von $f(t)$ die Ableitung zum Zeitpunkt $t + \Delta t/2$ gemittelt. Mit dieser Ableitung kann dann der neue Wert über die Zentrale-Differenz-Ableitung berechnet werden (Korrektur):

$$\begin{aligned}\frac{df(t + \Delta t/2)}{dt} &= \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} + O(\Delta t^3) \\ \Rightarrow f(t + \Delta t) &\simeq f(t) + \Delta t/2 \left(\frac{df(t)}{dt} + \frac{d\tilde{f}(t + \Delta t)}{dt} \right)\end{aligned}\quad (1.72)$$

Dieses Schema soll nun auf die Gleichung für die Polarisation angewandt werden. Zunächst wird die Polarisation zu den Zeitpunkten $t \in \{\dots, -3\Delta t/2, -\Delta t/2, \Delta t/2, 3\Delta t/2, \dots\}$, zu denen auch das E-Feld bekannt ist, berechnet. Damit lässt sich der Predictor-Schritt ohne Näherung zum Zeitpunkt $t - \Delta t/2$ ausführen. Für den Corrector-Schritt benötigt man jedoch das E-Feld zum Zeitpunkt $t + \Delta t/2$, um das neue E-Feld zu berechnen, aber die Ableitung der Polarisation zum Zeitpunkt t . Diese könnte man mit Hilfe der Zeitableitung der Predictor-Polarisation mitteln. Dafür müsste aber wiederum das neue E-Feld bekannt sein. Ohne Näherung kommt man also nicht weiter. Dafür nähert man die Zeitableitung der Polarisation zum Zeitpunkt t über die Zentrale-Finite-Differenz und verwendet dabei für die neue Polarisation den Predictor-Wert:

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} \simeq \frac{\tilde{\mathbf{P}}(t + \Delta t) - \mathbf{P}(t)}{\Delta t}\quad (1.73)$$

Damit kann nun das neue elektrische Feld berechnet und der Corrector-Schritt ausgeführt werden. An dieser Stelle könnte man das neue elektrische Feld wiederum mit der Corrector-Polarisation wie in Gleichung (1.73) korrigieren und die Predictor-Polarisation erneut berechnen. Dieser Schritt kann beliebig oft wiederholt werden, um die Genauigkeit der selbstkonsistenten Kopplung zu erhöhen. Dies war jedoch bei keiner der durchgeführten Simulationen notwendig.

1.3.4 Anwendbarkeit der Rotating-Wave-Approximation

Im folgenden Abschnitt soll kurz gezeigt werden, wie die Rotating-Wave-Approximation auf die FDTD-Simulation übertragen werden kann. Dies soll anhand eines einfachen Zwei-Niveau-Systems demonstriert werden. Die Bewegungsgleichung für die mikroskopische Polarisation lautet dafür:

$$-i\hbar \frac{dp}{dt} = \hbar\omega p - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \quad (1.74)$$

Separiert man aus der Polarisation die schnell veränderliche Phase $\exp(i\omega t)$, können die Bewegungsgleichungen für den langsam veränderlichen Rest aufgestellt werden:

$$-i\hbar \frac{d\tilde{p}}{dt} = -\mathbf{d} \cdot (e^{-i\omega t} \mathbf{E}) \quad (1.75)$$

In den FDTD-Gleichungen zerlegt man nun das reelle E-Feld in zwei komplexe Felder mit gleicher reeller Einhüllender $A(t)$:

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}^+(t) + \mathbf{E}^-(t) = \mathbf{A}(t) (e^{i(\omega+\delta\omega)t} + e^{-i(\omega+\delta\omega)t}) \quad (1.76)$$

Aufgrund der Linearität der Maxwell-Gleichungen kann man beide Anteile einzeln propagieren lassen. Jedoch würden beide Gleichungen über die Polarisation koppeln. Bei kleinem $\delta\omega$ kann jedoch die Polarisationsgleichung auf den resonanten Anteil \mathbf{E}^+ der Licht-Materie-Wechselwirkung beschränkt werden:

$$-i\hbar \frac{d\tilde{p}}{dt} \simeq -\mathbf{d} \cdot (e^{i\delta\omega t} \mathbf{A}) \quad (1.77)$$

Der andere Anteil \mathbf{E}^- sorgt entsprechend nur in den Bewegungsgleichungen der komplex konjugierten Polarisation für eine resonante Anregung. Dies entspricht formal der gewöhnlichen Rotating-Wave-Approximation. Die Multiplikation der Felder \mathbf{E}^\pm mit der schnell veränderlichen Phase wird jedoch nicht analytisch, sondern numerisch beim Lösen der FDTD-Gleichungen ausgeführt. Damit sind die Gleichungen entkoppelt:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{E}^\pm(\mathbf{r}, t)}{dt} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} \left(\nabla \times \mathbf{H}^\pm(\mathbf{r}, t) - \frac{d\mathbf{P}^\pm(\mathbf{r}, t)}{dt} \right) \\ \frac{d\mathbf{H}^\pm(\mathbf{r}, t)}{dt} &= -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}^\pm(\mathbf{r}, t) \quad \text{mit } \mathbf{P}^+ = \mathbf{d}p, \mathbf{P}^- = (\mathbf{d}p)^* \end{aligned} \quad (1.78)$$

Bei der Zeitschritt-Integration der langsam veränderlichen Polarisation sind nun größere Schrittweiten $m\Delta t$ mit $m \in \{1, 2, \dots\}$ möglich. Die bei der Berechnung des neuen E-Feldes

benötigte Polarisation kann hinreichend genau mit Hilfe eines Euler-Schritts berechnet werden und muss nur noch mit der schnell veränderlichen Phase multipliziert werden:

$$p(t + m\Delta t) = e^{i\omega(t+m\Delta t)} \left[\tilde{p}(t) + m\Delta t \frac{d\tilde{p}(t)}{dt} \right] \quad (1.79)$$

Nach m -Zeitschritten muss dann die neue Polarisation mit einem Corrector-Schritt berechnet werden, um die numerische Stabilität zu gewährleisten. Durch die Verwendung von komplexen Feldern benötigt man doppelt so viel Speicher und Rechenzeit bei der Lösung der FDTD-Gleichungen. Benötigt jedoch die Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen den größten Anteil der Rechenzeit, kann man durch die Verwendung der numerischen RWA die Rechenzeit erheblich verringern. Dies wurde teilweise bei den numerischen Simulationen dieser Arbeit genutzt. Es wurde jedoch durch Verwendung ausreichend kleiner Schrittweiten darauf geachtet, dass die numerische RWA nicht zu Lasten der Selbstkonsistenz geht.

1.3.5 "Messung" von Absorption und Gain in den FDTD-Simulationen

In typischen Absorptionsmessungen wird die Probe mit einem Lichtfeld angeregt und das von der Probe reflektierte und transmittierte Feld gemessen. Durch Vergleich mit dem eingestrahlten Feld lassen sich dann Rückschlüsse auf die Licht-Materie-Wechselwirkung ziehen. Für eine theoretische Beschreibung eines solchen Experiments wird der Raum durch ein hinreichend großes Simulationsvolumen beschrieben, das die Probe umschließt und dessen Ränder weit genug von der Probe entfernt sind. Der Netto-Energiefluss durch die Grenzflächen des Volumens ist dann ein Maß für die Energie, die pro Zeiteinheit vom Material absorbiert bzw. durch Gain hinzugefügt wird:

$$\Delta \dot{E} = \int d^2\sigma \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}, \quad (1.80)$$

Hierbei ist $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ der Poynting-Vektor. In spektral aufgelösten Experimenten wird der Netto-Energiefluss über die Messzeit aufgenommen und als Funktion der Frequenz analysiert:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int dt \Delta \dot{E} = \int_0^\infty d\omega \alpha(\omega) I_0(\omega) \\ \alpha(\omega) &= \frac{1}{I_0} \int d^2\sigma (\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) + c.c.) \cdot \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (1.81)$$

I_0 steht dabei für die Intensität des eingestrahlten Lichtfelds. Die Absorption bzw. die Verstärkung durch das Halbleitermaterial lässt sich dann über $\alpha(\omega)$ bestimmen.

Die Theorie lässt sich leicht auf die FDTD-Simulationen übertragen: Das eingestrahlte Lichtfeld wird innerhalb des Simulationsvolumens eingekoppelt. Hierbei sind alle Informationen wie Frequenz, Intensität etc. über das Lichtfeld bekannt. Verwendet man in den Raumrichtungen senkrecht zur Propagationsrichtung des eingekoppelten Feldes periodische Randbedingungen, müssen nur die Grenzflächen, die das Volumen in der Propagationsrichtung begrenzen, bei der numerischen "Messung" berücksichtigt werden. Die "Messung" lässt sich jedoch nicht direkt am Rand des Simulationsraums durchführen, da noch genug Platz für die Implementierung der Randbedingungen (UPML, Mur, etc.) gelassen werden muss. Innerhalb

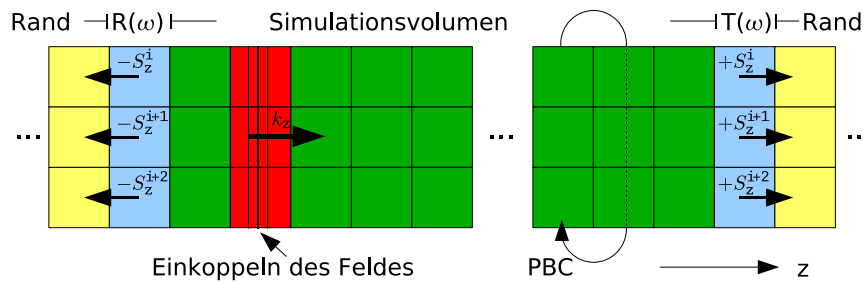


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung der FDTD-Simulation. An den Rändern (gelb) werden UPML oder Mur-Randbedingungen verwendet. Das Licht wird in der roten Ebene eingekoppelt und die Reflexion (R) und Transmission (T) in den blauen Ebenen über den Poynting-Vektor bestimmt. Senkrecht zur Propagationsrichtung werden periodische Randbedingungen (PBC) verwendet.

der Messebene wird in jedem Yee-Würfel die Normalkomponente des Poynting-Vektors bestimmt und aufgenommen, d.h. jeder Yee-Würfel stellt eine Art Detektor dar. Die Fourier-transformierte Normalkomponente des Poynting-Vektors liefert dann ein lokales Spektrum. Durch räumliche Integration über die Messebene in Propagationsrichtung erhält man das Transmissions- und analog über die andere Messebene das Reflexionsspektrum. Diese lassen sich dann auf das eingekoppelte Feld normieren. Ohne Wechselwirkung mit einem aktiven Material gilt für die Summe des reflektierten und transmittierten Feldes:

$$1 - (R(\omega) + T(\omega))/I_0 = 0 \quad (1.82)$$

Bei Rechnungen mit aktivem Material zeigt sich die Absorption bzw. die Verstärkung durch positive bzw. negative Abweichungen von der Nullachse.

Für detailliertere Beschreibungen und Informationen sei auf das Buch *“Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method”* [136] von A. Taflové und S.C. Hagness verwiesen, das einen einfach zu verstehenden Einstieg in die FDTD-Methode bietet. Dort findet man eine ausführliche Herleitung der FDTD-Gleichungen für verschiedene dimensionale Systeme, weiterführende Details zu den Randbedingungen sowie hilfreiche Tipps zu der numerischen Implementierung der Gleichungen. Des Weiteren findet man dort auch einige Beispiele und Anwendungsmöglichkeiten. Eine gute Zusammenfassung und Anwendung der FDTD-Gleichungen auf periodische Quantenpunkt-Strukturen findet man auch in der Diplomarbeit von K. Zimmermann [152].

Damit sind nun alle notwendigen Methoden bekannt, mit denen die Licht-Materie-Wechselwirkung in einem photonischen Kristall theoretisch wie auch numerisch beschrieben werden kann. In den folgenden Abschnitten sollen nun drei Anwendungen gezeigt werden.

1.4 Ortsdarstellung des Hamilton-Operators in inhomogenen Systemen

In homogenen Systemen hängt die Dynamik der Halbleiter-Kohärenzen nicht vom Schwerpunkt, sondern nur vom Relativabstand der beteiligten Teilchen ab. Dadurch kann das Problem durch Separation der Schwerpunktbewegung wesentlich vereinfacht werden. Die Halbleiter-Bloch-Gleichungen werden dann üblicher Weise im k -Raum gelöst [56], der im Vergleich zur Ortsdarstellung besser an das periodische Kristallgitter angepasst ist. In dieser Darstellung

lassen sich dann über die $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Rechnung realistische Bandstrukturen sowie realistische Matrixelemente für die Licht-Materie-, Coulomb- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung berechnen. Mit diesem Ansatz kann man z.B. theoretische Vorhersagen zu Laserspektren treffen, die sehr gute Übereinstimmung mit den Experimenten liefern [124, 24]. Eine solche Theorie basiert auf dem Bloch-Theorem, d.h. der Periodizität des Kristallgitters, und funktioniert daher nur in geordneten, homogenen Systemen. Für ungeordnete Systeme werden in der Regel Ortsraum-Darstellungen (Tight-Binding) verwendet [103, 93]. Eine theoretische \mathbf{k} -Raum-Beschreibung wird in diesem Fall sehr schwierig, da das Bloch-Theorem nicht mehr anwendbar ist. Ein ähnlicher Fall liegt für das inhomogene photonische Kristallsystem vor. Das System bleibt zwar periodisch, jedoch nur auf der Skala einer Lichtwellenlänge. Obwohl der Halbleiter selbst homogen ist, werden die Halbleiter-Bloch-Gleichungen durch die Ankopplung an die räumlich inhomogenen Lichtmoden des photonischen Kristalls sowie durch die inhomogene Coulomb-Wechselwirkung sowohl vom Relativabstand als auch explizit vom Schwerpunkt abhängig. Eine Separation der Schwerpunktsbewegung ist daher ohne grobe Näherungen nicht mehr möglich.

Für ein einfaches Zwei-Band-Modell mit parabolischen Bändern lassen sich die Bewegungsgleichungen aber auch im Ortsraum lösen. Die Ortsdarstellung sollte aufgrund der räumlichen Inhomogenität des Systems die natürliche Wahl sein. Eine Transformation in den \mathbf{k} -Raum unter Ausnutzung der Periodizität des photonischen Kristalls ist zwar möglich, birgt aber große Schwierigkeiten, da die Periode des photonischen Kristalls (Lichtwellenlängen) nicht zu den für Halbleiter typischen Längen wie dem exzitonischen Bohr-Radius (GaAs: $a_B \simeq 13\text{ nm}$) passt. Eine solche Bloch-Entwicklung ergibt aufgrund der großen Einheitszelle des photonischen Kristalls sehr viele eng aneinander liegende Bänder. Eine numerische Realisierung wird dadurch sehr aufwendig. Im Folgenden soll daher der Ortsraum-Hamilton-Operator für ein einfaches Halbleiter-Modellsystem mit einem parabolischen Leitungsband und einem parabolischen Valenzband entwickelt werden. Anstelle von Schwerpunkt- und Relativkoordinaten werden Teilchen-Koordinaten gewählt. Zudem werden die Gleichungen im Elektron-Loch-Bild aufgestellt, wobei ein Loch ein unbesetzter Zustand im sonst komplett gefüllten Valenzband ist. Löcher haben im Gegensatz zu Valenzband-Elektronen eine positive Masse und Ladung. Für eine detailliertere Beschreibung der im Folgenden eingeführten Hamilton-Operatoren sei auf Referenz [106] verwiesen.

Bandstrukturanteil:

Unter Verwendung der effektiven Elektron- und Loch-Massen hat der Bandstruktur-Anteil folgende Form:

$$\hat{H}_0 = \int d^\delta r_1 \left[\hat{c}_1^\dagger \left(E_G - \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m_e} \right) \hat{c}_1 + \hat{d}_1^\dagger \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m_h} \right) \hat{d}_1 \right] \quad (1.83)$$

Hierbei ist c_1^\dagger (c_1) der Erzeuger (Vernichter) eines Elektrons und d_1^\dagger (d_1) der Erzeuger (Vernichter) eines Lochs am Ort \mathbf{r}_1 . Diese Kurzform für die Orte wird im Folgenden in den inhomogenen Systemen grundsätzlich benutzt. E_G ist die Energie der Halbleiter-Bandlücke und δ die (reduzierte) Dimensionalität des Halbleiters. Aufgrund der numerischen Komplexität der inhomogenen Gleichungen werden im Rahmen dieser Arbeit nur eindimensionale Quantendrähte ($\delta = 1$) betrachtet.

Licht-Materie-Wechselwirkung:

Die Licht-Materie-Wechselwirkung wird in Dipol-Näherung behandelt. Dieser Anteil entspricht dem Dipol-Beitrag einer Multipol-Entwicklung über die Kristallgitter-Einheitszelle. In Ortsdarstellung liefert dieser Ansatz

$$\hat{H}_I = - \int d^{\delta} r_1 \mathbf{E}_1(t) \cdot \boldsymbol{\mu}(\hat{d}_1 \hat{c}_1 + \hat{c}_1^{\dagger} \hat{d}_1^{\dagger}), \quad (1.84)$$

wobei der Operator $\mathbf{P}(\mathbf{r}_1, t) \equiv \mathbf{P}_{11} = \boldsymbol{\mu}(\hat{d}_1 \hat{c}_1 + \hat{c}_1^{\dagger} \hat{d}_1^{\dagger})$ die makroskopische Interband-Polarisation, die in den FDTD-Simulationen als Quellterm für das transversale elektrische Feld dient, und $\mathbf{E}_1(t) \equiv \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t)$ das ortsabhängige klassische elektrische Feld ist. Die reelle ortsunabhängige Konstante $\boldsymbol{\mu}$ steht für das Interband-Dipol-Matrixelement und $\hat{d}_1 \hat{c}_1$ ($\hat{c}_1^{\dagger} \hat{d}_1^{\dagger}$) für die lokale Interband-Kohärenz. Diese entsprechen dem Vernichten (Erzeugen) eines Elektron-Loch-Paares am Ort \mathbf{r}_1 .

Coulomb-Anteil mit Selbstenergien:

Der Coulomb-Anteil ergibt sich aus dem allgemeinen semiklassischen Hamilton-Operator (1.31), wenn als Ladungsdichte $\rho(\mathbf{r}_1) = -e(c_1^{\dagger} c_1 - d_1^{\dagger} d_1)$ angesetzt wird. Der Hamilton-Operator enthält die attraktive Wechselwirkung zwischen den positiv geladenen Löchern und negativ geladenen Elektronen sowie die repulsive Wechselwirkung zwischen den Teilchen gleicher Ladung. Diese Terme treten auch im homogenen Fall auf. Im Gegensatz zur homogenen Situation enthält das Coulomb-Potential neben dem mit der lokalen dielektrischen Konstante abgeschirmten normalen abstandsabhängigen Beitrag V^0 auch die durch die Oberflächenpolarisationen hervorgerufenen Coulomb-Modifikationen δV , die explizit von den Teilchenkoordinaten abhängen. Zudem treten Coulomb-Selbstenergie-Terme auf, die durch die Selbstwechselwirkung der geladenen Teilchen mit den eigens an den Grenzflächen des photonischen Kristalls induzierten Oberflächenpolarisationen hervorgerufen werden. Diese Terme sind im Gegensatz zu den Selbstenergien des normalen Coulomb-Anteils, die durch Verwendung der Normalordnung für die Feldoperatoren vermieden werden können, physikalisch [139, 75] und müssen daher im Hamilton-Operator berücksichtigt werden. Unter Verwendung der Notation $V^C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv V_{12}^C = V_{12}^0 + \delta V_{12}$ für das verallgemeinerte inhomogene Coulomb-Potential hat der Coulomb-Hamilton-Operator folgende Form [134, 95]:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Coulomb} &= \frac{e^2}{2} \iint d^{\delta} r_1 d^{\delta} r_2 V_{12}^C \left(\hat{c}_1^{\dagger} \hat{c}_2^{\dagger} \hat{c}_2 \hat{c}_1 + \hat{d}_1^{\dagger} \hat{d}_2^{\dagger} \hat{d}_2 \hat{d}_1 - 2 \hat{c}_1^{\dagger} \hat{d}_2^{\dagger} \hat{d}_2 \hat{c}_1 \right) \\ &+ \frac{e^2}{2} \int d^{\delta} r_1 \delta V_{11} \left(\hat{c}_1^{\dagger} \hat{c}_1 + \hat{d}_1^{\dagger} \hat{d}_1 \right) \end{aligned} \quad (1.85)$$

Die ersten drei Doppelintegrale enthalten die angesprochenen repulsiven und attraktiven Wechselwirkungsterme zwischen Elektronen und Löchern, die beiden Einfachintegrale stehen für die physikalische Selbstwechselwirkung über die Oberflächenpolarisationen im photonischen Kristall. Als periodisches Einteilchen-Potential kann die Selbstenergie $e^2 \delta V_{11} / 2$ auch formal dem Bandstruktur-Anteil H_0 zugeordnet werden. Mit dem durch die Selbstenergien modifizierten Hamilton-Operator H_0 lassen sich Einteilchen-Bloch-Funktionen berechnen, die an die Periode des photonischen Kristalls angepasst sind. Eine Entwicklung des gesamten

Hamilton-Operators in diesen Eigenzuständen ist wegen der an optische Wellenlängen angepassten Periode des photonischen Kristalls und der im Vergleich dazu viel kleineren Gitterkonstante des Halbleiter-Materials numerisch sehr aufwendig. Dieser Ansatz findet dennoch Verwendung bei der Betrachtung von Quasi-Gleichgewichtszuständen.

1.5 Die Heisenberg-Gleichungen des Halbleiter-Systems

Im Folgenden sollen die dynamischen Eigenschaften des Halbleiter-Systems untersucht werden. Dafür sollen die Heisenberg-Gleichungen der für optische Anregungen im Bereich der Halbleiter-Bandlücke relevanten Größen aufgestellt werden [56]. Die zeitliche Entwicklung des Erwartungswerts eines Operators $\langle \hat{O} \rangle$ lässt sich dabei über

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{O} \rangle = \langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle \quad (1.86)$$

bestimmen. Der Einteilchen-Anteil H_0 und Licht-Materie-Anteil H_I führt dabei auf die optischen Bloch-Gleichungen. Bei der Berechnung des Vielteilchen-Coulomb-Anteils tritt ein Hierarchieproblem auf, bei dem 2er-Erwartungswerte $\langle a^+ a \rangle$ an 4er-Erwartungswerte $\langle a^+ a^+ a a \rangle$ und diese wiederum an 6er-Erwartungswerte $\langle a^+ a^+ a^+ a a a \rangle$ usw. koppeln [56, 123, 94]. Anstelle der Verwendung numerisch extrem aufwendiger Verfahren wie die Cluster-Expansion [59, 42] oder einer 2nd-Born-Rechnung [51] soll das Hierarchieproblem auf dem Niveau einer zeitabhängigen Hartree-Fock-Näherung [56, 81, 4] behandelt werden. Da sich das Vorgehen für die verschiedenen Halbleiter-Kohärenzen nicht unterscheidet, soll hier nur exemplarisch auf die Coulomb-Wechselwirkung der Interband-Gleichung eingegangen werden. Eine detaillierte Auswertung der Kommutatoren und Hartree-Fock-Zerlegungen für die Interband- und Intraband-Kohärenzen

$$\begin{aligned} p_{12} &= \langle \hat{p}_{12} \rangle = \langle \hat{d}_1^{\dagger} \hat{c}_2 \rangle \quad (\text{Interband-Kohärenz}) \\ f_{12}^e &= \langle \hat{c}_{12} \rangle = \langle \hat{c}_1 \hat{c}_2 \rangle \quad (\text{Elektron-Intraband-Kohärenz}) \\ f_{12}^h &= \langle \hat{d}_{12} \rangle = \langle \hat{d}_1 \hat{d}_2 \rangle \quad (\text{Loch-Intraband-Kohärenz}) \end{aligned} \quad (1.87)$$

kann Referenz [106] entnommen werden. Der Coulomb-Anteil der Interband-Gleichung nimmt dabei folgende Form an:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{12}|_C &= \langle [\hat{p}_{12}, \hat{H}_C] \rangle \\ &= e^2 \left(\frac{1}{2} \delta V_{11} + \frac{1}{2} \delta V_{22} - V_{12}^C \right) p_{12} \\ &\quad + e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{32}^C - V_{13}^C) (\langle c_3^{\dagger} d_1 c_2 c_3 \rangle + \langle d_3^{\dagger} d_1 d_3 c_2 \rangle) \end{aligned} \quad (1.88)$$

Wie schon erwähnt, koppelt der 2er-Erwartungswert als Konsequenz der Vielteilchen-Coulomb-Wechselwirkung an 4er-Erwartungswerte. Dies entspricht der ersten Stufe des gewöhnlichen Hierarchieproblems der Vielteilchen-Physik [56, 123, 94]. Ein geschlossenes System von Bewegungsgleichungen auf der Ebene von 2er-Erwartungswerten erhält man durch die Anwendung der zeitabhängigen Hartree-Fock-Näherung, bei der die 4er-Erwartungswerte

in Produkte aus 2er-Erwartungswerten zerlegt werden. Angewendet auf Gleichung (1.88) entspricht das folgender Zerlegung:

$$\begin{aligned}
\langle c_3^+ d_1 c_2 c_3 \rangle &\approx \langle c_3^+ c_3 \rangle \langle d_1 c_2 \rangle - \langle c_3^+ c_2 \rangle \langle d_1 c_3 \rangle \\
&= f_{33}^e p_{12} - f_{32}^e p_{13} \\
\langle d_3^+ d_1 d_3 c_2 \rangle &\approx \langle d_3^+ d_1 \rangle \langle d_3 c_2 \rangle - \langle d_3^+ d_3 \rangle \langle d_1 c_2 \rangle \\
&= f_{31}^h p_{32} - f_{33}^h p_{12}
\end{aligned} \tag{1.89}$$

Wendet man, wie in Referenz [106] dargelegt, diese Zerlegung auch auf die Intra-Band-Kohärenzen an, erhält man zusammen mit den Anteilen von \hat{H}_0 und \hat{H}_I die Halbleiter-Bloch-Gleichungen in zeitabhängiger Hartree-Fock-Näherung:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{12} &= \left[E_G - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 + \frac{e^2}{2} (\delta V_{11} + \delta V_{22}) \right. \\
&\quad \left. - V_{12}^C - e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{13}^C - V_{32}^C) (f_{33}^e - f_{33}^h) \right] p_{12} \\
&\quad + e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{13}^C - V_{32}^C) (f_{32}^e p_{13} - f_{31}^h p_{32}) \\
&\quad - \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{E}_1 \delta_{12} - \mathbf{E}_1 f_{12}^e - \mathbf{E}_2 f_{21}^h) \\
&\quad + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{12}|_{corr}
\end{aligned} \tag{1.90}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^e &= \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - \frac{e^2}{2} (\delta V_{11} - \delta V_{22}) \right. \\
&\quad \left. - e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{13}^C - V_{32}^C) (f_{33}^e - f_{33}^h) \right] f_{12}^e \\
&\quad + e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{13}^C - V_{32}^C) (f_{13}^e f_{32}^e + p_{31}^* p_{32}) \\
&\quad + \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{E}_1 p_{12} - \mathbf{E}_2 p_{21}^*) \\
&\quad + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^e|_{corr}
\end{aligned} \tag{1.91}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^h &= \left[\frac{\hbar^2}{2m_h} (\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - \frac{e^2}{2} (\delta V_{11} - \delta V_{22}) \right. \\
&\quad \left. + e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{13}^C - V_{32}^C) (f_{33}^e - f_{33}^h) \right] f_{12}^h \\
&\quad + e^2 \int d^{\delta} r_3 (V_{13}^C - V_{32}^C) (f_{13}^h f_{32}^h + p_{13}^* p_{23}) \\
&\quad + \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{E}_1 p_{21} - \mathbf{E}_2 p_{12}^*) \\
&\quad + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^h|_{corr}
\end{aligned} \tag{1.92}$$

Die mit $|_{corr}$ gekennzeichneten Terme stehen für die auf der Hartree-Fock-Ebene nicht berücksichtigten Terme höherer Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung. Diese Terme werden im

Folgenden entweder komplett vernachlässigt oder durch phänomenologische Dephasierungs- und Relaxationszeiten ersetzt.

Die Coulomb-Selbstenergien wirken als zusätzliche Potentiale in den homogenen Anteilen der Gleichungen (1.90)-(1.92). Das modifizierte Coulomb-Potential $-e^2 V_{12}^C$ in der Interband-Gleichung führt zu einer veränderten Anziehung zwischen Elektronen und Löchern und zeigt sich in den Absorptionsspektren in neuartigen exzitonischen Effekten. Zudem treten in allen drei Gleichungen Integrale über die modifizierte Coulomb-Wechselwirkung und Produkte aus den Inter- und Intra-Band-Kohärenzen auf. Die optische Anregung des Systems wird durch die Ankopplung an das transversale elektrische Feld geregelt. Die simultane Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen zusammen mit den Maxwell-Gleichungen ermöglicht eine selbstkonsistente Beschreibung der dynamischen Entwicklung des gekoppelten Licht-Materie-Systems. Dabei wird die Halbleiter-Polarisation vom elektrischen Feld getrieben, während die Polarisation als Quellterm in den Maxwell-Gleichungen auftritt. Die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen können für beliebige Intensitäten gelöst werden. Die numerische Implementierung des Problems wurde schon bei der Vorstellung des FDTD-Algorithmus in Abschnitt 1.3 beschrieben.

Der hier präsentierte Ansatz enthält Vielteilchen-Coulomb-Effekte der untersten Ebene und kann damit beispielsweise für die Untersuchung von Effekten wie den exzitonische Rabi-Flops verwendet werden, die bei starker optischer Anregung auftreten. Durch die selbstkonsistente Lösung ist der radiative Zerfall der Halbleiter-Polarisation automatisch in die Gleichungen eingebaut und liefert die exakten radiativen Zerfallszeiten für die Halbleiter-Kohärenzen trotz der Verwendung des semiklassischen Ansatzes. Quanteneffekte wie die spontane Emission sind jedoch nicht enthalten, da der Quellterm nur die Erwartungswerte des Felds und keine Fluktuationen berücksichtigt.

1.5.1 Näherungen für den Grenzfall schwacher Anregung

Im Rahmen von Abschnitt 1.6 sollen die exzitonischen Effekte, die durch die modifizierte Coulomb-Wechselwirkung bedingt werden, genauer analysiert werden. Um bei dieser elementaren Untersuchung andere störende Effekte wie z.B. dichteabhängige spektrale Verschiebungen der Einteilchen-Energien, ein schnelles Dephasieren oder Relaxationen aufgrund von Ladungsträger-Ladungsträger-Streuung zu unterbinden, sollten die Rechnungen im Limes schwacher Anregungen durchgeführt werden. Für schwache Intensitäten bildet zudem die Hartree-Fock-Näherung eine gute Basis, während für starke Intensitäten die vernachlässigten Korrelationsterme höherer Ordnung eine immer stärker werdende Rolle spielen. Im Limes schwacher Lichtintensität können die Gleichungen (1.90)-(1.92) störungstheoretisch in Ordnungen des Lichtfelds entwickelt werden. Diese Entwicklung liefert für schwache Lichtfelder eine hervorragende Übereinstimmung mit den Ergebnissen der vollen Halbleiter-Bloch-Gleichungen (1.90)-(1.92) bei gleichzeitig reduzierter numerischer Komplexität.

Ausgangspunkt der Entwicklung bildet der Grundzustand eines nicht angeregten Systems, in dem keine Halbleiter-Kohärenzen vorhanden sind. Mit beginnender optischer Anregung werden über den $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_1 \delta_{12}$ -Quellterm in erster Ordnung nur Interband-Polarisationen erzeugt:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{12}^{(1)} = & \left[E_G - \frac{1}{2m_h} \nabla_1^2 - \frac{1}{2m_e} \nabla_2^2 \right. \\
& \left. + \frac{e^2}{2} (\delta V_{11} + \delta V_{22}) - e^2 V_{12}^C \right] p_{12}^{(1)} - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_1 \delta_{12}
\end{aligned} \tag{1.93}$$

Alle anderen Quellterme sind proportional zu den Inter- und Intraband-Kohärenzen des Grundzustands und verschwinden daher. Mit dem Index (n) wird die Ordnung des Felds angegeben, d.h. $p_{12}^{(1)}$ ist die Interband-Kohärenz erster Ordnung. Durch Diagonalisierung des homogenen Anteils der rechten Seite von Gleichung (1.93) lassen sich die exzitonischen Eigenenergien ϵ_X sowie deren Eigenfunktionen $\Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ berechnen. Für eine Anregung mit einem homogenen Lichtfeld können die zugehörigen exzitonischen Oszillatorstärken über die Formel $\mu^2 \int d^{\delta} r |\Psi_X(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$ berechnet werden. Hierbei kommt zum Tragen, dass der theoretische Ansatz die Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren nur am gleichen Ort zulässt. Für die inhomogene Anregung kann diese einfache Formel nicht mehr angewandt werden, da der räumliche und spektrale Überlapp zwischen den Lichtmoden und den exzitonischen Eigenfunktionen die Oszillatorstärke modifiziert. In diesem Fall können die Oszillatorstärken aus den Absorptionsspektren extrahiert werden (siehe Seite 41).

In zweiter Ordnung können nur Intraband-Kohärenzen erzeugt werden. Dieser Prozess wird durch folgende Gleichungen bestimmt:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^{e(2)} = & \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - \frac{e^2}{2} \delta V_{11} + \frac{e^2}{2} \delta V_{22} \right] f_{12}^{e(2)} \\
& + \int d^{\delta} r_3 e^2 (V_{13}^C - V_{32}^C) (p_{31}^{(1)})^* p_{32}^{(1)} \\
& + \boldsymbol{\mu} \cdot [\mathbf{E}_1 p_{12}^{(1)} - \mathbf{E}_2 (p_{21}^{(1)})^*]
\end{aligned} \tag{1.94}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^{h(2)} = & \left[\frac{\hbar^2}{2m_h} (\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - \frac{e^2}{2} \delta V_{11} + \frac{e^2}{2} \delta V_{22} \right] f_{12}^{h(2)} \\
& + \int d^{\delta} r_3 e^2 (V_{13}^C - V_{32}^C) (p_{13}^{(1)})^* p_{23}^{(1)} \\
& + \boldsymbol{\mu} \cdot [\mathbf{E}_1 p_{21}^{(1)} - \mathbf{E}_2 (p_{12}^{(1)})^*]
\end{aligned} \tag{1.95}$$

Diagonalisiert man den homogenen Anteil der rechten Seiten von (1.94) und (1.95), erhält man die Eigenenergien $E_{\lambda, \mathbf{k}}^{e/h}$ und Eigenfunktionen $\Phi_{\lambda, \mathbf{k}}^{e/h}(\mathbf{r})$ der Elektronen und Löcher. Der Index \mathbf{k} kommt von der Ausnutzung des Bloch-Theorems bezüglich der Periodizität des photonischen Kristalls. Mit diesen Eigenenergien und Eigenfunktionen lassen sich Fermi-Dirac-artige Gleichgewichtskohärenzen bestimmen:

$$\begin{aligned}
f_{12}^{e, ge} = & \frac{1}{L^{\delta}} \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \Phi_{\lambda, \mathbf{k}}^e(\mathbf{r}_1)^* \Phi_{\lambda, \mathbf{k}}^e(\mathbf{r}_2) \frac{1}{\exp[\beta(E_{\lambda, \mathbf{k}}^e - \mu_e)] + 1} \\
f_{12}^{h, ge} = & \frac{1}{L^{\delta}} \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \Phi_{\lambda, \mathbf{k}}^h(\mathbf{r}_1)^* \Phi_{\lambda, \mathbf{k}}^h(\mathbf{r}_2) \frac{1}{\exp[\beta(E_{\lambda, \mathbf{k}}^h - \mu_h)] + 1}
\end{aligned} \tag{1.96}$$

Der Index λ summiert dabei über die Minibänder, die aufgrund der großen Periode des photonischen Kristalls energetisch ziemlich eng aneinander liegen. Somit müssen selbst für den

eindimensionalen Fall über 100 Minibänder berücksichtigt werden. Bei vorgegebener Temperatur T und mittlerer Teilchendichte n_0 werden die chemischen Potentiale $\mu_{e/h}$ so bestimmt, dass

$$n_0 = \int_L d^\delta r_1 f_{11}^{e,eq} / L = \int_L d^\delta r_1 f_{11}^{h,eq} / L \quad (1.97)$$

gilt. Da immer Elektron-Loch-Paare erzeugt werden, muss die mittlere Teilchendichte für beide Sorten von Ladungsträgern gleich sein. Setzt man die Gleichgewichtsdichten (1.96) in die Interband-Gleichung (1.90) ein, kann die dichteabhängige Absorption für Quasi-Gleichgewichtssituationen ausgewertet werden [56, 95, 106, 113].

Die in den Gleichungen (1.94) und (1.95) auftretenden Integrale erfordern einen wesentlich höheren numerischen Aufwand, als bei der Lösung von Gleichung (1.93) benötigt wird. Solange die Dynamik kohärent ist, muss nur die lineare Interband-Gleichung von den Bewegungsgleichungen bis einschließlich zweiter Ordnung im Feld (1.93)-(1.95), dem so genannten kohärenten $\chi^{(2)}$ -Limes, gelöst werden. Die Intradband-Kohärenzen zweiter Ordnung lassen sich über die $\chi^{(2)}$ -Summenregeln bestimmen [141, 16]:

$$f_{12}^{e(2);coh} = \int d^\delta r_3 p_{32}^{(1)} (p_{31}^{(1)})^* \quad (1.98)$$

$$f_{12}^{h(2);coh} = \int d^\delta r_3 p_{23}^{(1)} (p_{13}^{(1)})^* \quad (1.99)$$

Diese wurden ursprünglich für räumlich homogene Systeme eingeführt, behalten aber auch in der inhomogenen Situation ihre Gültigkeit, wie in Referenz [106] explizit gezeigt wird.

1.5.2 Dephasieren und Relaxation in das Quasi-Gleichgewicht

Wie schon erwähnt, beinhaltet die selbstkonsistente Lösung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichung den radiativen Zerfall der Halbleiter-Kohärenzen. In den meisten Situationen relaxieren und dephasieren die Halbleiter-Kohärenzen auf kürzeren Zeitskalen. Die dafür verantwortlichen physikalischen Prozesse sind die Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterphononen sowie Coulomb-Streuterme, die durch Vielteilchen-Korrelationen jenseits der Hartree-Fock-Näherung bestimmt werden. Eine numerische Implementierung dieser Prozesse kann schon in räumlich homogenen Systemen ziemlich aufwendig sein, in inhomogenen Systemen sollte dies nur in wenigen Fällen und unter massiver Parallelisierung des Problems möglich sein. Aus diesem Grund ist im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit nur eine phänomenologische Beschreibung der Dephasierungs- und Relaxationsmechanismen möglich.

Der nicht radiative Zerfall der Interband-Polarisation wird dabei durch Einführung einer Dephasierungszeit T_2^* und Hinzufügen von $-i\hbar p_{12}^{(1)}/T_2^*$ zur rechten Seite von Gleichung (1.93) geregelt. Der vollständige exponentielle Zerfall T_2^{-1} setzt sich aus den radiativen T_{rad}^{-1} und dem nicht radiativen, phänomenologisch behandelten Anteil T_2^{*-1} zusammen.

Im kohärenten Limes wird das Dephasieren der Ladungsdichten und Intradband-Kohärenzen durch die endliche Lebensdauer der optisch angeregten Elektronenzustände bestimmt. Entsprechend zerfallen die Intradband-Kohärenzen mit der Zeitkonstante $T_2/2$. Da die radiativen Zerfallsprozesse schon über die selbstkonsistente Lösung der Gleichungen geregelt werden, müssen den rechten Seiten der Gleichungen (1.94) und (1.95) nur noch die nicht radiativen Anteile $-i\hbar f_{12}^{e/h(2)}/(T_2^*/2)$ hinzugefügt werden. Für die kohärenten Beiträge bleiben die Summenregeln (1.98) und (1.99) somit gültig.

In der Praxis ist der kohärente Limes eher selten erfüllt. Die Ladungsdichten und Intraband-Kohärenzen zerfallen auf einer anderen Zeitskala, als es der kohärente Limes vorgeben würde, werden inkohärent und relaxieren in so genannte Quasi-Gleichgewichtszustände. Das Wort "Quasi" soll dabei andeuten, dass sich das System in keinem wirklichen Gleichgewichtszustand befindet, da immer noch angeregte Zustände besetzt sind und damit Elektron-Loch-Rekombinationen unter Aussendung von Licht stattfinden. Diese Thermalisierung kann durch hinzufügen von $-i\hbar(f_{12}^{e/h(2)} - f_{12}^{e/h,eq})/T_1$ zu den rechten Seiten der Gleichungen (1.94) und (1.95) modelliert werden. Dabei sind $f_{12}^{e,eq}$ und $f_{12}^{h,eq}$ die Quasi-Gleichgewichts-Dichten und -Intrabandkohärenzen aus (1.96). Durch diese inkohärenten Beiträge verlieren die Summenregeln (1.98) und (1.99) ihre allgemeine Gültigkeit, können aber dennoch weiter verwendet werden, wenn man die Intraband-Größen in ihre kohärenten und inkohärenten Beiträge zerlegt:

$$f_{12}^{e(2)} = f_{12}^{e(2);coh} + f_{12}^{e(2);incoh} \quad (1.100)$$

$$f_{12}^{h(2)} = f_{12}^{h(2);coh} + f_{12}^{h(2);incoh} \quad (1.101)$$

Der kohärente Anteil lässt sich dann weiterhin über die Summenregeln (1.98) und (1.99) berechnen, während der inkohärente Anteil durch Subtraktion der kohärenten Beiträge aus den Gleichungen (1.94) und (1.95) gewonnen werden kann:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^{e(2);incoh} &= \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - \frac{e^2}{2} (\delta V_{11} - \delta V_{22}) \right] f_{12}^{e(2);incoh} \\ &\quad - i\hbar f_{12}^{e(2);coh} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2^*/2} \right) - i\hbar \frac{f_{12}^{e(2);incoh} - f_{12}^{e,eq}}{T_1} \end{aligned} \quad (1.102)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{12}^{h(2);incoh} &= \left[\frac{\hbar^2}{2m_h} (\nabla_1^2 - \nabla_2^2) - \frac{e^2}{2} (\delta V_{11} - \delta V_{22}) \right] f_{12}^{h(2);incoh} \\ &\quad - i\hbar f_{12}^{h(2);coh} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2^*/2} \right) - i\hbar \frac{f_{12}^{h(2);incoh} - f_{12}^{h,eq}}{T_1} \end{aligned} \quad (1.103)$$

Damit haben die inkohärenten Beiträge zwei Quellen. Zum einen werden sie direkt aus den kohärenten Beiträgen erzeugt, sofern $T_1 \neq T_2^*/2$ gilt. Zum anderen führt die Relaxation in das Quasi-Gleichgewicht immer zu inkohärenten Beiträgen, da die Gleichgewichtsdichten von der aktuellen Halbleiter-Dichte

$$n_0 = \int d^{\delta} r_1 f_{11}^{e/h,eq} = \int d^{\delta} r_1 (f_{11}^{e/h(2);coh} + f_{11}^{e/h(2);incoh}) \quad (1.104)$$

abhängig sind. Wie schon erwähnt, ist die mittlere Dichte unabhängig von der Teilchensorte, da Elektronen und Löcher immer paarweise erzeugt werden.

Auf den ersten Blick scheint der numerische Komplexität der vollen Intraband-Gleichungen (1.94) und (1.95) zweiter Ordnung der Komplexität der inkohärenten Intraband-Gleichungen (1.102) und (1.103) zu entsprechen, da für diese die Summenregeln (1.98) und (1.99) ausgewertet werden müssen. In der Praxis kann die Interband-Gleichung, die für die Auswertung der Summenregel benötigt wird, unabhängig von der Intraband-Gleichung gelöst werden. Dadurch muss die Summenregel nicht zu jedem Zeitschritt ausgewertet werden, sondern kann ohne wesentliche Verluste in der Genauigkeit zeitlich interpoliert werden. Das Gleiche gilt

auch für die Gleichgewichtsdichten. Damit kann der numerische Aufwand um nahezu eine Größenordnung reduziert werden.

Somit sind nun alle Gleichungen vorhanden, die für Simulationen in inhomogenen Systemen benötigt werden. Diese sollen in den folgenden beiden Abschnitten bei der Untersuchung von exzitonischen Effekten [1.6](#) und bei der Auswertung von Quasi-Gleichgewichtsspektren [1.7](#) angewendet werden.

1.6 Exzitonische Wellenpaket-Dynamik von Quantendraht-Dichten [107]

Anmerkung: Die in diesem Abschnitt gezeigten numerischen Ergebnisse sind bis auf Abbildung 1.9 der Referenz [107] "Excitonic wave packet dynamics in semiconductor photonic crystal structures" entnommen, in der die hier gezeigten Resultate schon publiziert worden sind. Änderungen in der Farbwahl und der Achsenbeschriftung sind vorbehalten.

Photonische Kristalle modifizieren die transversalen Eigenschaften des elektromagnetischen Feldes [150, 65, 64, 129, 21]. Da die Licht-Materie-Wechselwirkung in Atomen, Molekülen und Festkörpern durch diesen Anteil bestimmt wird, können die optischen Eigenschaften dieser Materialien innerhalb eines photonischen Kristalls drastisch geändert werden. Innerhalb einer photonischen Bandlücke wird so z.B. die spontane Emission um mehrere Größenordnungen verringert [150, 65, 66, 67, 111]. Durch Ankopplung an Defektmoden treten neuartige starke Kopplungseffekte auf [142, 77, 105, 100]. Halbleiter können mit nahezu atomarer Präzision hergestellt werden und eignen sich nicht nur deshalb sondern auch aufgrund ihrer starken exzitonischen Resonanzen besonders für derartige Untersuchungen. Die Quanteneffizienz von optoelektronischen Halbleiter-Bauelementen erreicht teilweise den fundamentalen Grenzwert der radiativen Lebenszeit. Kombinationen von Halbleitern und photonischen Kristallen ermöglichen eine Optimierung von Licht emittierenden Dioden und Lasern [77, 105, 62, 14, 61, 38, 118, 101, 128]. Neben diesen eher anwendungsorientierten Forschungsbereichen sind photonische Kristalle auch für die Grundlagenforschung von großem Interesse. So verändert z.B. die Unterdrückung der spontanen Emission innerhalb der photonischen Bandlücke die Exziton-Statistik und Coulomb-Vielteilchen-Korrelationen innerhalb des Halbleiter-Materials [70].

Reduziert man photonische Kristalle nur auf ihre transversalen Eigenschaften, wird man deren ganzen Möglichkeiten nicht gerecht. Daneben gibt es auch in der aktuellen Forschung weniger beachtete Effekte wie die Modifikation des longitudinalen Anteils des elektromagnetischen Feldes, d.h. die Modifikation der Coulomb-Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen. In geeigneten Kombinationen aus Halbleitern und photonischen Kristallen führen diese Modifikationen zu signifikanten Änderungen der Materialeigenschaften [134, 35, 34, 95]. In solchen Strukturen ändern an den Grenzflächen des photonischen Kristalls induzierte Oberflächen-Polarisationen die Halbleiter-Eigenschaften im Vergleich zu homogenen Systemen. Diese äußern sich in Verschiebungen der Bandkante und spektralen Positionen der exzitonischen Resonanzen [139, 75]. Zudem erzeugen die Grenzflächen-Polarisationen Coulomb-Selbstwechselwirkungsbeiträge. Diese führen, wie sich anhand von Quasi-Gleichgewichtsrechnungen zeigen lässt, zu einer räumlichen Umverteilung der Ladungsträger, da die Ladungsträger wegen der Selbstwechselwirkungsterme die Nähe der Grenzflächen meiden. Diese Umverteilung verändert die Laser-Eigenschaften des Halbleiters [95] und sollte bei geeigneter Strukturierung des photonischen Kristalls zu superradianter Emission führen [27, 133].

Im Folgenden sollen die Einflüsse der modifizierten Coulomb-Wechselwirkung auf die dynamische Entwicklung der Halbleiter-Kohärenzen untersucht werden. Im Gegensatz zu früheren Untersuchungen [134, 35, 34, 95], in denen die transversalen Eigenschaften des photonischen Kristalls ignoriert worden sind, sollen hier die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen voll selbstkonsistent gelöst werden. Durch die longitudinalen Eigenschaften der Struktur werden anstatt einer einzigen exzitonischen Resonanz mehrere räumlich inhomogene exzitonische

Resonanzen auftreten, welche durch geeignete Laserpulse gezielt angeregt werden können. Nach Abklingen der optischen Anregung zeigen die kohärenten Elektron- und Lochdichten eine signifikante Wellenpaket-Dynamik. Die vorhergesagten Effekte sollten über "ultrafast nonlinear optical spectroscopy" messbar sein. Dabei sollten sich die Effekte durch eine zeitliche Modulation des Signals bemerkbar machen [45, 78, 39]. Aufgrund von Dephasierungs- und Relaxationsprozessen sollten die Ladungsträgerdichten für längere Zeiten einen Quasi-Gleichgewichtszustand annehmen. Zunächst soll jedoch das bei diesen Untersuchungen verwendete Modellsystem vorgestellt werden.

1.6.1 Das verwendete Modellsystem

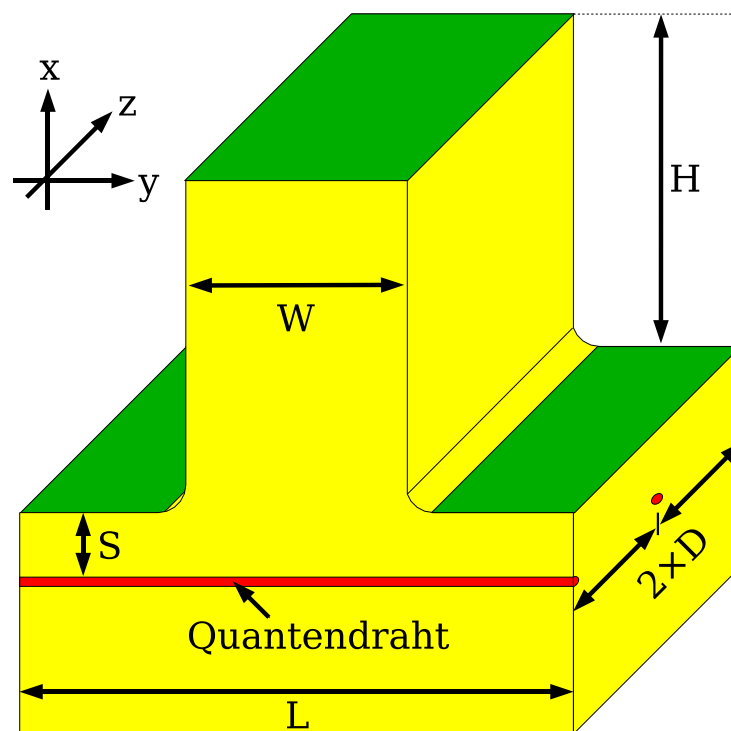


Abbildung 1.4: Photonischer Kristall mit Halbleiter-Quantendrähten. Der photonische Kristall besteht aus einer periodischen Rippenstruktur, die in ein homogenes Medium ($\epsilon = 13$) eingeztzt worden ist. Um einen möglichst großen dielektrischen Kontrast zu erzielen, sind die Zwischenräume mit Luft ($\epsilon = 1$) gefüllt. Die Quantendrähte verlaufen parallel zueinander und senkrecht zu den Rippen im Abstand $S = 2.6\text{nm}$ unterhalb der Rippenstruktur. In y - und z -Richtung ist die Struktur periodisch, wobei die Periode in y -Richtung durch den Abstand der Rippen ($L = 180\text{nm}$) und in z -Richtung durch den Abstand der Quantendrähte ($D = 30\text{nm}$) bestimmt wird. Die Breite der Rippen W wird variiert mit $W \in \{0\text{nm}, 60\text{nm}, 90\text{nm}, 120\text{nm}, 180\text{nm}\}$. Der Fall $W = 0$ wird auch als Halbraum und der Fall $W = 180\text{nm}$ auch als homogenes Medium bezeichnet. Die Höhe der Rippen beträgt $H = 700\text{nm}$.

Die Lösung der inhomogenen Halbleiter-Bloch-Gleichungen zusammen mit den Maxwell-Gleichungen ist numerisch sehr aufwendig. Dies liegt zum einen daran, dass die Halbleiter-Kohärenzen explizit von den zwei Teilchenkoordinaten abhängen und nicht nur vom Relativabstand. Damit ist schon die Lösung der linearen Polarisationsgleichung (1.93) für Quantenfilme nicht einfach. An eine Berechnung der Hartree-Fock-Integrale aus (1.90) kann dabei

überhaupt nicht gedacht werden. Diskretisiert man den Quantenfilm mit $N \times N$ Punkten, ist der numerische Aufwand für das Lösen von Gleichung (1.90) von der Ordnung N^6 . Da sich die Ortsauflösung des Halbleiters am exzitonischen Bohr-Radius ($a_B \simeq 13 \text{ nm}$) orientieren muss, der photonische Kristall aber eine Periode von der Größenordnung optischer Wellenlängen vorgibt, müssen in der Regel mehr als 100 Punkte für jede Raumrichtung verwendet werden. Für eine Modellstudie sollten daher eindimensionale Quantendrähte anstelle von Quantenfilmen verwendet werden. Die für das System mit Quantendrähten untersuchten physikalischen Phänomene sollten sich auch für Quantenfilme beobachten lassen. Den anderen numerisch aufwendigen Teil stellt die FDTD-Simulation dar. Je nach Größe der Struktur lassen sich diese Rechnungen nur unter Parallelisierung der Gleichungen auf mehreren Computern durchführen. Für die in dieser Arbeit gewählte Anregungsbedingung, dass das Lichtfeld senkrecht von oben auf den photonischen Kristall trifft, kann der numerische Aufwand durch Anwendung von periodischen Randbedingungen erheblich reduziert werden, da in diesem Fall nur eine Einheitszelle der periodischen Kristallstruktur berücksichtigt werden muss. Dies stellt jedoch eine wesentliche Einschränkung dar, da die photonische Bandstruktur nur für eine Propagation in der Ebene des photonischen Kristalls, also für eine Propagation senkrecht zur gewählten Richtung, in Erscheinung treten würde. Dies birgt jedoch auch den Vorteil, dass die auftretenden Effekte eindeutig den longitudinalen Eigenschaften des photonischen Kristalls zuzuordnen sind, da transversale Effekte nur eine untergeordnete Rolle spielen sollten. Propagationen in andere Raumrichtungen könnten jedoch für zukünftige Anwendungen interessant werden, in denen sowohl die longitudinalen als auch die transversalen Eigenschaften ausgenutzt werden sollen.

Um den numerischen Aufwand möglichst gering zu halten und dadurch eine umfassende Analyse zu ermöglichen, wird folgende Struktur gewählt: Das aktive Material besteht aus Halbleiter-Quantendrähten, die parallel zueinander in einem homogenen Medium angeordnet sind. Die Quantendrähte sind in y -Richtung orientiert und haben untereinander einen Abstand $D = 30 \text{ nm}$. In dieses (abgesehen von den Quantendrähten) homogene Material wurde oberhalb der Halbleiter-Struktur ein photonischer Kristall eingätzt. Dieser Kristall besteht aus einer Bragg-artigen, eindimensionalen, in y -Richtung periodischen Rippenstruktur. Die Periode wurde auf $L = 180 \text{ nm}$, die Höhe der Rippen auf $H = 700 \text{ nm}$ festgesetzt. Die Rippenbreite variiert zwischen $W \in \{0 \text{ nm}, 60 \text{ nm}, 90 \text{ nm}, 120 \text{ nm}, 180 \text{ nm}\}$, wodurch sich die exzitonischen Eigenschaften des Systems verändern lassen. Die Kanten der Struktur wurden abgerundet, um unphysikalische numerische Artefakte zu vermeiden. Durch das Abrunden kommt die Struktur auch experimentell realisierbaren photonischen Kristallen sehr nahe, die durch bei der Herstellung häufig verwendete Ätztechniken auch keine scharfen Kanten aufweisen. Der Abstand zwischen photonischem Kristall und dem Halbleiter-Material wird mit $S = 2.6 \text{ nm}$ möglichst klein gehalten, um starke Coulomb-Modifikationen zu bekommen.

Die Quantendrähte sollen aus $GaAs$ bestehen, das umgebende Material aus $Ga_xAl_{1-x}As$, um ein geeignetes Confinement für die Quantendrähte zu garantieren. Zur Vereinfachung wird sowohl für den Halbleiter als auch für die Umgebung eine dielektrische Konstante von $\epsilon = 13$ angenommen. Diese Wahl garantiert einen großen dielektrischen Kontrast zu den mit Luft ($\epsilon = 1$) gefüllten Bereichen des photonischen Kristalls. Durch die gewählten Bedingungen variiert sowohl das optische transversale Lichtfeld als auch die longitudinalen Coulomb-Modifikationen periodisch in y -Richtung.

Zu Vergleichszwecken sollen noch zwei Referenzsysteme eingeführt werden. Dies ist zum einen der Grenzfall $W \rightarrow L$, der im Folgenden als homogener Fall bezeichnet wird. Für diesen Fall sind keine merklichen Coulomb-Modifikationen vorhanden, da die nächste Grenz-

fläche über 700 nm entfernt ist. Der andere Grenzfall entspricht dem Limes $W \rightarrow 0$. Dieser Fall wird als Halbraum bezeichnet, da die Halbleiter nur durch eine dünne Schicht der Dicke $S = 2.6\text{ nm}$ von der ebenen Grenzfläche getrennt werden. Dieser Fall weist die maximalen Coulomb-Modifikationen auf und ist wie der erste Grenzfall räumlich homogen.

1.6.2 Numerische Ergebnisse zu den Coulomb-Modifikationen

Wie schon erwähnt, muss bei der numerischen Berechnung der Coulomb-Modifikationen eine Fredholm-Integralgleichung gelöst werden. Dabei müssten normalerweise alle in dem photonischen Kristall vorkommenden Grenzflächen berücksichtigt werden. Da die zu berechnenden Coulomb-Modifikationen stark abstandsabhängig sind, sollten jedoch nur die Grenzflächen der nächsten Umgebung wesentlich beitragen. Numerische Studien [106] haben gezeigt, dass für die Berechnung der Coulomb-Modifikationen innerhalb einer Einheitszelle des photonischen Kristalls nur die direkt angrenzenden Nachbarzellen berücksichtigt werden müssen. Dabei erzielt man schon gute Ergebnisse, wenn man die Kopplung zwischen benachbarten Grenzflächen vernachlässigt und stattdessen die Lösungen der einzelnen Grenzflächen superponiert. Diese Näherung liefert gute Übereinstimmung mit der exakten Rechnung, soweit der Abstand zwischen den benachbarten Grenzflächen nicht zu klein wird [106]. Die in dieser Ar-

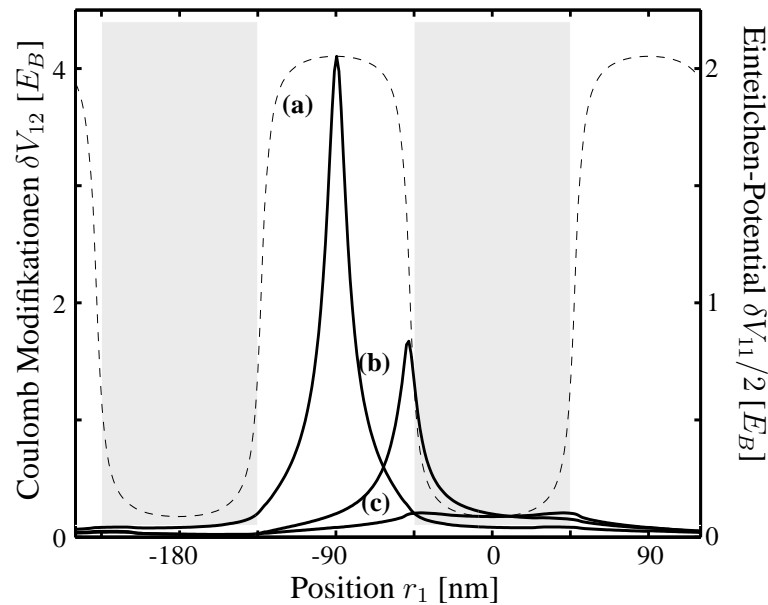


Abbildung 1.5: Coulomb Modifikationen $\delta V_{12} = \delta V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (durchgezogene Linien) innerhalb der Quantendrähte für festgehaltene Position $\mathbf{r}_2 = -90\text{ nm}$ (a), $\mathbf{r}_2 = -45\text{ nm}$ (b) und $\mathbf{r}_2 = 0\text{ nm}$ (c). Die gestrichelte Linie zeigt das Einteilchen-Potential $\delta V_{11} = \delta V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)$. Der photonische Kristall entspricht der in Abbildung 1.4 gezeigten Struktur mit einer Rippenbreite von $W = 90\text{ nm}$. Positionen unterhalb der Rippen sind grau schattiert worden. Als Einheit für die Energie wurde die Exziton-Bindungsenergie eines GaAs-Volumenhalbleiters gewählt: $E_B = 4.25\text{ meV}$.

beit verwendeten Coulomb-Korrekturen wurden durch die Superposition der Modifikation von drei einzelnen Rippen berechnet. Abbildung 1.5 zeigt die Modifikationen δV_{12} innerhalb der Quantendrähte als Funktion von \mathbf{r}_1 für drei festgehaltene \mathbf{r}_2 -Koordinaten: (a) $\mathbf{r}_2 = -90\text{ nm}$, (b) $\mathbf{r}_2 = -45\text{ nm}$ und (c) $\mathbf{r}_2 = 0\text{ nm}$. Diese Positionen stehen für Orte zwischen, an der

Kante und unterhalb der Materialrippen. Die Bereiche unterhalb der Rippen sind in Abbildung 1.5 grau unterlegt worden. Die Coulomb-Modifikationen unterhalb der Rippen (c) sind vergleichsweise schwach, da der Abstand zur nächsten Luft-Material-Grenzfläche des photonischen Kristalls verhältnismäßig groß ist. Entsprechend sind die inhomogenen Coulomb-Beiträge in (a) groß, da sich die nächstgelegene Grenzfläche nur $S = 2.6 \text{ nm}$ oberhalb der an der Position \mathbf{r}_2 fixierten Ladung befindet. Beim Verschieben der Position \mathbf{r}_2 zwischen den Grenzfällen (a) und (c) findet ein schneller Übergang von starken zu schwachen Modifikationen im Bereich der Rippenkante statt. Dies spiegelt sich insbesondere auch in den Coulomb-Selbstenergien $\delta V_{11}/2$ wieder. Die Coulomb-Modifikationen für Positionen \mathbf{r}_1 zwischen den Rippen nehmen schnell mit zunehmenden Abstand $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ab, während die Modifikationen unterhalb der Rippen sich nur langsam verändern.

Die Coulomb-Selbstenergien $\delta V_{11}/2$ bilden ein periodisches Potential, dessen Minima unterhalb der dielektrischen Rippen liegen. Die Situation sollte vergleichbar mit einer periodischen Anordnung von Kastenpotentialen endlicher Tiefe sein. In solchen Situationen können die Lösungen der Schrödinger-Gleichung in gebundene und ungebundene Lösungen unterteilt werden. Die Wellenfunktionen der gebundenen Lösungen haben nur innerhalb der Potentialmulde eine merkliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit und fallen innerhalb der Barrieren exponentiell ab. Die ungebundenen Lösungen sind auf keinen Raumbereich beschränkt. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie sich diese einfachen Überlegungen auf das Halbleiter-System übertragen lassen und welche neuartigen Effekte dabei auftreten können.

1.6.3 Räumlich inhomogene exzitonische Zustände

Im Folgenden sollen anhand von linearen Absorptionsspektren die exzitonischen Eigenschaften des Systems untersucht werden. Für den Halbleiter wird dabei als Dipol-Matrixelement $\boldsymbol{\mu} = 3.5 e\text{\AA}e_y$, als effektive Elektron- und Lochmassen $m_h/m_e = 4$ und $m_e = 0.066m_0$ und als Halbleiter-Bandlücke $E_G = 1.42 \text{ eV}$ angesetzt. Für eine dielektrische Konstante von $\epsilon = 13$ erhält man damit eine 3D exzitonische Bindungsenergie von $E_B = 4.25 \text{ meV}$ bzw. einen 3D exzitonische Bohr-Radius von $a_B \approx 13 \text{ nm}$. In den meisten Rechnungen wird zudem eine nicht radiative homogene Verbreiterung von $\gamma = \hbar/T_2^* = 1 \text{ meV}$ in der Bewegungsgleichung der Interband-Kohärenzen verwendet. Der homogene Anteil des Coulomb-Potentials der eindimensionalen Quantendrähte wurde über den Parameter $a_0 = 0.16 a_B$ regularisiert $V_0 = 1/(|r| + a_0)$ [83, 5]. Bis auf die nicht radiative Zerfallszeit T_2^* bleiben diese Parameter unverändert. Dies gilt auch für die Breite der Rippen, die mit Ausnahme von Abbildung 1.6 auf $W = 90 \text{ nm}$ festgesetzt wird.

Für die numerischen Ergebnisse wird das FDTD-Raumgitter mit einer Auflösung $dr = 5 \text{ nm}$ diskretisiert. Die Courant-Bedingung [136] erfordert dafür eine zeitliche Auflösung von $dt = dr/(2c) \simeq 8.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$. Für den Halbleiter wird die räumliche Auflösung auf 10 Punkte pro exzitonischem Bohr-Radius, d.h. $dr_{HL} = 1.3 \text{ nm}$, gesetzt.

Bei den Untersuchungen zu Halbleiter-Quantenfilmen unterhalb einer ebenen Grenzfläche konnten eine Verschiebung der Kontinuums-kante zu höheren Energien sowie eine verstärkte exzitonische Bindungsenergie beobachtet werden [134, 75]. Für den vorliegenden inhomogenen Fall werden beide Größen ortsabhängig. Die Variation der Bandkante aufgrund der Coulomb-Selbstenergien induziert ein Einteilchen-Potential, dessen Minima unterhalb der dielektrischen Rippen liegen. In diesem periodischen Potential bilden sich gebundene und ungebundene Einteilchen- und Exziton-Zustände. Die exzitonischen Zustände sind in den eingeklinkten Graphen in Abbildung 1.6 unter Angabe der spektralen Position und der zugehören-

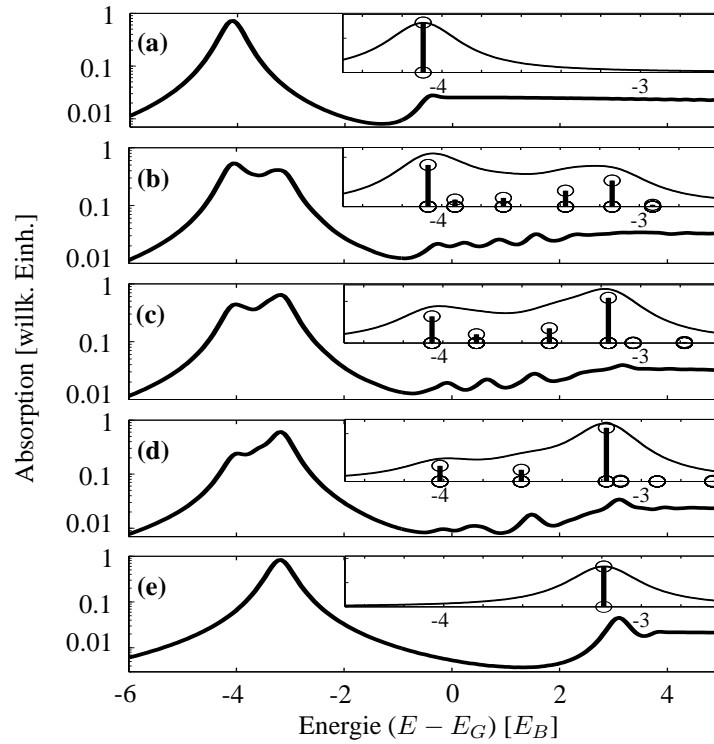


Abbildung 1.6: Lineare Absorptionsspektren mit exzitonischen Resonanzen in logarithmischer Darstellung. Die Breite der Rippen der photonischen Kristallstruktur 1.4 entspricht (a) $W = 180\text{nm}$, (b) $W = 120\text{nm}$, (c) $W = 90\text{nm}$, (d) $W = 60\text{nm}$ und (e) $W = 0\text{nm}$. In die Abbildungen wurden Vergrößerungen der Exzitonresonanzen eingeklinkt. Diese zeigen in linearer Skala die Zerlegung der Resonanz in gebundene exzitonische Zustände sowie deren Oszillatorstärke, wobei der Halbraum-Fall $W = 0$ und der homogene Fall $W = 180\text{nm}$ als Grenzfälle nur eine exzitonische Resonanz aufweisen. Für die Simulationen wurde ein phänomenologisches Dephasieren $\gamma = 1\text{meV}$ für die Interband-Polarisation sowie fünf Einheitszellen mit periodischen Randbedingungen für die Quantendraht-Länge angesetzt. Die Strukturen an der Kontinuums-kante sind keine numerischen Artefakte, sondern sind Resultate der Coulomb-Modifikationen.

den Oszillatorstärke dargestellt. Die durch die lokalen Potentiale erzeugten inhomogenen exzitonischen Resonanzen zeigen sich in den Absorptionsspektren 1.6 (b)–(d) in der Doppelpeak-artigen 1s-Exzitonresonanz. Zur Betonung der räumlich inhomogenen Bandkante sind die Spektren logarithmisch dargestellt. Zum Vergleich ist in (a) und (e) auch die Absorption des homogenen und des Halbraum-artigen Falls dargestellt. Diese weisen als räumlich homogene Systeme nur eine 1s-Exzitonresonanz auf, deren spektrale Position eine untere bzw. obere Schranke für die exzitonischen Resonanzen in (b)–(d) liefern. Der linke Teil der Doppelresonanz wird durch die gebundenen exzitonischen Zustände bestimmt, während der rechte Teil eher den ungebundenen Zuständen zugeordnet werden kann. Mit Variation der Rippendicke W verändert sich die spektrale Position des rechten und linken Anteils kaum. Während dieses Vorgangs wird im Wesentlichen die Oszillatorstärke zwischen beiden Anteilen umverteilt. Weiterführende Informationen können den in Abbildung 1.6 eingeklinkten Graphen entnommen werden. Hierfür wurde der homogene Anteil der linearen Polarisationsgleichung (1.93) für eine Einheitszelle mit periodischen Randbedingungen diagonalisiert. Dabei können die Eigenwerte $\epsilon_{X,i}$ und Eigenfunktionen $\Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ der inhomogenen exzitonischen

Resonanzen bestimmt werden. Mit Hilfe der vorgegebenen homogenen Verbreiterung können dann die exzitonischen Resonanzen in Abbildung 1.6 mit Hilfe von Lorentz-Kurven $\sum_i A_i / ((E - \epsilon_{X,i})^2 + \gamma^2)$ gefittet werden und daraus die Oszillatorstärke bestimmt werden. Die Anzahl der inhomogenen Zustände wird durch die Breite der dielektrischen Rippen bestimmt, wobei die Grenzfälle nur eine Resonanz aufweisen. Mit abnehmender Rippenbreite bildet sich das periodische Selbstenergie-Potential aus, in dem exzitonische Zustände gebunden werden können. Maximale Potentialtiefe wird für mittlere Breiten, d.h. $W \simeq 90 \text{ nm}$, erreicht. Die Breite des Potentialtopfs stimmt im Wesentlichen mit der Dicke W überein (vgl. Abbildung 1.5), sofern man den Extremfällen (a) und (e) nicht zu nah kommt. Beim Übergang von (a)–(e) nimmt die Oszillatorstärke der in dem Potentialtopf gebundenen Zustände ab und geht auf die ungebundenen Zustände über.

Den logarithmischen Darstellungen kann man entnehmen, dass die Bandkante des Halbraum-Falls gegenüber dem homogenen Fall um ca. $4 E_B$ verschoben ist. Dabei verstärkt sich die exzitonische Bindungsenergie von $4 E_B$ auf $7.2 E_B$. Neben den 1s-Resonanzen sind in beiden Grenzfällen auch die 2s-Exzitonresonanzen als schmale Peaks bei $-0.5 E_B$ in (a) und bei $3.1 E_B$ in (e) gut zu erkennen. Oberhalb dieser Resonanzen liegt ein glattes Kontinuum von Zuständen vor. In den inhomogenen Situationen (b)–(d) ändert sich die Situation wesentlich. Diese weisen zwischen $-0.5 E_B$ und $3.1 E_B$ mehrere kleine Absorptionspeaks auf, die auf inhomogene 2s-Resonanzen und die räumlich inhomogene Bandkante zurückzuführen sind. Für ein tieferes Verständnis der Zusammenhänge ist in Abbildung 1.7 für den Fall (c) aus Ab-

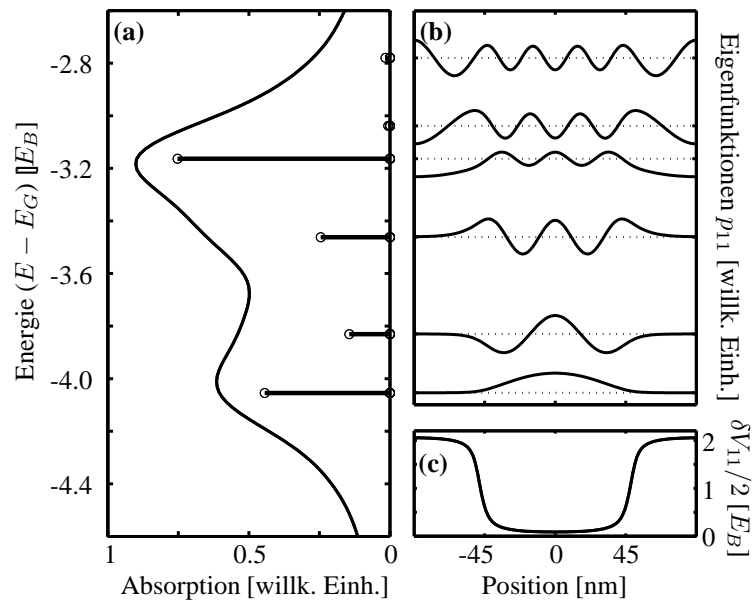


Abbildung 1.7: (a) Lineares Absorptionsspektrum mit exzitonischer Resonanz sowie deren Zerlegung in gebundene exzitonische Zustände. Energie und Oszillatorstärke der einzelnen Resonanzen kann der Position und Länge der Linien entnommen werden. (b) Statische Eigenlösungen der linearen Interband-Gleichung (1.93) ohne elektrisches Feld. Die Graphen zeigen die räumliche Variation der Eigenfunktionen zu gleicher Elektron- und Loch-Position $\Psi_{X,\lambda}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)$. Die gepunkteten Linien sind eine Verlängerung der zugehörigen Resonanzlinien aus (a) und dienen zugleich als Null-Linie für die Polarisierungen. Zur Orientierung ist in (c) das Einteilchen-Potential dargestellt. Die Strukturparameter entsprechen denen aus Abbildung 1.6 (c).

bildung 1.6, d.h für $W = 90 \text{ nm}$, der Diagonalteil ($\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$) der Polarisierungseigenfunktionen

$\Psi_{X,i}(r_1, r_1)$ dargestellt. Wie Abbildung 1.7 (b) und (c) zu entnehmen ist, sind die zu den niedrigsten drei Eigenwerten $\epsilon_{X,i}$ gehörenden Eigenfunktionen innerhalb des Potentials lokalisiert, während die übrigen Resonanzen ungebundenen Zuständen entsprechen. Mit zunehmender Energie nimmt auch die Anzahl der Knoten der Wellenfunktionen zu. Das Verhalten ähnelt, wie eingangs erwähnt, dem quantenmechanischen Problem eines Teilchens in einem endlich tiefen Kastenpotential.

Es sei hier noch angemerkt, dass sich die Darstellung auf die optisch mit den gewählten Anfangsbedingungen anregbaren Zustände beschränkt. Neben den hier dargestellten symmetrischen Wellenfunktionen erhält man bei der Diagonalisierung auch antisymmetrische, d.h. $\Psi_X(r_1, r_1) = -\Psi_X(-r_1, -r_1)$. Das anregende Lichtfeld wird in den FDTD-Simulationen oberhalb des photonischen Kristalls als ebene, in (-x)-Richtung propagierende Welle eingekoppelt, die in y-Richtung polarisiert ist. Der photonische Kristall modifiziert zwar die räumliche Struktur des Lichtfelds, zerstört dabei aber nicht die Spiegelsymmetrie bezüglich der Mitte der Einheitszelle. Damit verschwindet der räumliche Überlapp des y-symmetrischen elektrischen Feldes mit der antisymmetrischen Wellenfunktion. Für eine Lichtpropagation in eine andere Richtung kann die Symmetrie gebrochen werden, womit Anteile der räumlich antisymmetrischen Wellenfunktionen in den Absorptionsspektren sichtbar werden sollten.

1.6.4 Kohärente Wellenpaket-Dynamik

Bisher wurden nur die linearen optischen Eigenschaften untersucht, insbesondere die exzitonischen Resonanzen mit ihren Oszillatorstärken, spektralen Lagen und räumlich inhomogenen Eigenfunktionen. Im Folgenden sollen die dazu gehörenden Elektron- und Lochdichten für den kohärenten $\chi^{(2)}$ -Limes untersucht werden. Diese Dichten zeigen nach der optischen Anregung eine charakteristische Wellenpaket-Dynamik, die direkt auf die verschiedenen inhomogenen Resonanzen zurückgeführt werden kann. Da die Anregungen resonant am Exziton vorgenommen werden sollen, spielt die Auflösung der Kontinuumszustände eine geringere Rolle. Daher braucht anstatt der im vorigen Abschnitt verwendeten fünf Einheitszellen mit periodischen Randbedingungen nur eine Einheitszelle verwendet zu werden. Mehr als eine Einheitszelle wird nur benötigt, um ein glattes Kontinuum zu erhalten, die exzitonische Resonanz ist hingegen schon für eine Zelle numerisch stabil bezüglich ihrer Form und spektralen Lage.

Zur Betonung der exzitonischen Eigenschaften sollen die folgenden Untersuchungen für niedrige Anregungsintensitäten durchgeführt werden. Für große Intensitäten würden hohe Elektron- und Lochdichten erzeugt, die wiederum zu einem unerwünschten Ausbleichen der Exzitonresonanzen und zu unerwünschten Resonanzverschiebungen führen würden. Zudem ist zu beachten, dass die im vorigen Abschnitt eingeführte Analyse der exzitonischen Resonanzen über Berechnung der Eigenfunktionen und Eigenwerte der homogenen Polarisationsgleichung (1.93) nur für schwache Anregung gültig bleibt. Für schwache Anregung ist eine Auswertung der Gleichungen bis zur zweiten Ordnung der Licht-Materie-Wechselwirkung (1.93)–(1.95) ausreichend. Des Weiteren sollen die Betrachtungen auf die rein kohärenten Effekte fokussiert werden. Dabei wird der nicht radiative Zerfall vernachlässigt, d.h. $T_1, T_2^* \rightarrow \infty$. In diesem Fall muss nur die lineare Polarisationsgleichung gelöst werden. Die zugehörigen Elektron- und Lochdichten lassen sich dann über die Summenregeln (1.98) und (1.99) berechnen. Abbildung 1.8 zeigt die zeitliche Entwicklung der kohärenten Elektronendichten $f_{11}^{e(2);coh}$ für eine Anregung mit einem Gauß-Puls, der eine volle Halbwertsbreite (FWHM) von $2 ps$ aufweist und dessen Zentralfrequenz resonant zu jeweils einer der vier untersten exzitonischen Resonanzen aus Abbildung 1.7 gewählt worden ist. Die Resonanzen in Abbildung 1.8

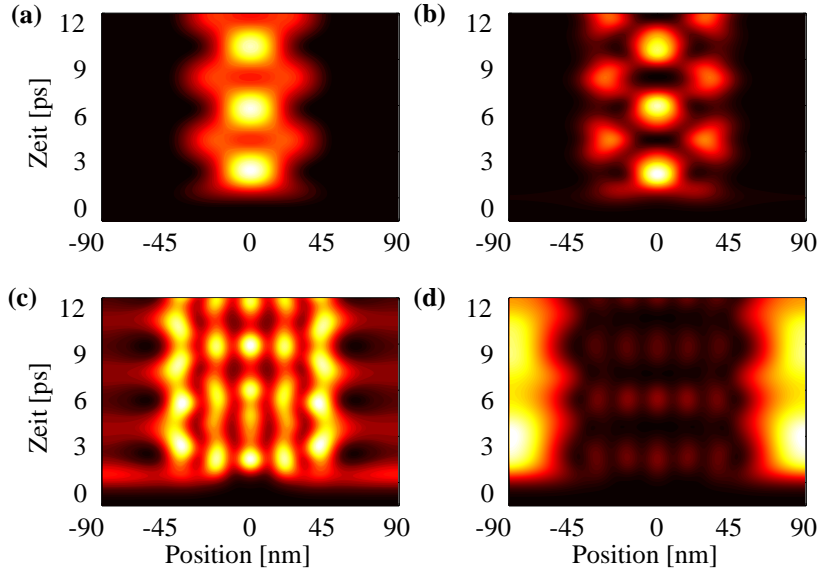


Abbildung 1.8: Konturdiagramm der zeitlichen und räumlichen Dynamik der kohärenten Elektronendichten $f_{11}^{e(2),coh}$ aus Gleichung (1.94) entlang einer Quantendraht-Einheitszelle. Das einlaufende Lichtfeld hat eine Gauß'sche Einhüllende mit einer vollen Halbwertsbreite von 2 ps. Die Zentralfrequenz ω_L wurde resonant zu jeweils einer der vier untersten symmetrischen exzitonischen Zustände gewählt: (a) $\omega_L = E_G - 4.05 \text{ meV}$, (b) $\omega_L = E_G - 3.83 \text{ meV}$, (c) $\omega_L = E_G - 3.46 \text{ meV}$, (d) $\omega_L = E_G - 3.16 \text{ meV}$. Für den photonische Kristall werden die Parameter aus Abbildung 1.4 mit $W = 90 \text{ nm}$ als Rippenbreite verwendet. Die Rechnungen wurden im kohärenten Limes durchgeführt, d.h. abgesehen vom radiativen Zerfall ohne Dephasieren der Polarisation bzw. Thermalisieren der Dichten ($T_1, T_2^* \rightarrow \infty$). In dem Konturdiagramm steht Weiß für die maximale und Schwarz für die minimale Dichte.

(a)–(c) gehören zu exzitonischen Zuständen, die im Potentialtopf unterhalb der dielektrischen Rippen gebunden sind. Die Wellenpaket-Dynamik ist daher auf den Bereich von -45 nm bis $+45 \text{ nm}$ beschränkt. Die vierte Resonanz, Abbildung 1.8 (d), gehört zu einem ungebundenen Zustand, der hauptsächlich zwischen den Zylindern konzentriert ist. Die spektrale Breite der anregenden 2 ps-Pulse beträgt ungefähr $0.3 E_B$ (FWHM der Feldintensität) und ist damit mit den Abständen der exzitonischen Resonanzen vergleichbar. Dadurch werden trotz resonanter Anregung auch die jeweils benachbarten exzitonischen Zustände angeregt. Diese Überlagerung verschiedener Resonanzen führt zu der gezeigten Wellenpaket-Dynamik. Hierbei liefern die resonant angeregten Zustände jeweils den Hauptbeitrag, was sich durch nachfolgende Analyse zeigen lässt.

Wendet man die Summenregeln (1.98) und (1.99) auf die Polarisations-eigenfunktionen $\Psi_{X,i}(r_1, r_2)$ an, können die dazu gehörenden Elektron- und Lochdichten berechnet werden. Abbildung 1.9 zeigt die Polarisations-eigenfunktionen zu gleicher Elektron- und Lochkoordinate und die zugehörigen Elektron- und Lochdichten. Neben den mit den gewählten Anfangsbedingungen optisch anregbaren Eigenfunktionen sind in grau auch die nicht sichtbaren, antisymmetrischen Eigenfunktionen dargestellt. Vergleicht man die aus den Polarisations-eigenfunktionen $\Psi_{X,i}(r_1, r_2)$ berechneten kohärenten Dichten mit den Signaturen in Abbildung 1.8, können diese eindeutig den einzelnen Resonanzen zugeordnet werden. So wird z.B. die Dynamik in Abbildung 1.8 (c) hauptsächlich durch die dritte und vierte Resonanz bestimmt.

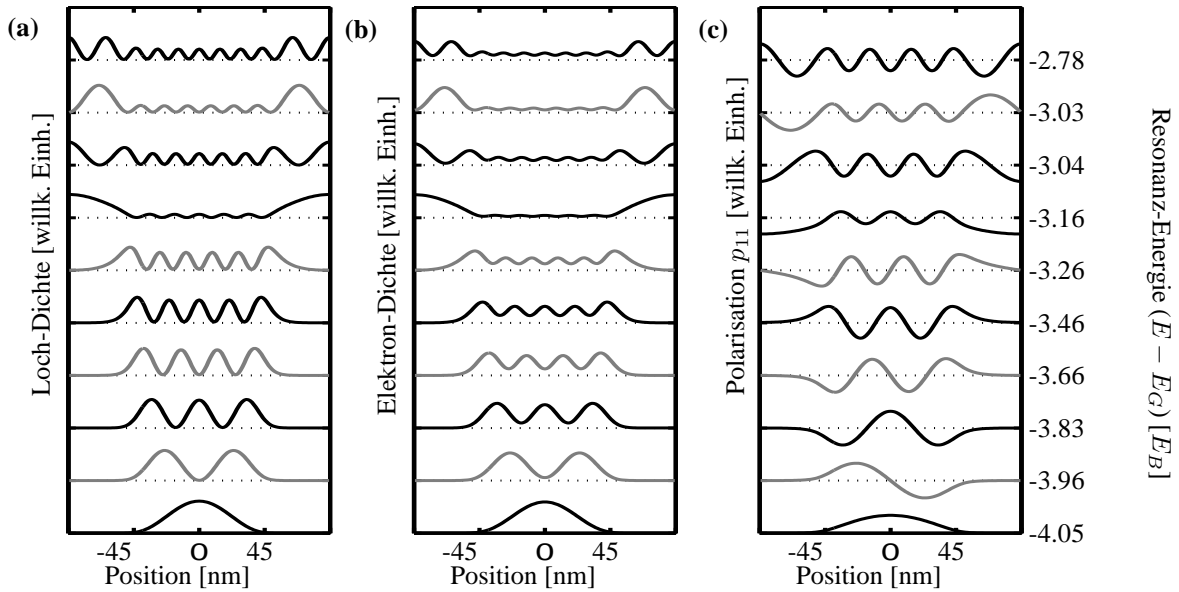


Abbildung 1.9: (a) Kohärente Loch- und (b) Elektronendichten sowie (c) die zugehörige Polarisations-eigenfunktionen zu gleicher Elektron- und Loch-Position $\Psi_{X,\lambda}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)$. Die statischen kohärenten Dichten lassen sich über die $\chi^{(2)}$ -Summenregeln (1.98) und (1.99) aus den Polarisations-eigenfunktionen berechnen. Auf der rechten Seite sind zusätzlich die Resonanzenergien eingezeichnet. Die gepunkteten Linien dienen als Nullachse. Mit grauer Farbe sind die antisymmetrischen Polarisations-eigenfunktionen gekennzeichnet, die mit den in dieser Arbeit für das Lichtfeld gewählten Anfangsbedingungen nicht angeregt werden können. Die Strukturparameter entsprechen denen aus Abbildung 1.6 (c).

Die in Abbildung 1.9 gezeigten Dichten lassen sich in den dynamischen Rechnungen reproduzieren, wenn man zeitlich längere und damit spektral schmalere Laser-Pulse für die optische Anregung verwendet. Dies wird in Abbildung 1.10 für eine resonante Anregung an der dritten Resonanz gezeigt. Für eine Anregung mit einem kurzen $1ps$ -Puls erhält man eine Überlagerung aller vier exzitonischen Zustände. Der zugehörige Konturplot, Abbildung 1.10 (a), zeigt ein komplexes Muster aus allen Anteilen. Verdoppelt man die Pulslänge auf $2ps$ wird die Dynamik hauptsächlich von der dritten und vierten Resonanz getragen. Dies liegt zum einen daran, dass der energetische Abstand zur vierten Resonanz kleiner ist als der zur ersten und zweiten Resonanz, zum anderen hat die vierte Resonanz auch nach Abbildung 1.7 die größte Oszillatorstärke. Die Anteile der vierten Resonanz verringern sich, wenn man die Länge des Pulses weiter erhöht. Sind in 1.10 (c) für eine Pulsbreite von $2.5ps$ noch Beträge der vierten Resonanz zu erkennen, zeigt Abbildung 1.10 (d) nach der Anregung mit einem $4.5ps$ breiten Puls keine Wellenpaket-Dynamik mehr. Die Form der Dichte wird nur durch die zugehörige exzitonische Wellenfunktion der dritten Resonanz bestimmt.

Dieselben Erkenntnisse kann man auch dem zeitlichen Verlauf der räumlich integrierten optischen Polarisation $P(t) = \int dr_1 p_{11}^{(1)}(t)$ für die vier Pulsbreiten aus Abbildung 1.10 entnehmen. Der Betrag von $P(t)$ wurde dafür in Abbildung 1.11 dargestellt. Hierbei zeigt die zeitliche Entwicklung der Polarisation in (a) eine Modulation, die von mehreren Frequenzen bestimmt wird. Der Verlauf in (b) und noch deutlich der in (c) wird hingegen im Wesentlichen von einer Frequenz, d.h. von zwei Resonanzen, bestimmt. Der Graph in (d) ist nach der optischen Anregung abgesehen von einem schwachen Abklingen durch den radiativen Zerfall zeitlich

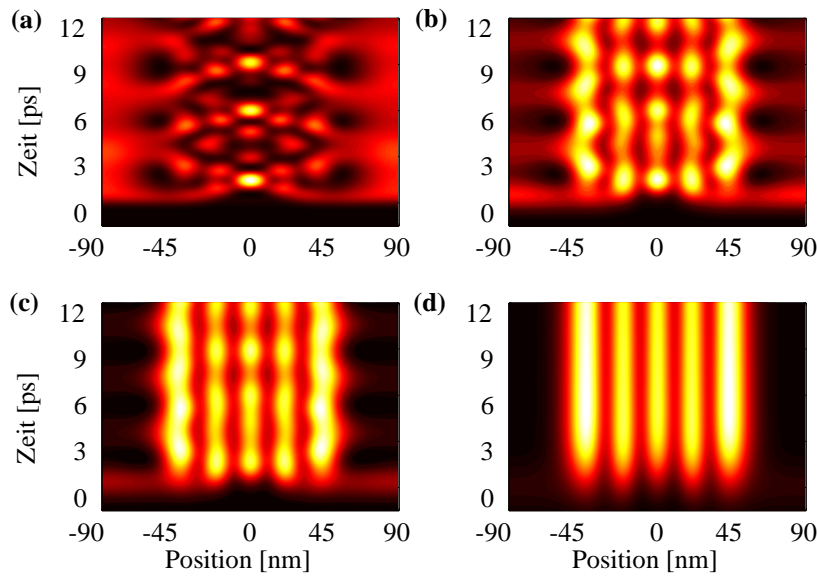


Abbildung 1.10: Konturdiagramm der zeitlichen und räumlichen Dynamik der kohärenten Elektronendichten $f_{11}^{e(2),coh}$ aus Gleichung (1.94) entlang einer Quantendraht-Einheitszelle. Das einlaufende Lichtfeld hat eine Gauß'sche Einhüllende mit einer vollen Halbwertsbreite von (a) 1 ps, (b) 2 ps, (c) 2.5 ps und (d) 4.5 ps. Die Zentralfrequenz ω_L wurde resonant zum drittuntersten symmetrischen exzitonischen Zustand gewählt, d.h. $\omega_L = E_G - 3.46 \text{ meV}$. Für den photonische Kristall werden die Parameter aus Abbildung 1.4 mit $W = 90 \text{ nm}$ als Rippenbreite verwendet. Die Rechnungen wurden im kohärenten Limes durchgeführt, d.h. abgesehen vom radiativen Zerfall ohne Dephasieren der Polarisation bzw. Thermalisieren der Dichten ($T_1, T_2^* \rightarrow \infty$). In dem Konturdiagramm steht Weiß für die maximale und Schwarz für die minimale Dichte.

konstant. Ein solches Verhalten lässt sich dadurch erklären, dass nur eine einzige exzitonische Resonanz zur Polarisation beiträgt.

Die in Abbildung 1.8–1.11 gezeigten Ergebnisse lassen sich auch für die Löcher berechnen. Dabei erhält man qualitativ gleiche Ergebnisse. Der Unterschied liegt im Wesentlichen darin, dass die Löcher aufgrund ihrer größeren Masse stärker lokalisiert und dadurch die Maxima und Minima in der Wellenpaket-Dynamik stärker ausgeprägt sind.

1.6.5 Wellenpaket-Dynamik mit Dephasieren und Relaxieren

Eine Anregung einer Halbleiter-Heterostruktur mit einem kurzen Laserpuls erzeugt zunächst eine kohärente optische Polarisation. Mit zunehmender Zeit zerfällt diese Polarisation aufgrund verschiedener Dephasierungsmechanismen. Je nach Mechanismus variieren die Dephasierungszeiten zwischen einigen Pikosekunden und wenigen Femtosekunden. Daneben trägt der radiative Zerfall aufgrund der endlichen Lebensdauer der angeregten Zustände immer zum Zerfall der Polarisation bei. In Halbleitern wird das Dephasieren jedoch hauptsächlich durch die Wechselwirkung mit Phononen, Beiträge der Vielteilchen-Coulomb-Wechselwirkung und teilweise auch durch Unordnung [72] dominiert. Neben dem Dephasieren der Polarisation verändern auch die optisch erzeugten Elektron- und Lochdichten mit zunehmender Zeit ihre Eigenschaften und werden inkohärent. Aufgrund der Streuung an Phononen sowie der Ladungsträger untereinander relaxieren die inkohärenten Dichten gegen Quasi-

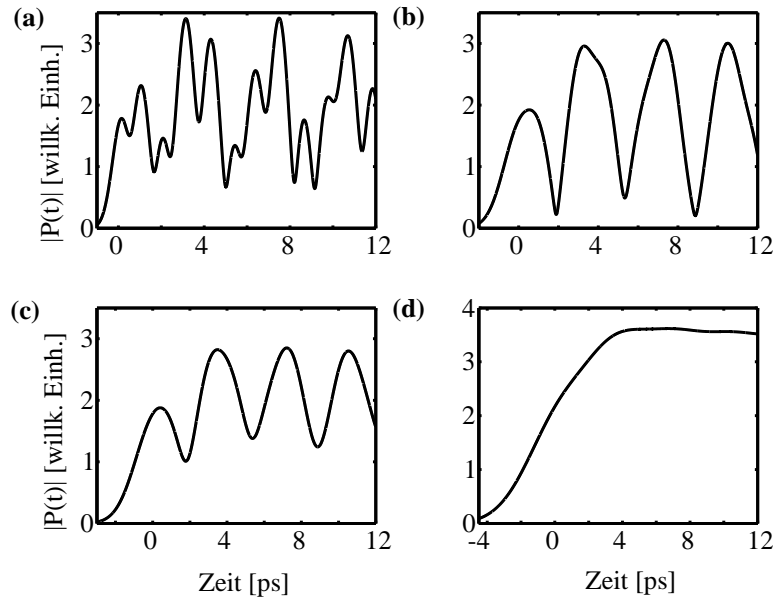


Abbildung 1.11: Zeitliche Entwicklung der ortsintegrierten makroskopischen optischen Polarisation bei einer resonanten Anregung des drittuntersten Exzitons ($\omega_L = E_G - 3.46 \text{ meV}$). Wie in Abbildung 1.10 wurde dabei die volle Halbwertsbreite des Gauß-Pulses von (a) 1 ps, (b) 2 ps, (c) 2.5 ps nach (d) 4.5 ps variiert. Die Daten entstammen den selben Rechnungen, die auch schon Abbildung 1.10 zugrunde liegen.

Gleichgewichtsverteilungen.

In homogenen Systemen können diese Dephasierungs- und Relaxationsmechanismen auf einer mikroskopischen Ebene behandelt werden [56, 72]. Für räumlich inhomogene Situationen ist eine mikroskopische Beschreibung dieser Prozesse sehr aufwendig. Die Auswertung von Coulomb-Streutermen ist für ein ungeordnetes System sehr zeitaufwendig und kann nur für sehr kleine Systeme durchgeführt werden [140]. Für das hier vorliegende inhomogene System ist eine mikroskopische Behandlung der Dephasierung und Relaxation aufgrund der großen Einheitszelle nicht möglich. Daher sollen diese Prozesse auf einer phänomenologischen Basis behandelt werden. Dafür soll, wie in Abschnitt 1.5.2 eingeführt, der nicht radiative Zerfall über die Einführung einer Dephasierungszeit T_2^* und die Relaxation in das Quasi-Gleichgewicht über eine Relaxationszeit T_1 beschrieben werden.

Mit Hilfe der in Abschnitt 1.5.1 eingeführten Einteilchen-Eigenfunktionen und der zugehörigen Eigenenergien lassen sich über die Formeln (1.96) die Quasi-Gleichgewichtsdichten bestimmen. Diese sind in Abbildung 1.12 für kleine mittlere Dichten $n_0 = 0.001/a_B$ bei einer Temperatur von $T = 50 \text{ K}$ dargestellt. Da die thermische Energie mit $k_B T \simeq 1 E_B$ kleiner als die Tiefe des Einteilchen-Potentials $\delta V(r_1, r_1)/2$ von ca. $2E_B$ ist, sind die Teilchen stark in den Bereichen der Potentialmulde unterhalb der dielektrischen Rippen konzentriert. Dieser Effekt ist für Löcher (schwarz) aufgrund der größeren Masse stärker ausgeprägt als für Elektronen (rot).

Die räumliche und zeitliche Entwicklung der Elektrondichten unter Einbeziehung der phänomenologischen Dephasierungs- und Relaxationsprozesse ist in Abbildung 1.13 dargestellt. Dafür wurden dieselben Strukturparameter und Anregungsbedingungen wie in Abbildung 1.8 gewählt. Die Rechnungen unterschieden sich nur durch die Einbindung inkohärenter Prozesse durch die Relaxations- und Dephasierungszeiten $T_1 = T_2^* = 6 \text{ ps}$. Dabei wurde angenommen,

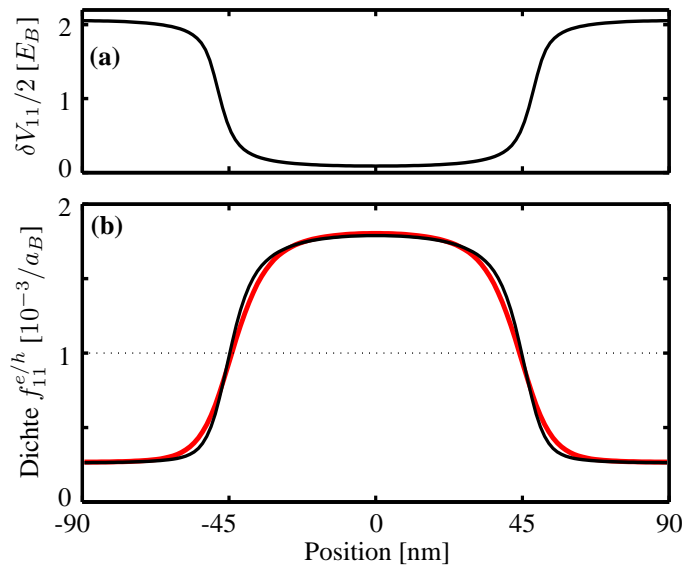


Abbildung 1.12: (a) Einteilchen-Potential $\delta V_{11}/2$ und (b) zugehörige Quasi-Gleichgewichtsdichten $f_{11}^{e/h,qe}$ für Elektronen (rot) und Löcher (schwarz). Die Rechnungen wurden für eine Temperatur von $T = 50$ K bei einer mittleren Ladungsdichte von $n_0 = 0.001/a_B$ (gepunktet) durchgeführt. Die Rippenbreite der Struktur 1.4 beträgt erneut $W = 90$ nm.

dass die optische Anregung der exzitonischen Übergänge mit Lichtfeldern schwacher Intensität vorgenommen wird. Kurz nach der Anregung zeigt die Wellenpaket-Dynamik in Abbildung 1.13 dieselben Signaturen wie in Abbildung 1.8. Durch die Dephasierungs- und Relaxationsmechanismen wird die Wellenpaket-Dynamik mit zunehmender Zeit immer mehr gedämpft und relaxiert nach einiger Zeit ($t \gg T_1, T_2^*$) gegen die in Abbildung 1.12 gezeigten Gleichgewichtsverteilungen, die hauptsächlich unterhalb der dielektrischen Rippen konzentriert sind. Wie unterschiedlich die erzeugten Verteilungen auch direkt nach der Anregung sein mögen, im Langzeitlimites relaxieren sie alle gegen dieselben Fermi-Dirac-Verteilungen. Dieses Verhalten macht diese Strukturen interessant für Laseranwendungen. Durch diese selbstorganisierte Umverteilung der Dichten innerhalb der Quantendrähte, könnte es in den Bereichen mit erhöhter Ladungsträgerdichte früher zu Inversion kommen. Damit würde die Laserschwelle niedriger liegen als in einem vergleichbaren räumlich homogenen System mit identischer mittlerer Teilchendichte n_0 [95, 113]. Dies soll im folgenden Abschnitt gezeigt werden.

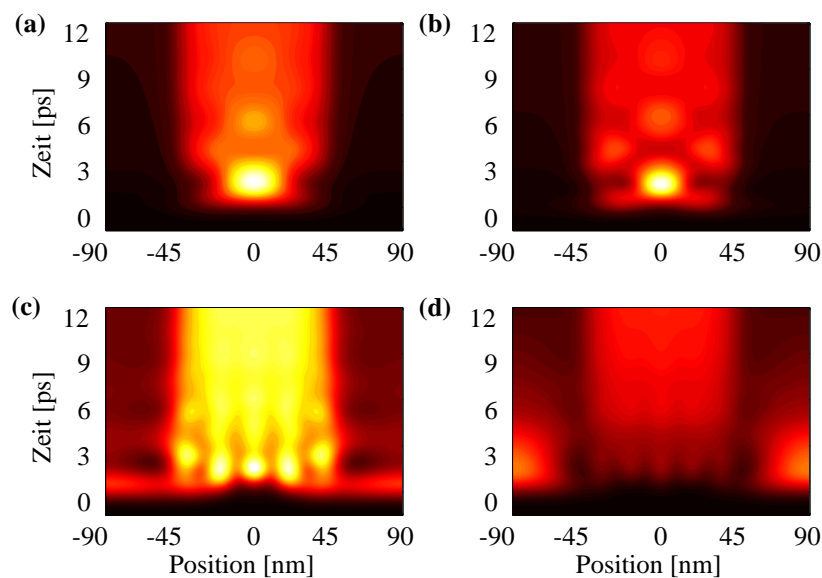


Abbildung 1.13: Konturdiagramm der zeitlichen und räumlichen Dynamik der Elektronendichten $f_{11}^{e(2)} = (f_{11}^{e(2),coh} + f_{11}^{e(2),incoh})$ aus Gleichung (1.98) und (1.102) entlang einer Quantendraht-Einheitszelle. Das einlaufende Lichtfeld hat eine Gauß'sche Einhüllende mit einer vollen Halbwertsbreite von 2 ps . Die Zentralfrequenz ω_L wurde resonant zu jeweils einem der vier untersten symmetrischen exzitonischen Zustände gewählt: (a) $\omega_L = E_G - 4.05\text{ meV}$, (b) $\omega_L = E_G - 3.83\text{ meV}$, (c) $\omega_L = E_G - 3.46\text{ meV}$, (d) $\omega_L = E_G - 3.16\text{ meV}$. Für den photonische Kristall werden die Parameter aus Abbildung 1.4 mit $W = 90\text{ nm}$ als Rippenbreite verwendet. In den Rechnungen wurden nicht-radiative Dephasierungsprozesse und ein Thermalisieren der Elektronen über phänomenologische T_2^* - und T_1 -Zeiten mit $T_2^* = T_1 = 6\text{ ps}$ realisiert. Als Temperatur wurde $T = 50\text{ K}$ angesetzt. In dem Konturdiagramm steht Weiß für die maximale und Schwarz für die minimale Dichte.

1.7 Räumlich inhomogener Halbleiter-Gain in photonischen Kristallstrukturen [113]

Anmerkung: Die in diesem Abschnitt gezeigten numerischen Ergebnisse sind der Referenz [113] *”Spatially inhomogeneous optical gain in semiconductor photonic-crystal structures”* entnommen, in der die hier gezeigten Resultate schon publiziert worden sind. Änderungen in der Farbwahl und der Achsenbeschriftung sind vorbehalten.

Photonische Kristalle bieten zahlreiche Möglichkeiten, die bei der Entwicklung oder Optimierung von optoelektronischen Bauelementen eingesetzt werden können. Dafür wurden in den letzten Jahren einige Experimente an Kombinationen von Halbleitern und photonischen Kristallen durchgeführt [77, 14, 38, 118]. Dabei wurden insbesondere auf photonischen Kristallen basierende Lasersysteme mit Halbleitern als aktives Material untersucht [105, 62, 104, 61, 101, 128, 82, 76, 119]. Diese Forschungsgebiete erfordern eindeutig die Optimierung und Erforschung der transversalen Eigenschaften der photonischen Kristallstrukturen. Neben Modifikation der transversalen Felder werden auch die longitudinalen Anteile des elektromagnetischen Feldes, d.h. die Coulomb-Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen, im photonischen Kristall beeinflusst [135, 35, 34]. Daher weisen solche Strukturen nicht nur veränderte Propagationseigenschaften für Lichtwellen, sondern auch andere intrinsische Eigenschaften für in solche Strukturen integrierte optisch aktive Materialien auf. Die räumlich mit der Kristallperiode variierende Coulomb-Wechselwirkung führt dabei unter anderem zu einer periodisch modulierten Halbleiter-Bandlücke und einer ortsabhängigen exzitonischen Bindungsenergie [106, 35, 34].

Im Folgenden sollen mit Hilfe der in den vorangegangenen Abschnitten 1.2–1.4 hergeleiteten Theorie die gekoppelte Dynamik der transversalen und longitudinalen Felder selbstkonsistent zusammen mit den optisch erzeugten Halbleiter-Kohärenzen gelöst werden. Als Halbleiter sollen dabei Quantendrähte anstelle von Quantenfilmen verwendet werden, um die numerische Komplexität des räumlich inhomogenen Problems zu reduzieren. Die optischen Eigenschaften wie die Lage der exzitonischen Resonanzen wurden so gewählt, dass diese weitestgehend denen in vergleichbaren Quantenfilm-Strukturen entsprechen. Bei der Untersuchung linearer Absorptionsspektren erzielt man damit qualitativ vergleichbare Ergebnisse. Die wesentlichen physikalischen Effekte sollten sich daher auch mit dem eindimensionalen Modellsystem untersuchen lassen.

Im Gegensatz zu den Untersuchungen des vorigen Abschnitts, in dem die Dynamik der inhomogenen Elektron- und Lochdichten untersucht worden ist, wird im Folgenden mit statischen Quasi-Gleichgewichtsdichten gearbeitet. Mit diesem Ansatz soll die dichteabhängige Absorption des Halbleiter-Materials untersucht werden. Dabei soll zunächst das verwendete Modellsystem eingeführt und dessen lineare optische Eigenschaften charakterisiert werden. Mit den dabei gewonnenen Erkenntnissen sollen dann analog zu den Rechnungen des vorherigen Abschnitts Quasi-Gleichgewichtsdichten berechnet und damit die Polarisationsgleichung (1.90) numerisch ausgewertet werden. Bei den numerischen Simulationen wird die in Abschnitt 1.3 eingeführte FDTD-Methode verwendet. Die Transmissions-, Reflexions- und Absorptionsspektren lassen sich nach den Methoden aus dem Exkurs über die numerische Messung 1.3.5 berechnen.

1.7.1 Vorstellung des verwendeten Modellsystems

Für die nachfolgenden Untersuchungen wurde als Modellsystem eine periodische Anordnung von dünnen GaAs-Quantendrähten gewählt, die sich im Abstand $S = 0.2 a_B$ unterhalb einer zweidimensionalen photonischen Kristallstruktur befinden. Hierbei ist $a_B \simeq 13 \text{ nm}$ der ex-

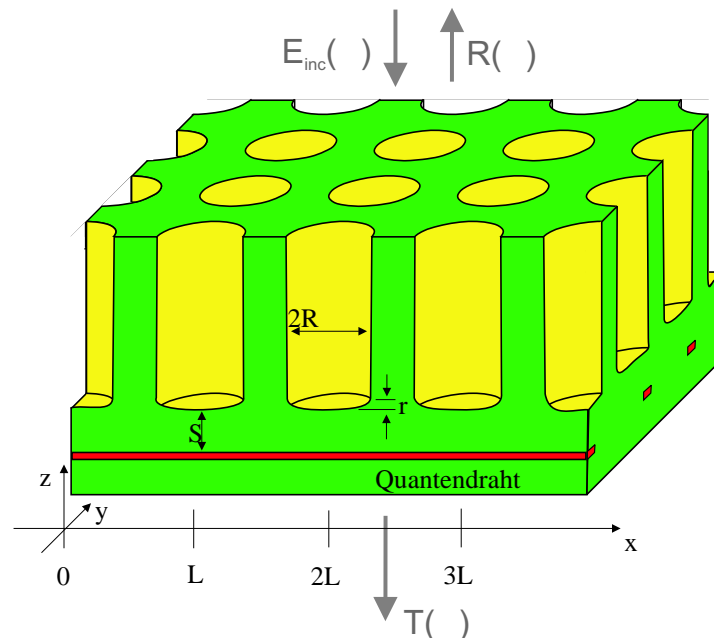


Abbildung 1.14: Parallele Anordnung von Quantendrähten im Abstand $S = 0.2 a_B$ unterhalb eines photonischen Kristalls. Dieser besteht aus in ein dielektrisches Material ($\epsilon = 13.1$) eingetätzten Luftzylindern ($\epsilon = 1$) mit Radius R . Die Zylinder sind quadratisch angeordnet, wobei die Kanten mit einem Radius $r = 0.5 a_B$ abgerundet worden sind. Die Quantendrähte verlaufen in z -Richtung mittig unterhalb der Zylinder, d.h. sie schneiden die Verlängerung der Zylinderachsen, und haben folglich in y -Richtung die Kristallperiode $L = 9.6 a_B$ als Abstand. Das einlaufende Lichtfeld wird oberhalb der Struktur eingekoppelt. Zur Bestimmung von Absorptionsspektren wird die Transmission und Reflexion "gemessen". Die Längeneinheit ist der 3D-Bohr-Radius eines Exzitons in GaAs $a_B \simeq 13 \text{ nm}$.

zitonische Bohr-Radius des dreidimensionalen GaAs-Exzitons. Der photonische Kristall besteht aus einer quadratischen Anordnung von Luftzylindern mit Radius R , die in ein homogenes $Ga_x Al_{1-x} As$ -Medium eingetätzt worden sind. Bei einer Herstellung solcher photonischer Kristalle können keine scharfen Zylinderkanten erzeugt werden. Aus diesem Grund wurden die Kanten mit dem Radius $r = 0.5 a_b$ abgerundet. Zudem werden dadurch numerische Komplikationen vermieden, die durch unphysikalisch scharfe Kanten hervorgerufen würden. Die quadratische Einheitszelle des photonischen Kristalls hat eine Länge von $L = 9.6 a_B$. Diese Länge entspricht auch dem Abstand der parallel zueinander angeordneten Quantendrähte, die unterhalb des Kristalls in x -Richtung verlaufen und dabei die Verlängerung der Zylinderachsen schneiden. Zur Vereinfachung wurden in den numerischen Simulationen für den Halbleiter und die homogene $Ga_x Al_{1-x} As$ -Umgebung dieselbe dielektrische Konstante $\epsilon = 13.1$ verwendet. Für die Luftzylinder wurde $\epsilon = 1$ gewählt.

Die Halbleiter werden als ideale eindimensionale Systeme in Zwei-Band-Näherung behandelt. Die Divergenz der eindimensionalen Exziton-Bindungsenergie wurde durch die Verwendung

einer regularisierten Coulomb-Wechselwirkung

$$V_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 1/[\epsilon(\mathbf{r}')[|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + a_0]] \quad \text{mit } a_0 = 0.16 a_B \quad (1.105)$$

vermieden. Wie man Referenz [5] entnehmen kann, lassen sich die exzitonischen Resonanzen eindimensionaler Systeme durch die Einführung eines solchen Regularisierungsparameters in guter Übereinstimmung mit der vollen dreidimensionalen Rechnung beschreiben, solange der Radius der Quantendrähte kleiner als der exzitonische Bohr-Radius ist.

1.7.2 Lineare Absorptionsspektren der unangeregten Struktur

Bevor die eigentliche Analyse der dichteabhängigen Absorption vorgenommen werden kann, sollen zunächst die exzitonischen Eigenschaften der in den photonischen Kristall eingebetteten Halbleiterstruktur über lineare Absorptionsspektren untersucht werden. Zur Betonung der Exzitonresonanz wird dabei der Grenzfall niedriger Dichten $n_0 = \int dr_1 f_{11}^{e/h,eq} = 0$ betrachtet. In diesem Fall kann anstelle der vollen Interband-Gleichung (1.90) die Kohärenz erster Ordnung (1.93) betrachtet werden. Der nicht radiative Zerfall wird dabei wiederum über die Einführung einer phänomenologischen Zerfallszeit T_2^* geregelt. Diese wird im Folgenden so gewählt, dass die Absorptionsspektren eine homogene Verbreiterung von 1.3 meV aufweisen. Die in Abbildung 1.15 gezeigten Spektren weisen mit Ausnahme der beiden Grenzfälle bei Variation des Zylinderradius eine doppelpeakartige Exzitonresonanz auf. Hierbei markiert die exzitonische Resonanz H die spektrale Position im Grenzfall $R \rightarrow 0$, d.h. im Fall eines homogenen Mediums bzw. einer weit entfernten Grenzfläche. Dieser Wert liefert eine untere Schranke für die in der inhomogenen Struktur auftretenden exzitonischen Resonanzen. Analog markiert die Resonanz I die spektrale Position des Exzitons im Grenzfall $R \rightarrow \infty$. Dies entspricht einer ebenen Grenzfläche im Abstand S und bildet die obere Schranke für die exzitonischen Resonanzen. Die Differenz zwischen den Resonanzen H und I beträgt über 4 meV . Neben der Verschiebung zu höheren Energien weist der Halbraum-Fall $R \rightarrow \infty$ aufgrund der durch δV_{12} verstärkten Coulomb-Wechselwirkung V_{12} eine erhöhte Exziton-Bindungsenergie auf [134, 35]. Dies lässt sich an der Verschiebung der Kontinuums-kante von den 1.5 eV des homogenen Falls auf ca. 1.516 eV für den Halbraum-Fall ablesen.

Bei Variation des Zylinderradius zwischen den beiden Extremwerten nimmt der Anteil des homogenen Peaks H stetig ab, während der Anteil des Halbraum-Peaks I zunimmt. Für einen Radius von $R = 2.5 a_B$ sind beide Anteile gleich groß. Die physikalische Ursache der Doppelresonanz liegt im Auftreten der Coulomb-Selbstenergien unterhalb der Zylinder. Damit bildet sich ein Potentialtopf aus, der ein Minimum zwischen den Zylindern hat. Der homogene Peak wird dabei von exzitonischen Resonanzen getragen, die innerhalb dieses Potentialtopfs gebunden sind, der inhomogene Peak von den ungebundenen Zuständen, die unterhalb der Zylinder lokalisiert sind. Mit zunehmendem Radius wird dieser Potentialtopf immer schmaler, wodurch die Anzahl der gebundenen Zustände abnimmt. Dieses Verhalten sollte aus dem Lehrbuchbeispiel eines Teilchens, das sich in einem Kastenpotential endlicher Höhe befindet, bekannt sein. Wie in Referenz [107] bzw. schon in dieser Arbeit gezeigt wurde, wird die Resonanz durch mehrere räumlich inhomogene exzitonische Zustände mit unterschiedlicher Oszillatorstärke gebildet (vgl. Abbildung 1.6). Der Beitrag dieser Zustände lässt sich am besten im Spektrum für $R = 2.5 a_B$ sehen. Neben der aufgespaltenen Exzitonresonanz zeigen die Spektren auch eine räumlich inhomogene Kontinuums-kante.

Für die folgenden Untersuchungen wird ein Zylinderradius von $R = 2.65 a_B$ gewählt. In

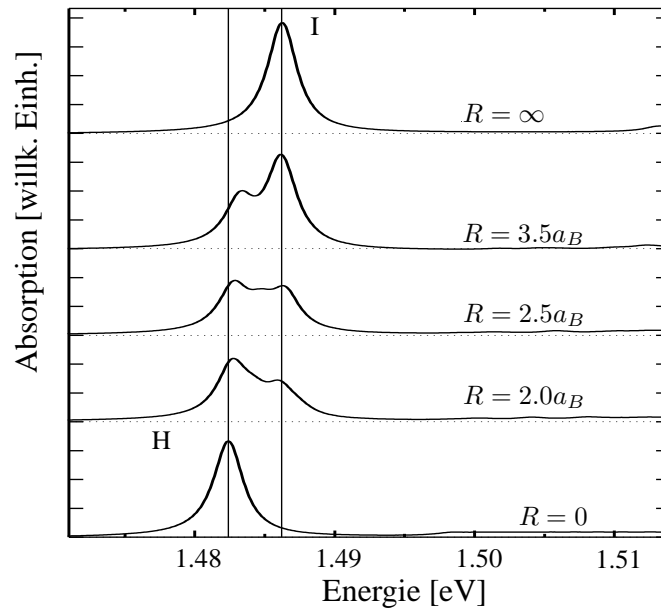


Abbildung 1.15: Lineare Absorptionsspektren für verschiedene Zylinderradien. Der Grenzfall $R = 0$ entspricht einer parallelen Anordnung von Quantendrähten in einem homogenen Medium (mit Exzitonresonanz H), der Grenzfall $R \rightarrow \infty$ einer parallelen Anordnung von Quantendrähten im Abstand S zu einer Ebenen Grenzfläche (mit Exzitonresonanz I). Die zu beiden Grenzfällen gehörenden $1s$ -Exzitonresonanzen bilden eine Art obere bzw. untere Schranke für die im Einteilchen-Potential gebundenen exzitonischen Zustände (siehe Abbildung 1.6 als vergleichbare Situation). Die exzitonischen Spektren weisen im Wesentlichen eine Doppel-Peak-Struktur auf, wobei die Höhe der beiden Anteile durch Variation des Zylinderradius mehr oder minder betont werden kann. Als Bandlücke des homogenen Materials wurde als $E_G = 1.5 \text{ eV}$ angesetzt. Durch Verwendung eines phänomenologischen Dephasierens sind die Resonanzen mit 1.3 meV (volle Halbwertsbreite) homogen verbreitert. Die Struktur-Parameter entnehme man Abbildung 1.14.

diesem Fall tragen die gebundenen und ungebundenen exzitonischen Zustände nahezu gleich stark zur Exzitonresonanz bei. Für diese Wahl sollten beide Anteile auch für höhere Dichten unterscheidbar bleiben.

1.7.3 Dichteabhängige Quasi-Gleichgewichtsspektren

Berechnet man die in Abschnitt 1.5.1 eingeführten Quasi-Gleichgewichtsdichten aus den elektronischen Eigenfunktionen und Eigenenergien, erhält man eine verstärkte Dichtekonzentration zwischen den Zylindern. Dieser Bereich entspricht dem Boden des Potentialtopfs, der durch die Coulomb-Selbstenergien $e^2\delta V_{11}/2$ der Elektronen und Löcher ausgebildet wird. Eine Darstellung des Potentials sowie einiger Elektron- und Loch-Gleichgewichtsdichten für verschiedene n_0 sind in Abbildung 1.16 dargestellt. Die bei der Berechnung der Gleichgewichtsdichten (1.96) benötigte Temperatur wurde auf $T = 50 \text{ K}$ festgesetzt. Da die zugehörige thermische Energie nur $k_B T = 4.3 \text{ meV}$ beträgt, fällt die Konzentration der Ladungsdichten stark aus. Für höhere Temperaturen sind die Übergänge zwischen den Hoch- und Niedrigdichte-Bereichen verbreitert. Aufgrund der größeren Masse sind die Löcher stärker in dem Potentialtopf gebunden als die Elektronen. Durch die räumliche Variation der Dichten sollte im Hochdichte-Bereich zwischen den Zylindern die Laserschwelle für niedrigere

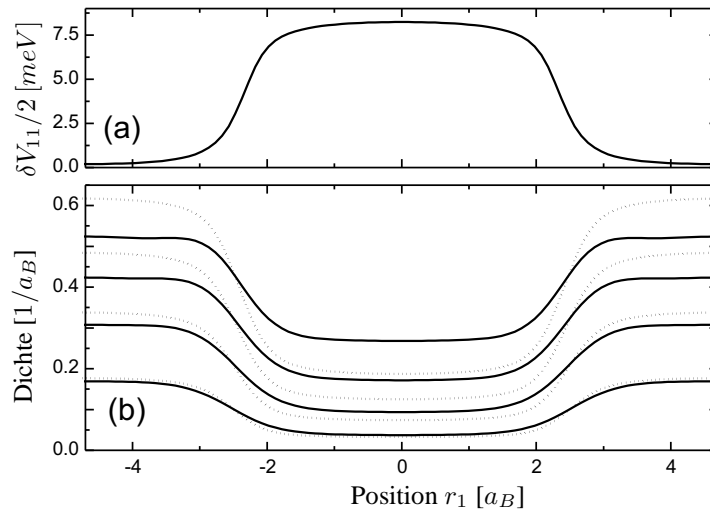


Abbildung 1.16: (a) Darstellung des Einteilchen-Potentials für einen Zylinderradius $R = 2.65 a_B$, (b) die dazu gehörenden Quasi-Gleichgewichtsdichten für Elektronen (durchgezogen) und Löcher (gepunktet) bei einer Temperatur von $T = 50$ K. Die mittleren Teilchendichten sind $n_0 = 0.1/a_B$, $n_0 = 0.2/a_B$, $n_0 = 0.3/a_B$ und $n_0 = 0.4/a_B$. Die Nullposition entspricht dem Schnittpunkt mit der Zylinderachse, d.h. die Ladungsdichten konzentrieren sich zwischen den Zylindern. Die sonstigen Struktur-Parameter entnehme man Abbildung 1.14.

mittlere Dichten n_0 erreicht werden als im Niedrigdichte-Bereich unterhalb der Zylinder. Mit Laserschwelle ist der Grenzwert gemeint, bei dem der Halbleiter von Absorption zu optischer Verstärkung übergeht. Aufgrund der Umverteilung der Dichten sollte dieser Grenzwert unterhalb der Laserschwelle liegen, die ein Halbleiter in einem homogenen Medium aufweisen würde. Dies soll im Folgenden gezeigt werden.

1.7.4 Reduzierung der Laserschwelle durch die Coulomb-Modifikationen

Zum Abschluss sollen mit den dichteabhängigen Gleichgewichtsspektren in Abbildung 1.17 die Hauptresultate des Kapitels 1.7 präsentiert werden. Diese zeigen mit zunehmender mittlerer Dichte den Übergang von optischer Absorption zu optischer Verstärkung. Dabei ist in Teilabbildung (a) die inhomogene Situation mit photonischem Kristall ($R = 2.65 a_B$) und in Teilabbildung (b) zum Vergleich die homogene Situation ($R \rightarrow 0$) gezeigt. Beide Fälle unterschieden sich erheblich. Aufgrund ihrer einfacheren Struktur soll zunächst der homogene Fall beschrieben werden.

Für niedrige Dichten zeigt das Spektrum die homogene Exzitonresonanz, die klar von der Kontinuumschwelle abgegrenzt ist. Mit zunehmender Dichte bleicht die exzitonische Resonanz aus, da der vorletzte Term von Gleichung (1.90)

$$- \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{E}_1 \delta_{12} - \mathbf{E}_1 f_{12}^e - \mathbf{E}_2 f_{21}^h)$$

für eine reduzierte Absorption sorgt. Gleichzeitig verschiebt das Kontinuum zu niedrigeren Energien. Bei einer Dichte von $n_0 = 0.26/a_B$ erreicht das Kontinuum die energetische Position der nicht mehr erkennbaren Exzitonresonanz. Für Dichten $n_0 \geq 0.3/a_B$ wechselt die

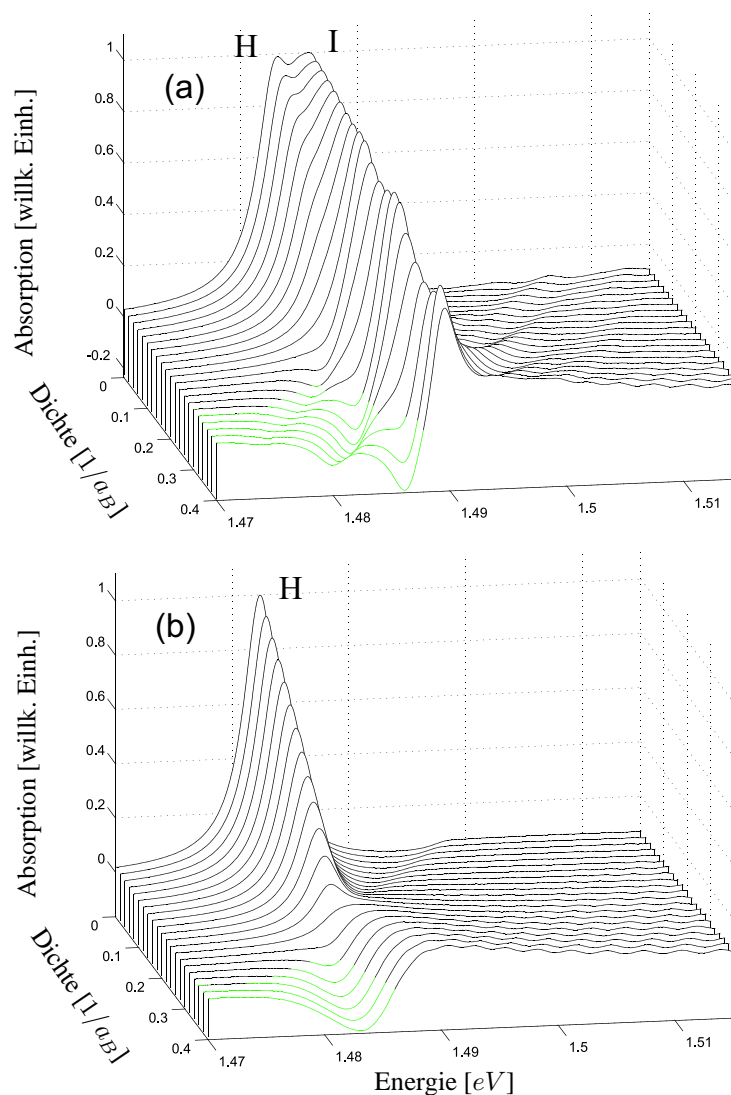


Abbildung 1.17: Absorptions- und Gain-Spektren für (a) die photonische Kristallstruktur mit Halbleiter-Quantendrähten aus Abbildung 1.14 mit Zylinderradius $R = 2.65 a_B$ und (b) eine parallele Anordnung von Quantendrähten unterhalb einer ebenen Grenzfläche. Der Abstand zur Grenzfläche sowie der zwischen den Quantendrähten in (b) entspricht der in (a) gewählten Konfiguration. Damit ist (b) der Grenzfall unendlich dünner Zylinder $R = 0$. Der Gain-Bereich (negative Absorption) ist in den Graphen grün markiert worden. In den Rechnungen wurde ein phänomenologisches Dephasieren verwendet, das zu einer homogenen Verbreiterung von 1.7 meV (volle Halbwertsbreite) führt.

Absorption unterhalb der Exzitonresonanz ihr Vorzeichen. Damit liegt anstelle der Absorption optischer Gewinn vor, d.h. das in den FDTD-Simulationen eingestrahlte Lichtfeld wird durch stimulierte Emission des stark invertierten Halbleiters verstärkt. Dieser Bereich ist in den Spektren grün markiert worden.

Die inhomogene Exzitonresonanz in (a) tritt für niedrige Dichten wieder als Doppelpeak auf. Zur Orientierung wurden beide Anteile wie schon in Abbildung 1.15 mit H und I gekennzeichnet. Diese Peaks zeigen mit zunehmender Dichte ein unterschiedliches Verhalten. Durch die erhöhte Dichte zwischen den Zylindern bleichen die inhomogenen exzitonischen Resonanzen,

deren Zustände in diesem Bereich lokalisiert sind, schneller aus als die Resonanzen, die zu Zuständen gehören, die im Niedrigdichte-Bereich unterhalb der Zylinder lokalisiert sind. Dies liegt an der räumlich inhomogenen Reduzierung der Absorption durch die Umverteilung der mittleren Dichte n_0 . Daher nimmt der H-Peak wesentlich schneller ab als der I-Peak. Durch die Umverteilung der Dichten tritt optische Verstärkung lokal in den Bereichen zwischen den Zylindern schon ab einer mittleren Dichte von $n_0 = 0.24/a_B$ auf. Damit liegt die Laserschwelle im Vergleich zum homogenen System 20 Prozent niedriger. Diese Verstärkung wird durch die im Potentialtopf gebundenen Resonanzen getragen. Die einzelnen Resonanzen sind innerhalb des Gain-Bereichs gut zu erkennen. Es sei hier explizit darauf hingewiesen, dass es sich dabei um einen lokalen Gain handelt. Die Niedrigdichte-Bereiche weisen für viel höhere Dichten eine noch klar erkennbare exzitonische Absorption auf, d.h. während zwischen den Zylindern eine lokale optische Verstärkung auftritt, absorbiert das Halbleiter-Material unterhalb der Zylinder noch. Die Coulomb-Modifikationen sorgen somit für eine Selbstorganisation der Teilchen, die zu lokal unterschiedlichem Absorptionsverhalten führt.

Die optischen Eigenschaften der Struktur sollten sich zusätzlich verbessern lassen, wenn durch geschicktes Design des photonischen Kristalls ein räumlicher Überlapp zwischen den relevanten photonischen Moden und den Hochdichtebereichen zwischen den Zylindern erreicht wird. Für die gewählte Struktur variiert das Feld entlang der Quantendrähte nur um ca. 10 Prozent. Zudem ist der räumliche Überlapp mit den Niedrigdichte-Bereichen größer als der mit den Hochdichte-Bereichen. Die hier untersuchte Struktur bedarf daher noch einiger Optimierung. Eine Feldlokalisierung sollte zudem eher für eine Propagation senkrecht zu den Zylindern des photonischen Kristalls zu erreichen sein. Die hier verwendete Propagation in z-Richtung parallel zu den Zylinderachsen nutzt die photonische Bandstruktur nur geringfügig aus, da die Struktur in dieser Richtung keine Periodizität aufweist (vgl. dazu Abbildung 1.14). Entsprechende Untersuchungen bieten zahlreiche Optimierungsmöglichkeiten. Man könnte dabei z.B. an die Kopplung an eine Mode der oberen oder unteren Bandkante einer photonischen Bandlücke denken. Solche Moden weisen eine verstärkte Licht-Materie-Wechselwirkung auf, wie in den Untersuchungen des folgenden Abschnitts 1.8 für ein eindimensionales photonisches System gezeigt wird. Die hier vorhergesagten Effekte sind allein aber schon interessant genug, dass sich eine experimentelle Überprüfung lohnen würde.

Damit sollen die Untersuchungen zu den longitudinalen Eigenschaften der photonischen Kristalle abgeschlossen werden. Die Untersuchungen des folgenden Abschnitts konzentrieren sich vollständig auf die transversalen Eigenschaften. Hierbei sollen die optischen Eigenschaften der Struktur durch resonante Ankopplung an geeignete Moden des photonischen Kristalls optimiert werden. Ein Ziel für zukünftige Untersuchungen sollte dennoch die Kombination beider Aspekte, der longitudinalen wie auch der transversalen, zur Optimierung von Halbleiterlasern sein.

1.8 Verstärkte Licht-Materie-Wechselwirkung an der unteren Bandkante eindimensionaler photonischer Kristalle [108]

Anmerkung: Die in diesem Abschnitt gezeigten numerischen Ergebnisse sind der Referenz [108] "Enhanced light-matter interaction in semiconductor heterostructures embedded in one-dimensional photonic crystals" entnommen, in der die hier gezeigten Resultate schon publiziert worden sind. Änderungen in der Farbwahl und der Achsenbeschriftung sind vorbehalten.

Es ist weitgehend bekannt, dass sich die optischen Eigenschaften (Bandlücken, exzitonische Resonanzen, etc.) von Halbleitern durch die Zusammensetzung der verwendeten Materialien beeinflussen lassen. Durch Reduzierung der effektiven Dimensionalität lässt sich zudem die Stärke der Kopplung zwischen dem elektrischen Feld und der exzitonischen Resonanz stark vergrößern und damit die Effektivität von opto-elektronischen Bauelementen steigern [24, 56, 123]. Alternativ lässt sich die Kopplung an das Lichtfeld auch durch eine geeignete Strukturierung der Halbleiter-Umgebung stark beeinflussen. Die Idee zur Herstellung photonischer Kristallstrukturen [150, 65] und deren Realisierung haben dabei in den letzten Jahrzehnten zahlreiche neuartige Möglichkeiten beim Design von opto-elektronischen Bauelementen eröffnet [64, 120, 129, 1, 21]. Photonische Kristalle bestehen aus einer periodischen Anordnung von Materialien mit verschiedener dielektrischer Konstante. Die Periode ist in der Größenordnung von optischen Wellenlängen, was analog zur Situation von Elektronen in Festkörpern zu einer photonischen Bandstruktur führt. Durch geschicktes Design lassen sich damit auch Materialien mit einer optischen Bandlücke herstellen. Bringt man in die photonische Kristallstruktur als aktives Material einen Halbleiter ein, so kann die Licht-Materie-Wechselwirkung durch die Eigenschaften des photonischen Kristalls signifikant beeinflusst werden [64, 120, 129, 1, 21]. So kann innerhalb einer photonischen Bandlücke die Licht-Materie-Wechselwirkung weitgehend unterdrückt bzw. durch Ankopplung an eine Lichtmode wesentlich verstärkt werden. Im Experimenten wurden im Wesentlichen Systeme mit Halbleiter-Quantenfilmen untersucht [77, 14, 38, 118]. Insbesondere wurden verstärkt Kombinationen aus Halbleitern und photonischen Kristallen zur Realisierung effizienter Laser verwendet [105, 62, 61, 101, 128, 82, 76].

In den vergangenen Jahren sind unter anderem auch Lichtpropagationseffekte an der photonischen Bandkante (**Photonic Band Edge**) von 1D photonischen Kristallen untersucht worden [28, 8, 138, 121, 73, 22, 31]. In diesem Zusammenhang fällt häufig das Schlagwort "slow light". Wie schon erwähnt, wird die Licht-Materie-Wechselwirkung innerhalb der optischen Bandlücke weitgehend unterdrückt. An der optischen Bandkante kann sie hingegen um einige Größenordnungen verstärkt werden. Referenz [8] liefert einige analytische Resultate zur Breite der Bandkanten-Resonanzen und deren Abhängigkeit von der Anzahl der Perioden.

In diesem Abschnitt sollen die Eigenschaften der Lichtmoden an der Bandkante genauer untersucht und verschiedene Aspekte der Wechselwirkung dieser Moden mit einem Halbleiter beleuchtet werden. Insbesondere soll gezeigt werden, wie sich die optischen Eigenschaften von so genannten **Vertical Surface Emitting Lasern** (VCSEL) mit Hilfe dieser "Bandkanten"-Effekte verbessern lassen. Im Gegensatz zu den bisherigen Veröffentlichungen soll dabei der Halbleiter mit einem mikroskopischen Modell beschrieben und die Licht-Materie-Wechselwirkung vollkommen selbstkonsistent über die **Maxwell Semiconductor Bloch Equations** (MSBE) [56, 24, 123] berücksichtigt werden. Die numerische Komplexi-

tät des Problems ist im Vergleich zu den in den vorigen Abschnitten beschriebenen beiden Systemen mit Coulomb-Inhomogenitäten wesentlich geringer, da die Halbleiter im vorliegenden Fall räumlich homogen sind. Damit kann die Schwerpunktsbewegung separiert werden. Dadurch ist man auch nicht mehr an die Ortsdarstellung der SBE gebunden, sondern kann die Gleichungen unter Ausnutzung der Homogenität in der \mathbf{k} -Raum-Darstellung lösen. Bei der Untersuchung der "slow-light"-Moden soll zunächst die reine PBE-Struktur betrachtet und die für diese Arbeit relevanten physikalischen Effekte gezeigt werden. Mit den dabei erworbenen Kenntnissen soll dann das Design eines PBE-VCSELs vorgeschlagen und gezeigt werden, wie man diesen durch gezielte Variation von Struktur-Parametern optimieren kann.

Die Studie kann auch als eine separate Erforschung der transversalen Eigenschaften, insbesondere der Bandkantenmoden, angesehen werden. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse sollten auch auf räumlich inhomogene Situationen übertragbar sein, in denen die longitudinalen Eigenschaften eine Rolle spielen. Damit bilden die im Folgenden gezeigten Ergebnisse zusammen mit denen aus den vorherigen beiden Abschnitten die Grundlage für mögliche zukünftige Untersuchungen, in denen sowohl die transversalen als auch die longitudinalen Eigenschaften ausgenutzt werden sollen.

1.8.1 Das mikroskopische Halbleiter-Modell

Wie schon in den vorigen beiden Abschnitten werden die Halbleiter-Bloch-Gleichungen simultan mit den Maxwell-Gleichungen gelöst

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} \left[\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \right], \quad (1.106)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (1.107)$$

und über das Transmissions- und Reflexionsspektrum die Licht-Materie-Wechselwirkung untersucht. Im Gegensatz zu den inhomogenen Systemen ist die Struktur und damit auch der Halbleiter in den Ebenen senkrecht zur Propagationsrichtung homogen. Damit kann für alle mikroskopischen Halbleiter-Polarisationen und -Dichten die \mathbf{k} -Darstellung verwendet werden. Die Confinement-Funktionen des Quantenfilms werden dabei als Delta-Distributionen genähert. Damit hat die in den Maxwell-Gleichungen verwendete makroskopische Polarisation folgende Form:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{d}_{cv} \sum_{n, \mathbf{k}} p_{n, \mathbf{k}}(t) \delta(z - z_n), \quad (1.108)$$

Hierbei ist $p_{n, \mathbf{k}}$ der Erwartungswert der Interband-Polarisation $p_{n, \mathbf{k}} = \langle d_{n, -\mathbf{k}} c_{n, \mathbf{k}} \rangle$, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ der Wellenvektor in der Quantenfilm-Ebene und z_n die Position des n -ten Quantenfilms. Die Bewegungsgleichungen der Inter- und Intrabandgrößen werden mit Hilfe des Heisenberg-Formalismus $-i\hbar \langle A \rangle = \langle [H, A] \rangle$ aufgestellt. Dabei wird im Hamilton-Operator der Bandstruktur-Anteil, die Licht-Materie- und die Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigt. Phononische Effekte werden vernachlässigt. Für die Bandstruktur wird näherungsweise ein Zwei-Band-System mit parabolischen Bändern und effektiven Elektron- und Loch-Massen verwendet, die Licht-Materie-Wechselwirkung wird in Dipol-Näherung betrachtet und das Hierarchie-Problem mit der Coulomb-Wechselwirkung mit Hilfe der Hartree-Fock-Näherung

auf niedrigster Ebene gekappt. Die Interband-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{n,\mathbf{k}} = (\omega_{n,\mathbf{k}}^e + \omega_{n,\mathbf{k}}^h) p_{n,\mathbf{k}} + \Omega_{n,\mathbf{k}} (f_{n,\mathbf{k}}^e + f_{n,-\mathbf{k}}^h - 1) + i\hbar \left. \frac{\partial p_{n,\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{incoh}, \quad (1.109)$$

hat damit dieselbe Form wie ihr Analogon in den optischen Bloch-Gleichungen, wenn man die Energien durch renormierte Energien

$$\omega_{n,\mathbf{k}}^e = \epsilon_{n,\mathbf{k}}^e - \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}^S f_{n,\mathbf{k}_1}^e + \frac{1}{2} \Delta\epsilon^S \quad (1.110)$$

$$\omega_{n,\mathbf{k}}^h = \epsilon_{n,\mathbf{k}}^h - \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}^S f_{n,\mathbf{k}_1}^h + \frac{1}{2} \Delta\epsilon^S \quad (1.111)$$

und die Rabi-Frequenzen durch verallgemeinerte Rabi-Frequenzen

$$\Omega_{n,\mathbf{k}} = \mathbf{d}_{cv} \cdot \mathbf{E}_n(t) + \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}^S p_{n,\mathbf{k}_1}, \quad (1.112)$$

$$(1.113)$$

ersetzt. Das Dipol-Matrixelement wird dabei \mathbf{k} -unabhängig gewählt. Eine Gleichung für die Elektron- und Loch-Dichten $f_{n,\mathbf{k}}^e = \langle c_{n,\mathbf{k}}^+ c_{n,\mathbf{k}} \rangle$ und $f_{n,\mathbf{k}}^h = \langle d_{n,\mathbf{k}}^+ d_{n,\mathbf{k}} \rangle$ wird nicht benötigt, da diese durch Quasi-Gleichgewichts-Fermi-Dirac-Verteilungen beschrieben werden sollen. Der Index 'S' am Coulomb-Potential soll verdeutlichen, dass anstelle des normalen ein mit Hilfe der Plasmon-Pol-Näherung abgeschirmtes Coulomb-Potential

$$V_{\mathbf{k}}^S = \frac{2\pi e^2}{\epsilon(\mathbf{k})L^2} \frac{1}{|\mathbf{k}|} \quad (1.114)$$

verwendet wird [56, 126, 55, 36]. Die Konstante $\Delta\epsilon^S = \sum_{\mathbf{k}_1} (V_{\mathbf{k}_1}^S - V_{\mathbf{k}_1})$ berücksichtigt dabei die Coulomb-Selbstenergie. Der letzte Term auf der rechten Seite von (1.109) berücksichtigt formal alle inkohärenten Terme höherer Ordnung. Dabei handelt es sich im Wesentlichen um Vielteilchen-Korrelation zwischen Elektron, Löchern und auch Phononen, die durch das Hierarchie-Problem der Coulomb- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung auftreten. Da die in diesem Abschnitt durchgeführten Untersuchungen keine experimentellen Ergebnisse reproduzieren, sondern vielmehr Grundlagenstudien sein sollen, wird der numerische Aufwand möglichst gering gehalten. Dabei werden inkohärenten Beiträge höherer Ordnung in einer phänomenologischen Dephasierungszeit T_2 zusammengefasst. Diese approximiert die nicht-radiativen Beiträgen zur homogenen Linienbreite $\gamma = \hbar/T_2$. Die radiativen Beiträge werden direkt durch das selbstkonsistente Lösen der MSBE berücksichtigt. Für die numerische Auswertung werden die MSBE (1.106) für verschiedene Quasi-Gleichgewichtsdichten $n = \sum_{n,\mathbf{k}} f_{n,\mathbf{k}}^e = \sum_{n,\mathbf{k}} f_{n,\mathbf{k}}^h$ und verschiedene 1D photonische Kristallstrukturen selbstkonsistent gelöst. Die Messung der Licht-Materie-Wechselwirkung erfolgt über das in Abschnitt 1.3.5 beschriebene Verfahren.

1.8.2 Slow-Light-Propagation in der PBE-Struktur

Für die Untersuchung der Licht-Materie-Wechselwirkung an der optischen Bandkante wird zunächst ein einfaches Modellsystem gewählt. Dafür wird ein $Ga_{1-x}In_xAs$ -Quantenfilm in

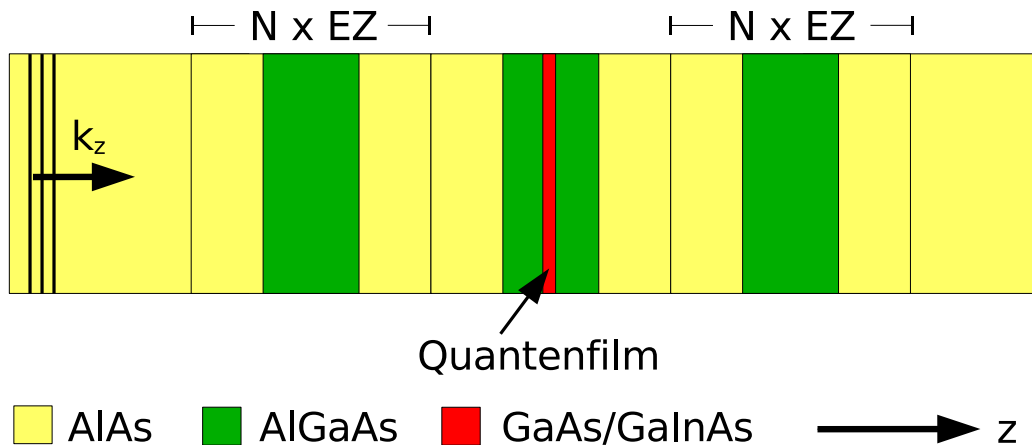


Abbildung 1.18: Schematische Darstellung des 1D photonischen Kristalls (Bragg-Struktur) mit $2N + 1$ Einheitszellen und einem Quantenfilm in der mittleren Zelle. Die Bragg-Schichten bestehen aus $Al_{0,1}Ga_{0,9}As$ und $AlAs$, der Quantenfilm aus $Ga_xIn_{1-x}As$. Das einlaufende elektrische Feld ist linear in y -Richtung polarisiert und propagiert als ebene Welle in z -Richtung.

die Mitte einer 1D Bragg-Struktur eingebracht. Die Bragg-Struktur besteht aus einer abwechselnden Anordnung von $AlAs$ - und $Al_{0,1}Ga_{0,9}As$ -Schichten. Die Schichtdicken entsprechen dem Viertel der Wellenlänge der Zentralfrequenz E_L/\hbar der photonischen Bandlücke, d.h. $d_L = \lambda_L/4 = hc/(4E_L\sqrt{\epsilon})$. Der Quantenfilm befindet sich in der mittleren $Al_{0,1}Ga_{0,9}As$ -Schicht. Um die Anordnung symmetrisch zu halten, wird eine ungerade Anzahl ($2N+1$) von Einheitszellen verwendet (vgl. Abbildung 1.18). Zur Vereinfachung wird für die $Al_{0,1}Ga_{0,9}As$ -Schicht und den Quantenfilm dieselbe dielektrische Konstante $\epsilon = 13$ verwendet. Aufgrund des verschwindend geringen dielektrischen Kontrastes müssen auch keine Spiegelladungseffekte berücksichtigt werden. Für die $AlAs$ -Schicht wird $\epsilon = 8.7$ als Materialwert verwendet. Um unnötig große Zahlen zu vermeiden, wird die Energieachse um die Zimmertemperatur-Bandlücke von $GaAs$ verschoben, d.h. der Wert 0 entspricht $E_G^0 = 1.42 eV$. Durch Variation der Indium-Beimischung und der Quantenfilm-Dicke lässt sich die Bandlücke in einem begrenzten spektralen Bereich verschieben. Die physikalische Ursache liegt in der mit $E_G(InAs, T = 300 K) \simeq 0.42 eV$ im Vergleich zu $GaAs$ niedrigeren Bandlücke von $InAs$. Damit wird nicht nur die Bandlücke geringer, sondern auch das Confinement-Potential tiefer. Genauere Details dazu findet man im Kapitel über die Ladungs- und Spinströme im Zusammenhang mit der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Störungsrechnung. Diese Verschiebung $\Delta E_G = E_G^{QW} - E_G^0$ der Bandlücke wird im Folgenden als Detuning bezeichnet und als Optimierungsparameter verwendet, durch Variation dessen die Kristall-Moden und die Halbleiter-Resonanzen zum Überlapp gebracht werden können. Im Folgenden wird ΔE_G immer positiv und kleiner als $45 meV$ sein, um zu garantieren, dass die Bandlücke hinreichend kleiner als die vom $Al_{0,1}Ga_{0,9}As$ -Barrieren-Material und damit das Confinement-Potential des Halbleiters tief genug ist.

Bevor die Wechselwirkung des Lichtfelds mit dem Halbleiter untersucht wird, soll zunächst die reine Bragg-Struktur charakterisiert werden. Dafür wurde die Transmission und die Reflexion dieser Struktur bestimmt. Zudem wurde durch Variation der Anzahl der Einheitszellen die Abhängigkeit der photonischen Bandstruktur von der Länge der Bragg-Struktur bestimmt. Die Abbildung 1.19 zeigt die Transmission und Reflexion in der Nähe der unteren Bandkante

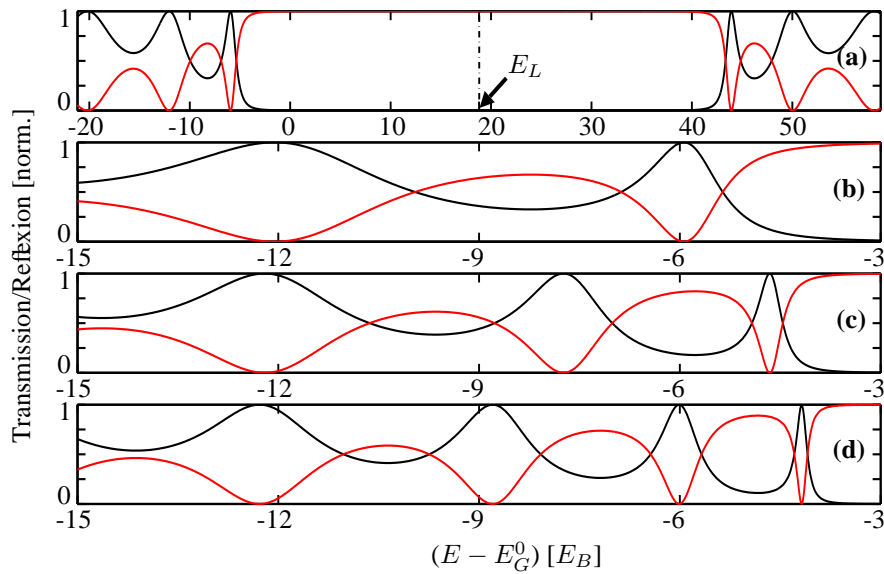


Abbildung 1.19: Transmission T (schwarz) und Reflexion (rot) normiert auf das eingekoppelte Lichtfeld für (a) und (b) 33, (c) 49 und (d) 65 Einheitszellen. Der photonische Kristall ist eine 1D Bragg-Struktur. Wie man (a) entnehmen kann, liegt die Mitte der photonischen Bandlücke bei $E_L = 1.5 \text{ eV}$. In (b)-(d) ist eine Vergrößerung der unteren photonischen Bandkante dargestellt. Die Energieachse wurde um die Gap-Energie E_G^0 von GaAs verschoben, d.h. der Wert 0 entspricht $E = E_G^0$. Als Energie-Einheit wurde für die 3D Exziton-Bindungsenergie $E_B \simeq 4.25 \text{ meV}$ von GaAs gewählt. Mit zunehmender Anzahl von Einheitszellen werden die Transmissionsmaxima ($T=1$) oberhalb und unterhalb der Bandlücke schmaler und rücken näher an die Bandkante.

einer Bragg-Struktur mit (b) 33, (c) 49 und (d) 65 Einheitszellen, die Teilfigur (a) die volle Bandlücke der Struktur mit 33 Einheitszellen. Die Zentralfrequenz aller Strukturen liegt bei $E_L = 1.5 \text{ eV}$. Die Transmission zeigt oberhalb und unterhalb der Bandlücke eine Ansammlung von diskreten Lichtmoden, deren Breite abnimmt, je näher sie an der Bandkante liegen. Mit zunehmender Anzahl von Bragg-Schichten rücken diese Transmissions-Linien näher an die Bandkanten. Dabei nimmt der Abstand zwischen den einzelnen Moden und gleichzeitig deren Breite ab. Durch das Auftreten der einzelnen Moden wirkt der photonische Kristall als eine Art Spektralfilter. Ein Halbleiter sollte daher besonders effektiv an das Lichtfeld koppeln, wenn die energetische Position der Halbleiter-Resonanzen mit der Position einer geeigneten Mode übereinstimmt. Dabei ist zu beachten, dass neben dem energetischen auch ein räumlicher Überlapp der Eigenfunktion der Mode und der Confinement-Funktion des Halbleiters vorliegen muss. Doch dazu später mehr.

Die folgenden Untersuchungen beschränken sich auf die Moden der unteren Bandkante. Diese werden im Folgenden zur Unterscheidung mit I, II, ... gekennzeichnet beginnend mit der Mode, die der unteren Bandkante am nächsten ist. Als erste Anwendung soll in [Abbildung 1.20](#) die lineare Absorption eines Halbleiters gezeigt werden, der, wie in [Abbildung 1.18](#) dargestellt, in der Mitte der Bragg-Struktur mit 49 Einheitszellen ($N=24$) positioniert worden ist (blau). Die Zentralfrequenz der photonischen Bandlücke wurde auf $E_L = 1.54 \text{ eV}$ festgesetzt. Die Rechnungen wurden für tiefe Temperaturen und im Grenzfall verschwindend kleiner Dichten durchgeführt. Das Dipol-Matrixelement wird für alle numerischen Berechnungen auf $d_{cv} = 3.5 \text{ eÅ}$, das phänomenologische Dephasieren für niedrige Temperaturen auf

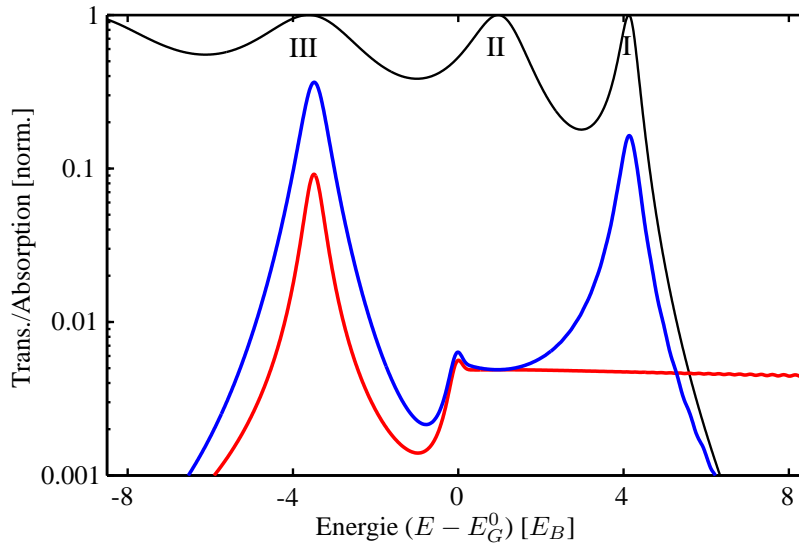


Abbildung 1.20: Logarithmische Darstellung der linearen Absorption für ein Detuning $\Delta E_G = 0.4 E_B$ für ein homogenes Medium (rot) bzw. eine Bragg-Struktur mit 49 Einheitszellen (blau). Die Mitte der Bandlücke der Bragg-Struktur liegt bei $E_L = 1.54 \text{ eV}$. Zum Vergleich ist auch die Transmission der Bragg-Struktur (schwarz) dargestellt. Als Halbleiter-Parameter wurden $d_{cv} = 3.5 \text{ eÅ}$ als Dipol-Matrixelement und $\gamma = 1 \text{ meV}$ als Dephasieren gewählt. Die ersten drei Licht-Moden unterhalb der Bandlücke sind für spätere Verweise mit I, II und III bezeichnet worden.

$\gamma = 1 \text{ meV}$ und für Zimmertemperatur auf $\gamma = 5 \text{ meV}$ festgesetzt. Die Halbleiter-Massen sind $m_c = 0.066 m_e$ und $m_h = 4 m_c$. Um den Einfluss mehrerer Moden zu berücksichtigen, wurde die exzitoniche Resonanz des Halbleiters durch ein Detuning von $\Delta E_G = 0.4 E_B$ in Resonanz zur Mode III der unteren Bandkante gebracht. Dabei ist die Energieeinheit $E_B \simeq 4.25 \text{ meV}$ die exzitoniche Bindungsenergie eines $GaAs$ -Volumenhalbleiters. Zum Vergleich ist auch das Absorptionsspektrum eines in ein homogenes $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Medium eingebetteten Halbleiters (rot) und die Transmission der Bragg-Struktur ohne Halbleiter (schwarz) dargestellt. Zudem wurde eine logarithmische Darstellung gewählt, um auch kleinere Details zu betonen. Die Spektren zeigen eine starke 1s- und eine schwache 2s-Exziton-Resonanz unterhalb sowie ein Kontinuum von Resonanzen oberhalb der Halbleiter-Bandlücke E_G . Durch die Ankopplung an die PBE-Mode III ist die 1s-Resonanz des in den photonischen Kristall eingebetteten Quantenfilms im Vergleich zu der in der homogenen Struktur um einen Faktor 4 verstärkt. Wesentlich drastischer fällt der Effekt an der Mode I aus, wo die Kontinuumsabsorption um nahezu zwei Größenordnungen verstärkt wird und vergleichbar mit der 1s-Exziton-Resonanz wird. Hingegen hat die Mode II keinen Einfluss auf die Absorption. Dies lässt darauf schließen, dass in diesem Fall kein räumlicher Überlapp zwischen der Lichtmoden- und der Confinement-Funktion des Halbleiters vorliegt (vgl. dazu Abbildung 1.25). Zudem wird die Kontinuumsabsorption innerhalb der Bandlücke fast vollständig unterdrückt.

Aufgrund der starken Ankopplung an die Licht-Mode I ist bei der Variation des Detunings ein Anticrossing der Mode und der 1s-Exziton-Resonanz zu erwarten. Zur Demonstration dieses Effekts wurden Absorptionsspektren einer Halbleiter-Bragg-Struktur mit $E_L = 1.52 \text{ eV}$ und 49 Einheitszellen für verschiedene Detunings ΔE_G aufgenommen und im Konturdiagramm 1.21 dargestellt. Wie in den Rechnungen zu Abbildung 1.20 wurden die Simulationen für tie-

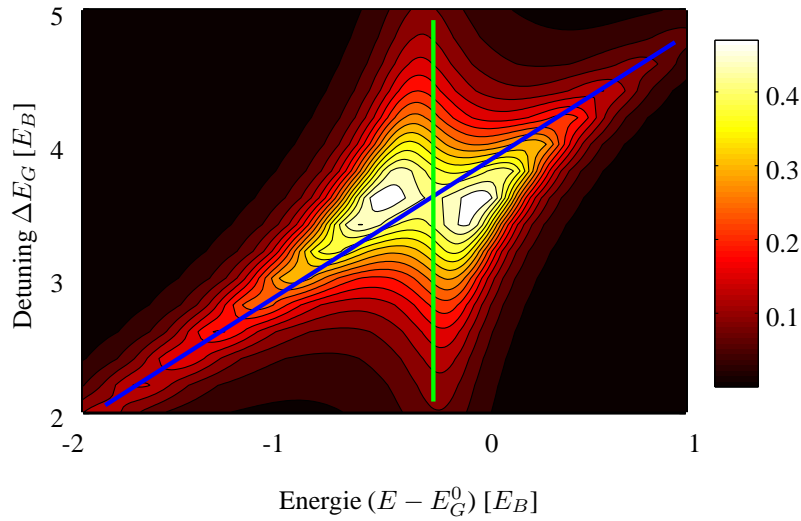


Abbildung 1.21: Lineare Absorption normiert auf das einlaufende Feld als eine Funktion des Detunings ΔE_G . Die Darstellung zeigt ein Anticrossing der Exziton-Resonanz und der ersten Transmissionslinie (I) der unteren Bandkante (vgl. Abbildung 1.20). Die Rechnungen wurden bei einer Temperatur von $T = 0 \text{ K}$ im Niedrig-Dichte-Grenzfall durchgeführt. Als Halbleiter-Parameter wurden $d_{cv} = 3.5 \text{ e\AA}$ als Dipol-Matrixelement und $\gamma = 1 \text{ meV}$ als Dephasierung gewählt. Für die Bragg-Struktur wurden 49 Einheitszellen verwendet, die Mitte der photonischen Bandlücke liegt bei 1.52 eV . Die blaue Linie gibt den groben Verlauf der Exziton Resonanz ohne die Wechselwirkung mit der Licht-Mode an, die grüne Linie die spektrale Position der Mode.

fe Temperaturen ($\gamma = 1 \text{ meV}$) und niedrige Dichten ($n \simeq 0$) durchgeführt. Verfolgt man im Konturdiagramm die blaue Linie, die die spektrale Position der Exziton-Resonanz ohne Licht-Materie-Wechselwirkung andeutet, sieht man, dass sich die Resonanz bei spektralem Überlapp mit der Licht-Mode (grüne Linie) in zwei Resonanzen aufspaltet. Dies lässt auf eine starke Wechselwirkung zwischen dem Halbleiter und dem photonischen System schließen. Verringert man künstlich die Kopplungsstärke durch Verwendung eines wesentlich kleineren Dipol-Matrixelements, verschwindet der Effekt fast vollständig.

Abbildung 1.22 zeigt Absorptionsspektren für Teilchendichten $n = 0.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (blau) und $n = 0.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (rot) sowie Gain-Spektren für $n = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (schwarz). Alle Rechnungen wurden bei Zimmertemperatur ($\Rightarrow \gamma = 5 \text{ meV}$) durchgeführt. Zudem wurden die Spektren auf das eingekoppelte Feld normiert. Die Teilabbildungen 1.22 (b)-(d) zeigen Ergebnisse für eine Bragg-Struktur mit 33, 49 und 65 Einheitszellen mit einer Zentralfrequenz $E_L = 1.5 \text{ eV}$. Dies entspricht der Situation in Abbildung 1.19. Die Halbleiter-Resonanzen wurden mit Hilfe des Detunings auf die spektrale Position der Mode I verschoben. Da sich die Resonanzen mit zunehmender Anzahl von Einheitszellen zu höheren Energien verschieben, wurden drei unterschiedliche Detunings verwendet, wobei die ausgewählten Werte auf maximalen Gain optimiert worden sind: (b) $\Delta E_G = 4.0 E_B$, (c) $\Delta E_G = 5.0 E_B$ und (d) $\Delta E_G = 6.0 E_B$. Neben der Änderung der spektralen Position wird mit zunehmender Anzahl von Einheitszellen auch die Breite der Moden geringer und damit auch die Breite des Gain-Peaks immer schmaler. Zum Vergleich zeigt Abbildung 1.22 (a) die Spektren für einen

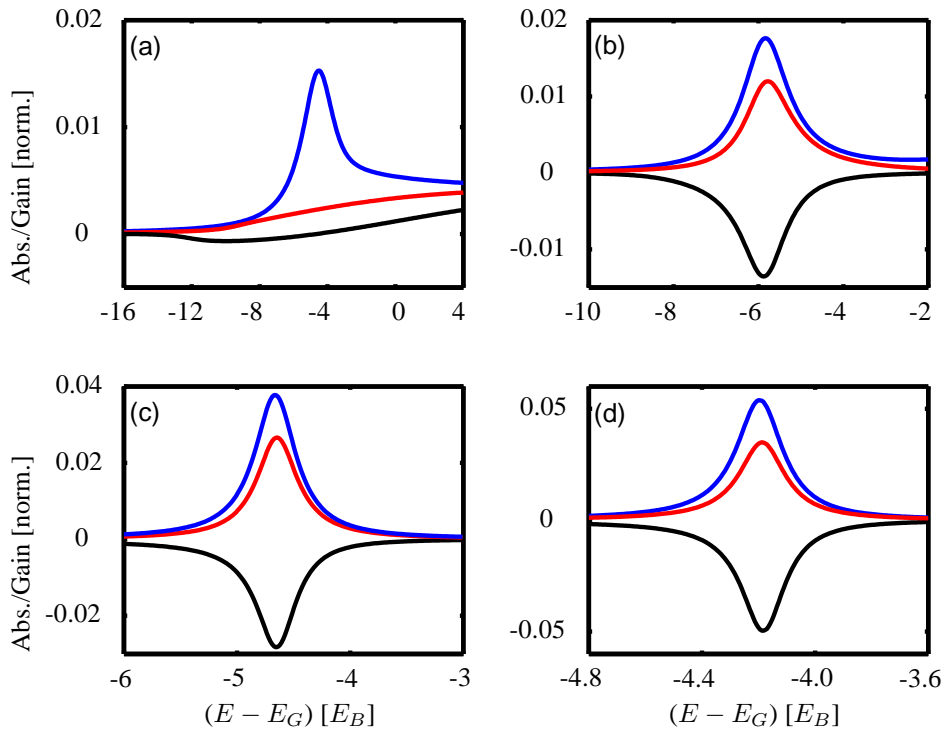


Abbildung 1.22: Absorptionsspektren bei einer Dichte von $n = 0.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (blau), $n = 0.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (rot), bzw. Gain-Spektrum bei $n = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (schwarz). Die Spektren wurden auf das einlaufende Feld normiert und zeigen: (a) ein homogenes System, (b) eine photonische Kristallstruktur mit 33 Einheitszellen und einem Detuning von $\Delta E_G = 4.0 E_B$, (c) eine mit 49 Einheitszellen und einem Detuning von $\Delta E_G = 5.0 E_B$ und (d) eine mit 65 Einheitszellen und einem Detuning von $\Delta E_G = 6.0 E_B$. Die Mitte der photonischen Bandlücke liegt in (b)-(d) bei $E_L = 1.5 \text{ eV}$. Mit Hilfe des Detunings wurde der Gain-Peak in Resonanz mit der ersten Transmissionslinie der unteren Bandkante (I) gebracht. Als Halbleiter-Parameter wurden $d_{cv} = 3.5 \text{ e\AA}$ als Dipol-Matrixelement und $\gamma = 5 \text{ meV}$ als Dephasieren gewählt. Alle Rechnungen wurden bei einer Temperatur von $T = 300 \text{ K}$ durchgeführt.

Quantenfilm in einem homogenen $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ -Medium. Die Spektren zeigen für niedrige Dichten noch wesentliche Merkmale der exzitonischen Resonanz. Mit zunehmender Dichte bleicht die Absorption aus und schlägt für einen bestimmten Schwellwert in der Nähe der Exziton-Resonanz in Verstärkung (Gain) um. Die Breite des Gain ist im homogenen Fall wesentlich größer als die homogene Linienbreite des Exzitons bei niedrigen Dichten, da auch das Kontinuum zum Gain beiträgt. Dies wird jedoch nur im homogenen System deutlich, da im photonischen System neben den intrinsischen Eigenschaften des Halbleiters (Laserschwelle, etc.), die durch die Licht-Materie-Wechselwirkung nicht beeinflusst werden können, auch das spektrale Profil der Mode einen Einfluss auf die Form des Spektrums hat. Frequenzanteile mit niedriger Transmission können nur schwach mit dem Halbleiter wechselwirken und dadurch nur geringfügig absorbiert bzw. verstärkt werden. Dagegen wird die Wechselwirkung mit Frequenzen, die hohe Transmissionskoeffizienten haben, wesentlich verstärkt. Damit spiegeln die Spektren der Bragg-Struktur im Wesentlichen das Moden-Profil wieder. Der Halbleiter bestimmt dagegen hauptsächlich das Vorzeichen des Spektrums und nur unwesentlich dessen Form. Dadurch ist die Breite der Absorptions- bzw. des Gain-Peaks der Bragg-

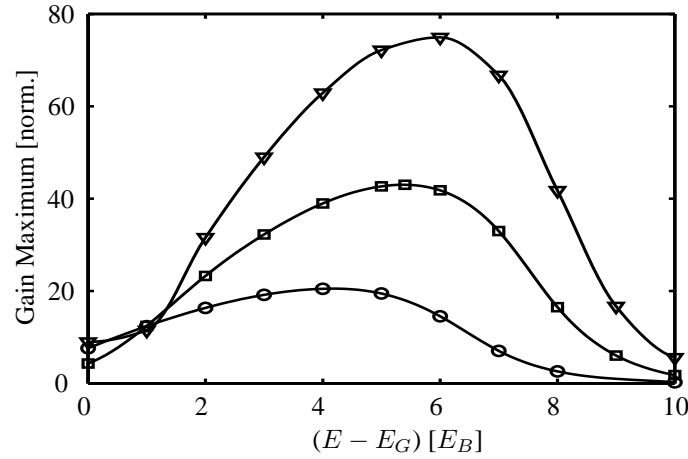


Abbildung 1.23: Gain-Maxima der Spektren eines in die Bragg-Struktur 1.18 eingebetteten Quantenfilms als Funktion des Detunings. Die dargestellten Graphen wurden auf das Gain-Maximum einer homogenen Halbleiter-Struktur normiert. Die Bragg-Struktur hat 33 (Kreis), 49 (Rechteck) oder 65 Einheitszellen (Dreieck), wobei die Symbole jeweils für berechnete Werte stehen. Die Mitte der photonischen Bandlücke liegt bei $E_L = 1.5 \text{ eV}$. Als Halbleiter-Parameter wurden eine Dichte $n = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, ein Dipol-Matrixelement $d_{cv} = 3.5 \text{ eÅ}$, ein Dephasieren $\gamma = 5 \text{ meV}$ und eine Temperatur $T = 300 \text{ K}$ angesetzt (vgl. Abbildung 1.22).

Strukturen als Moden-Eigenschaft im Wesentlichen unabhängig von der Halbleiter-Dichte. Ein Vergleich der Gain-Spektren zeigt, dass das Gain-Maximum superlinear mit der Zellenzahl zunimmt. Dafür wurde in Abbildung 1.23 der maximale Gain der Zimmertemperatur-Spektren zu $n = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ für verschiedene Detunings dargestellt. Die Abbildung zeigt zum einen, dass die in den Berechnungen zu Abbildung 1.22 gewählten Detunings für optimalen Gain sorgen, zum anderen wird bestätigt, dass die Verstärkung tatsächlich bei spektralem Überlapp mit der Mode I superlinear mit der Zellenzahl zunimmt. Bei Verdopplung der Zellen von 33 (Kreis) auf 65 (Dreieck) nimmt das Optimum um nahezu das Vierfache zu. Im Vergleich zum homogenen System wird das Gain-Maximum um fast zwei Größenordnungen gesteigert.

Ein kurzer theoretischer Einschub soll im Folgenden die physikalischen Hintergründe dieser Phänomene näher beleuchten. Mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen lässt sich zeigen, dass der Absorptionskoeffizient durch

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{I_0(\omega)} \frac{\omega}{\pi} \int d^3r \text{Im} [\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega)]. \quad (1.115)$$

gegeben ist. Da die Confinement-Funktionen des Halbleiters als Delta-Distributionen angesetzt worden sind, wird die Absorption durch die Feldstärke an der Position des Quantenfilms bestimmt. Im linearen Regime lässt sich die Polarisation zudem über ein Produkt aus elektrischem Feld und einer dichteabhängigen Halbleiter-Suszeptibilität darstellen:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_n \chi(\omega) \mathbf{E}_n(\omega) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (1.116)$$

Damit ist die Absorption proportional zur dieser Suszeptibilität und der lokalen Intensität des selbstkonsistenten elektrischen Felds:

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{I_0} \frac{\omega}{\pi} \sum_n \text{Im} [\chi(\omega)] |\mathbf{E}_n(\omega)|^2 \quad (1.117)$$

Damit nimmt die Absorption linear mit der lokalen Feldintensität zu. Die Normierung I_0 wird ausschließlich durch das eingekoppelte Feld bestimmt. Dadurch wird die Formel unabhängig von der gewählten Anregungsbedingung. Zudem soll darauf hingewiesen werden, dass die Suszeptibilität eine reine Halbleiter-Eigenschaft ist. Die Wechselwirkung von Licht und Materie schlägt sich nur in der lokalen Intensität des selbstkonsistenten Feldes nieder.

In guter Näherung sollte damit schon das lokale Feld der reinen Bragg-Struktur ohne Halbleiter einen guten Anhaltspunkt für die zu erwartende Verstärkung an verschiedenen Quantenfilm-Positionen liefern. Abbildung 1.24 zeigt den räumlichen und zeitlichen Verlauf

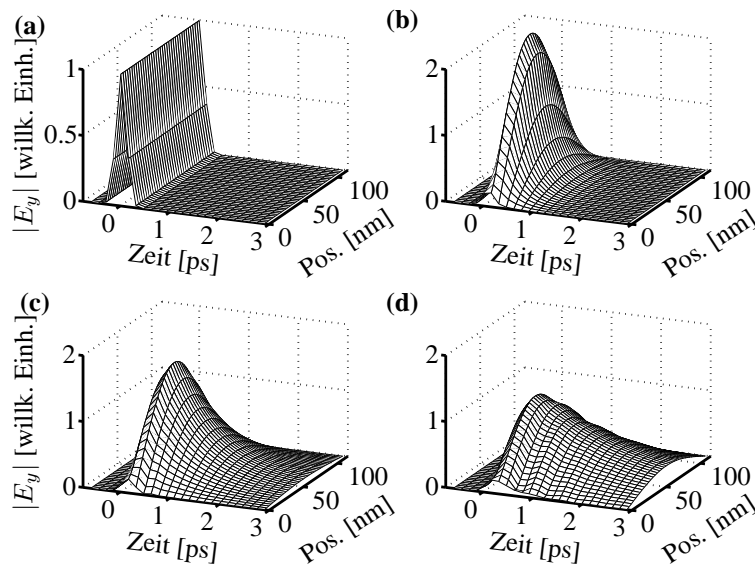


Abbildung 1.24: Zeitlicher und räumlicher Verlauf von $|E_y(z, t)|$ in der mittleren Einheitszelle (a) einer homogenen Struktur, der Bragg-Struktur 1.18 mit (b) 33, (c) 49 und (d) 65 Einheitszellen. Die Mitte der photonischen Bandlücke liegt in (b)-(d) bei $E_L = 1.5 \text{ eV}$. Das eingekoppelte E-Feld ist linear in y -Richtung polarisiert und propagiert als ebene Welle in z -Richtung. Die Gauß'sche Einhüllende des einlaufenden Feldes hat eine volle Halbwertsbreite von 0.25 ps und eine Zentralfrequenz, die jeweils resonant zum ersten Transmissions-Peak der unteren Bandkante (vgl. Peak I in Abbildung 1.20) gewählt worden ist.

des Betrags von $E_y(z, t)$ innerhalb der mittleren Einheitszelle einer Bragg-Struktur mit (b) 33, (c) 49 und (d) 65 Einheitszellen. Die Zentralfrequenz der optischen Bandlücke liegt bei $E_L = 1.5 \text{ eV}$. Damit entspricht das photonische System dem in Abbildung 1.19. Das eingekoppelte Lichtfeld wurde resonant zur Mode I gewählt und hat eine gaußförmige Einhüllende mit einer zeitlichen Halbwertsbreite von 0.25 ps (FWHM). Damit beschränkt man sich auf einen schmalen Frequenzbereich um die Mode I. Zum Vergleich zeigt (a) $|E_y(z, t)|$ innerhalb eines homogenen $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ -Mediums. Das Feld weist in der Bragg-Struktur eine räumliche Variation auf und hat am Rand der Zelle sein Minimum und in der Mitte sein Maximum. Zudem ändert sich der zeitliche Abfall von einem Gauß-artigen Verlauf im homogenen Fall zu einem mit zunehmender Zahl von Einheitszellen immer langsamer werdenden exponentiellen Abklingen. Dieser verlangsamte Abfall steht im engen Zusammenhang mit der erhöhten Lebensdauer der Mode in den Bragg-Strukturen. Je schmaler die Mode im Transmissionspektrum 1.19 ist, desto größer ist ihre Lebensdauer. Mit zunehmender Anzahl von Einheitszellen wird die effektive Wechselwirkungszeit zwischen der Mode und dem Halbleiter verlängert

und dadurch die Halbleiter-Absorption bzw. der Halbleiter-Gain verstärkt. Da in allen vier Simulationen dieselben Halbwertsbreiten für das einlaufende Feld verwendet worden sind, nimmt trotz der Verlängerung der Moden-Lebensdauer das Feld-Maximum mit zunehmender Zellenzahl ab. Dies liegt daran, dass mit abnehmender Moden-Breite immer größere Anteile des eingekoppelten Feldes nicht mehr durch die Struktur propagieren können. Damit wirkt die spektralfilternde Eigenschaft der photonischen Struktur in Abbildung 1.24 als Konkurrenzprozess zur Verlängerung der Lebensdauer. Dieses Problem ließe sich durch eine Zerlegung in die einzelnen Spektralanteile und bei gleichzeitiger Normierung auf das eingekoppelte Feld beheben. Eine direkte Bestimmung der Verstärkung ist daher durch die gewählte Darstellung nicht möglich, da die Form von den gewählten Anfangsbedingungen abhängt. Sie eignet sich dagegen zur Bestimmung der optimalen Quantenfilm-Position und zur Demonstration der verlängerten Wechselwirkungszeit im photonischen System.

In ähnlicher Weise lässt sich durch die Darstellung des zeitintegrierten Betrags der y -Komponente des elektrischen Feldes das Modenprofil der zu Abbildung 1.20 gehörenden Bragg-Struktur untersuchen. In dieser Abbildung wurde die Exziton-Resonanz des Halblei-

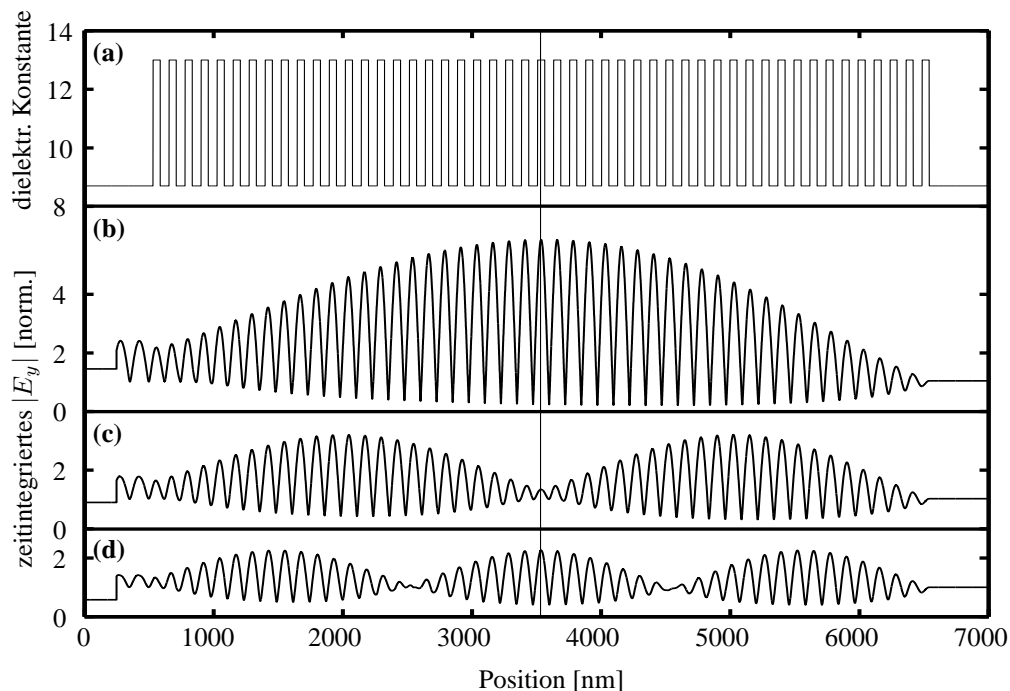


Abbildung 1.25: Räumliche Abhängigkeit des zeitintegrierten $|E_y(z, t)|$ normiert auf das eingekoppelte Feld. Der photonische Kristall ist eine Bragg-Struktur mit 49 Einheitszellen. Die Mitte der photonischen Bandlücke liegt, wie in Abbildung 1.20, bei $E_L = 1.54 \text{ eV}$, wobei die Zentralfrequenz jeweils resonant zum Transmissionspeak I (b), II (c) und III (d) gewählt worden ist. Das eingekoppelte E -Feld ist linear in y -Richtung polarisiert und propagiert als ebene Welle in z -Richtung. Die Gauß'sche Einhüllende des einlaufenden Feldes hat eine volle Halbwertsbreite von 0.25 ps . Zur Orientierung zeigt (a) den räumlichen Verlauf der dielektrischen Konstante. In den FDTD-Simulationen wurden keine Quantenfilme berücksichtigt, um die reinen Propagationseffekte zu betonen. Die vertikale Linie zeigt die Mitte der Struktur, d.h. die Position der Halbleiter in Abbildung 1.20.

ters mit Hilfe des Detunings an die Mode III verschoben und dabei an der spektralen Position der Moden I und III Verstärkung der Absorption festgestellt. Die Mode II der Struktur mit 49 Einheitszellen und $E_L = 1.54 \text{ eV}$ hingegen hatte keine verstärkende Wirkung auf das Spek-

trum. Zur Klärung dieser Zusammenhänge ist in Abbildung 1.25 die räumliche Abhängigkeit des zeitintegrierten Betrags der y-Komponente des elektrischen Feldes dargestellt. Zur Orientierung kann man der Teilabbildung (a) die z-Abhängigkeit der dielektrischen Konstante $\epsilon(z)$ entnehmen. Die Mitte der Struktur wird durch die vertikale Linie gekennzeichnet. Die FDTD-Simulationen wurden dabei mit einlaufenden ebenen Wellen durchgeführt, die resonant zur Mode I (b), Mode II (c) und Mode III (d) gewählt worden sind und die jeweils dieselbe Gauß'sche Einhüllende mit einem FWHM von 0.25 ps haben. Die Moden entsprechen stehenden Wellen, wobei Mode I kein (b) und Mode II genau ein Minimum (c) sowie Mode III zwei Minima (d) aufweist. An der Halbleiter-Position, d.h. der Mitte der Bragg-Struktur, haben nur die Moden I,III,... ein Maximum. Die Moden II,IV,... hingegen sollten dort ein Minimum aufweisen. Dies erklärt die unterschiedlichen Verstärkungseigenschaften der Moden I-III. Wie in Abbildung 1.24 sollte die abgelesene Verstärkung von einem Faktor 2 in (d) bzw. einem Faktor 7 in (b) nur einen groben Anhaltspunkt für die tatsächliche Verstärkung an der Quantenfilm-Position liefern.

Mit der Kenntnis des Modenprofils können nun mit Hilfe der Formel (1.117) genauere Aussagen zur Verstärkung der Halbleiter-Absorption getroffen werden. Danach sollte die Verstär-

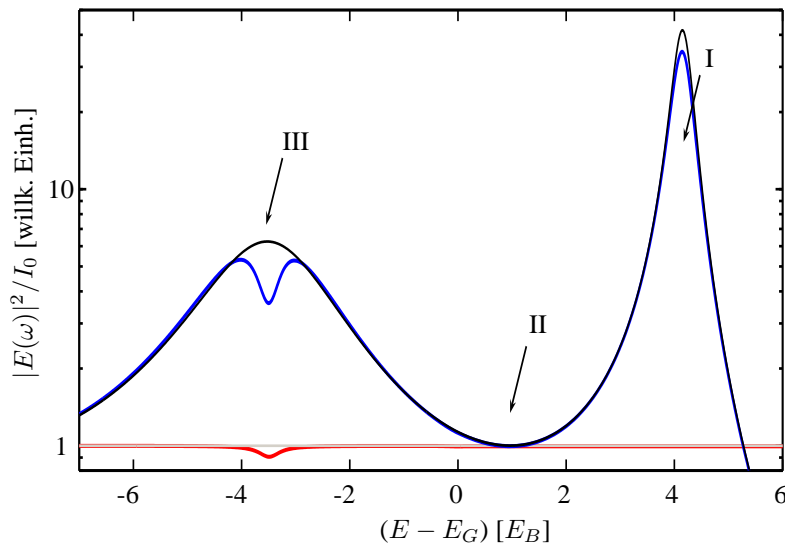


Abbildung 1.26: Logarithmische Darstellung des Betragsquadrats des elektrischen Feldes normiert auf das eingekoppelte Feld $|E(\omega)|^2/I_0$. Dafür wurde das Feld an der Quantenfilm-Position in der Mitte der Struktur Fourier-transformiert. Der blaue und der graue Graph zeigen Rechnungen für ein homogenes Medium mit und ohne Quantenfilm. Analog zeigen der rote und der schwarze Graph Rechnungen in einer Bragg-Struktur mit und ohne Quantenfilm. Die Struktur besteht aus 49 Bragg-Schichten, die Mitte der Bandlücke liegt bei 1.54 eV . Wie in 1.20 wurden für den Halbleiter $d_{cv} = 3.5 \text{ eÅ}$ als Dipol-Matrixelement und $\gamma = 1 \text{ meV}$ als Dephasieren gewählt.

kung proportional zum Betragsquadrat des auf das einlaufende Feld normierten, selbstkonsistenten Feldes $|E_y(\omega, z_{QW})|^2/I_0$ an der Position des Quantenfilms z_{QW} sein. Dieses unterschied-

det sich aufgrund der Wechselwirkung mit den Halbleiter vom Feld der reinen PBE-Struktur. Die Unterschiede vergrößern sich mit zunehmender Kopplungsstärke. Für eine schwache Ankopplung liefert das Feld der reinen PBE-Struktur ziemlich gute Ergebnisse. Wie das Anticrossing in Abbildung 1.21 schon gezeigt hat, liegt jedoch eine nicht zu vernachlässigende Korrektur des elektrischen Feldes durch die selbstkonsistente Wechselwirkung mit dem Halbleiter-Material vor. Für niedrige Dichten, d.h. im Absorptionsbereich des Halbleiters, wird das Feld durch die Wechselwirkung mit dem Halbleiter verringert. Der Verstärkungsfaktor fällt daher niedriger aus, als man es anhand einer nicht selbstkonsistenten Rechnung erwarten würde. Dies lässt sich leicht erklären. Eine Rechnung ohne Halbleiter liefert die Verstärkung aufgrund der verlängerten Lebensdauer und damit verlängerten Wechselwirkungszeit zwischen der Licht-Mode und dem Halbleiter. Aufgrund der Absorption wird dem Feld irreversibel Energie entzogen, die damit nicht mehr zur Verstärkung beitragen kann. Somit muss die Verstärkung im Vergleich zur nicht selbstkonsistenten Rechnung geringer ausfallen. Anders verhält es sich im Gain-Bereich. In diesem Fall wird dem Lichtfeld während der Wechselwirkung vom Halbleiter Energie zugeführt, die wiederum zur Verstärkung beitragen kann. Somit übertrifft die Verstärkung im Gain-Bereich den Wert der nicht selbstkonsistenten Rechnung. Abbildung 1.26 liefert die selbstkonsistenten Felder an der Halbleiter-Position für die Absorptionsspektren 1.20. Die Farben wurden dabei an Abbildung 1.20 angepasst. Der schwarze Graph zeigt somit das Feld der reinen PBE-Struktur mit 49 Zellen und $E_L = 1.54 \text{ eV}$, der blaue Graph das zugehörige durch die Halbleiter-Absorption modifizierte selbstkonsistente Feld. Zum Vergleich zeigt der graue Graph das Feld des homogenen $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Mediums und der rote Graph das dazu gehörende selbstkonsistente Feld. Beide Rechnungen wurden für niedrige Dichten und tiefe Temperaturen durchgeführt. Aus den selbstkonsistenten Graphen lässt sich für die Mode I eine Verstärkung um den Faktor 34.4 sowie für die Mode III eine Verstärkung um den Faktor 3.6 ablesen. Diese Werte entsprechen exakt denen aus Abbildung 1.20. Zudem weist das selbstkonsistente Feld keine Verstärkung im Bereich der zweiten Mode auf. Damit sollten die Eigenschaften der PBE-Moden ausreichend beschrieben sein. Im Folgenden soll versucht werden, das erworbene Wissen beim Design eines PBE-VCSELs anzuwenden.

1.8.3 Untersuchungen zum PBE-VCSEL

Das Konzept des PBE-VCSELs ist schnell erstellt. Dafür muss man lediglich eine PBE-Struktur zwischen zwei Spiegeln anordnen. So einfach das auch klingen mag, letztendlich ist es weniger trivial, als es auf den ersten Blick erscheint. Dies liegt zum einen daran, dass eine Kombination von zwei Spiegeln und einer PBE-Struktur nicht einfach eine Überlagerung der Einzelsysteme liefert. Die wesentlichen Aspekte bleiben zwar erhalten, jedoch treten zusätzlich teilweise erhebliche Resonanzverschiebungen auf. Zum anderen bleibt die Frage, wie man die Effizienz eines solchen Lasers beurteilen will. Eine Verstärkung der Licht-Materie-Kopplung findet, wie im vorigen Abschnitt gezeigt, auch in den einfachen PBE-Strukturen statt. Dennoch sollte jeder herkömmliche VCSEL mit geeigneten Spiegeln eine größere Verstärkung liefern. Wenn man eine PBE-Struktur mit einem Quantenfilm zwischen zwei Bragg-Spiegeln anordnet, verstärkt sich die Ankopplung zwar im Vergleich zu einem VCSEL mit $1 \times \lambda$ als Resonatorlänge, es gibt jedoch keinen vernünftigen Grund, warum der Platz, den die PBE-Struktur einnimmt, nicht für zusätzliche Spiegelschichten verwendet werden sollte. Die Gründe für dieses Dilemma liegen auf der Hand: Die physikalischen Grundlagen und Eigenschaften einer VCSEL-Resonator-Mode und einer PBE-Mode sind von gleicher Art, wie später explizit gezeigt werden soll. Dass ein PBE-System dennoch für Anwendungen inter-

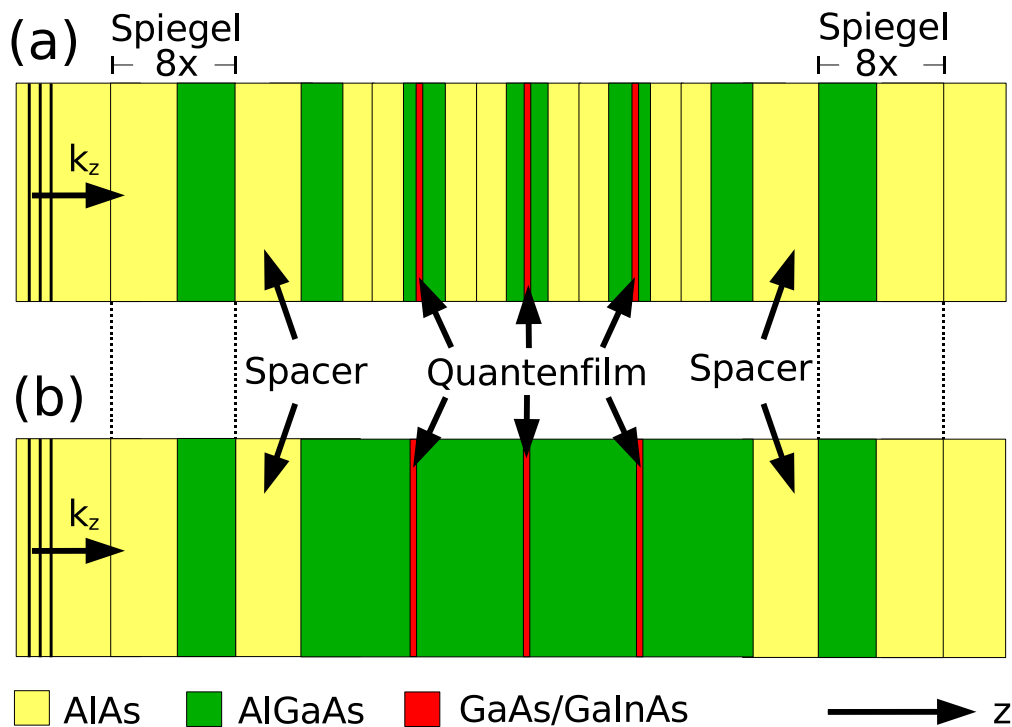


Abbildung 1.27: Schematische Darstellung der 1D VCSEL-Strukturen mit jeweils 8 Spiegelschichten an beiden Seiten. Zwischen der Anordnung mit Quantenfilmen in der Mitte und den Spiegeln am Rand befinden sich AlAs-Spacer-Schichten. Der Spacer des herkömmlichen VCSELs (b) ist in allen Rechnungen $\lambda(\text{AlAs})/4$ dick, der Spacer in (a) wird dagegen als Optimierungsparameter verwendet. (a) PBE-VCSEL: Der photonische Kristall besteht aus $2N + 1$ Schichten mit $2N - 1$ Quantenfilmen in den mittleren Schichten. (b) VCSEL: $2N - 1$ Quantenfilme in einer $2N\lambda/2$ AlGaAs-Schicht. In beiden Strukturen wurde die Position der Quantenfilme an die Maxima der Cavity-Mode angepasst. Die verwendeten Materialien sind $\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{As}$ und AlAs für den photonischen Kristall und $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ für die Quantenfilme. Das einlaufende elektrische Feld ist linear in y -Richtung polarisiert und propagiert als ebene Welle in z -Richtung.

essant sein könnte, soll im Folgenden gezeigt werden.

Die dabei untersuchten Systeme sind ein PBE-VCSEL bestehend aus einem $(2N+1)$ -schichtigen PBE-Material zwischen zwei Bragg-Spiegeln und ein herkömmlicher VCSEL mit einer $2N \times (\lambda/2)$ langen Cavity aus $\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{As}$. Wie Abbildung 1.27 zeigt, umgeht man das oben geschilderte Problem, indem die gesamte PBE-Schicht genutzt wird. Anstelle von nur einem Quantenfilm in der mittleren Schicht werden die $(2N-1)$ inneren Schichten des PBE-Materials mit Quantenfilmen bestückt. Der VCSEL als zugehöriges Vergleichssystem wird ebenfalls mit $(2N-1)$ Quantenfilmen im $(\lambda/2)$ -Abstand versehen. In dieser Anordnung stimmen die Quantenfilm-Positionen mit den Maxima der Cavity-Mode überein. Auch in der PBE-Struktur richtet sich die Position der Quantenfilme nach den Feld-Maxima der PBE-VCSEL-Mode. Der N -te Quantenfilm liegt genau in der Mitte der PBE-Struktur in einer $\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{Al}$ -Schicht. Alle anderen Quantenfilme befinden sich ebenso in $\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{Al}$ -Schichten, sind aber, wie in Abbildung 1.27 angedeutet, aus deren Mitte in Richtung der Spiegel verrückt. Diese Verschiebung wird in den äußeren Schichten immer größer. In der äußersten mit einem Quantenfilm bestückten $\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{Al}$ -Schicht liegt die Quantenfilm-Position fast auf der Grenzfläche zur benachbarten AlAs-Schicht. Als Spiegel werden in beiden Systeme-

men zwei Bragg-Strukturen mit 8 Einheitszellen aus $AlAs$ - und $Al_{0.1}Ga_{0.9}Al$ -Schichten verwendet. Die Schichtdicken entsprechen $d_M = hc/(4E_M\sqrt{\epsilon})$, wobei E_M die Zentralfrequenz der optischen Bandlücke ist. Zwischen den Spiegeln und den Quantenfilm-Strukturen befindet sich jeweils ein $AlAs$ -Spacer. In der VCSEL-Struktur ist der Spacer $\lambda_M(AlAs)/4$ breit, in der PBE-Struktur ist kein fester Wert vorgegeben. Das PBE-Material besteht wie die Spiegel aus $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ - und $AlAs-(\lambda_L/4)$ -Schichten, die Schichtdicke ist jedoch an eine größere Zentralfrequenz $E_L > E_M$ angepasst. Die Zentralfrequenz E_L wird wie die Dicke des Spacers zur Optimierung des PBE-VCSELS verwendet.

Zur Demonstration der Ähnlichkeit zwischen der Cavity- und der PBE-Mode soll zunächst in Abbildung 1.28 (a) die Transmissionsspektren von Microcavities verschiedener Resona-

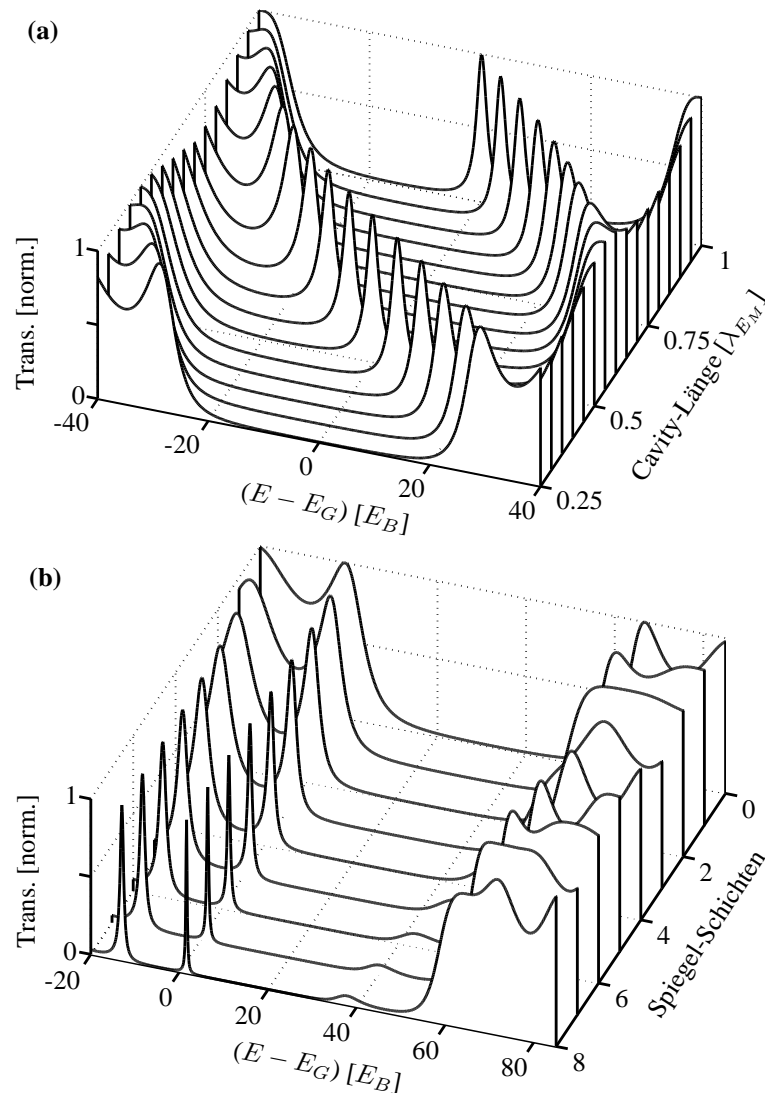


Abbildung 1.28: (a) Transmission einer Microcavity für verschiedene Resonatorlängen. Die Bragg-Schichten am Rand bestehen aus 8 $AlAs - Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Schichten, die Mitte der photonischen Bandlücke liegt bei $E_M = 1.42$ eV. (b) Transmission einer PBE-Struktur mit 15 Bragg-Schichten. Die PBE-Struktur befindet sich innerhalb einer Cavity, die Anzahl der Spiegelschichten wird variiert. Die Parameter der Spiegel entsprechen denen in (a), die Spacer-Schicht ist 75 nm dick. Die Mitte der Bandlücke der PBE-Schicht liegt bei $E_L = 1.56$ eV (vgl. zum Aufbau Abbildung 1.27).

torlänge gezeigt werden. Mit dem Begriff Resonatorlänge ist die Breite des homogenen $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Mediums zwischen den Spiegeln gemeint. Als Spiegel wird eine Bragg-Struktur mit 8 Lagern und einer Zentralfrequenz von $E_M = 1.42 \text{ eV}$ verwendet. Beginnend mit einer Resonatorlänge von $\lambda/4$, was einem Bragg-Spiegel mit 17 Lagern entspricht, wandert die erste PBE-Mode der oberen Bandkante mit zunehmender Resonatorlänge durch die photonische Bandlücke, um für eine Länge von $3\lambda/4$ in die erste Mode der unteren Bandkante überzugehen. Bei einer Länge von $n \times \lambda/2$ mit $n \in \{1, 2, \dots\}$ stimmt die spektrale Position der Cavity-Mode genau mit der Zentralfrequenz der photonischen Bandlücke überein. Die zu diesen Resonanzen gehörenden Moden sind stehende Wellen mit Schwingungsbäuchen am Rand der Cavity. Entspricht die Resonatorlänge einem ungeraden Vielfachen von $\lambda/2$, befindet sich in der Mitte der Cavity ein Schwingungsknoten. Für gerade Vielfache liegt wie am Rand ein Schwingungsbauch vor. Damit könnte man die Cavity-Mode als eine Art PBE-Mode bezeichnen, die aufgrund der Brechung der Periodizität der Struktur durch die Cavity in die Mitte der Bandlücke verschoben worden ist. Im Gegensatz zur ursprünglichen PBE-Mode ist die Linienbreite der Cavity-Mode wesentlich schmaler und hat eine symmetrische Linienform. Dies bestätigt die vorherige Aussage, dass die Verstärkung eines VCSELs immer die einer vergleichbaren reinen PBE-Struktur übertrifft. PBE-VCSEL sind damit nur für Halbleiter-Laser mit mehr als einem Quantenfilm interessant.

Abbildung 1.28 (b) zeigt, wie sich aus den PBE-Moden einer 15-lagigen Bragg-Struktur mit zunehmender Anzahl von Spiegellagern mehrere PBE-VCSEL-Moden entwickeln. Der Spacer zwischen der PBE-Struktur mit Zentralfrequenz $E_L = 1.56 \text{ eV}$ und den Spiegeln mit $E_M = 1.42 \text{ eV}$ wurde 75 nm dick gewählt. Ohne Spiegel liegen oberhalb und unterhalb der Bandlücke mehrere PBE-Moden vor. Mit zunehmender Anzahl von Spiegelperioden verschieben die Moden zu höheren Energien, wobei gleichzeitig die Linienbreite abnimmt. Für geeignete PBE-Parameter kann die Linienbreite schmaler als die Cavity-Mode eines vergleichbaren VCSELs werden. Zur Bestimmung dieser Parameter wird in Abbildung 1.28 (a) die Zentralfrequenz E_L der PBE-Struktur bei festgehaltener Spacer-Dicke von 75 nm variiert. Bei Zentralfrequenzen E_L von 1.56 eV in der PBE-Struktur mit 15 Perioden, von 1.58 eV in der mit 11 Perioden und von 1.62 eV in der mit 7 Perioden wird die Linienbreite der ersten PBE-Mode minimal. Des Weiteren wird in Abbildung 1.28 (b) unter Verwendung der optimalen Werte für E_L in den drei Strukturen mit 15, 11 und 7 Perioden die Spacer-Dicke variiert. Demnach sollten je nach Anzahl der Perioden Dicken zwischen 70 und 85 nm optimal sein. Als Kompromiss wird im Folgenden eine Dicke von 75 nm ausgewählt. Dieser Wert sollte für alle drei Strukturen akzeptabel sein. Zudem wird weiterhin die Zentralfrequenz der Spiegel mit $E_M = 1.42 \text{ eV}$ und deren die Länge mit 8 Perioden festgehalten.

Wie schon anfangs erwähnt, sollten die Quantenfilm-Positionen mit den Maxima der PBE-VCSEL-Mode übereinstimmen. Diese lassen sich über den zeitintegrierten Betrag der y -Komponente des elektrischen Feldes $\int |E_y| dt$ bestimmen. Dabei werden wie in den Rechnungen zu Abbildung 1.25 FDTD-Simulationen in der passiven Struktur durchgeführt. Die einlaufenden ebenen Wellen werden resonant zur Cavity-Mode gewählt und haben eine Halbwertsbreite (FWHM) von 0.25 ps . Abbildung 1.30 zeigt die Ergebnisse dieser Simulationen für eine herkömmliche VCSEL-Struktur mit einer Resonatorlänge von $14 \times \lambda_M/2$ (b) und in PBE-VCSEL-Strukturen mit 15 (b), 11 (c) und 7 (d) PBE-Perioden. Als Zentralfrequenz E_L wurde jeweils die in Abbildung 1.29 (a) bestimmten optimalen Parameter 1.56 eV , 1.58 eV und 1.62 eV verwendet. In der herkömmlichen Cavity entspricht die Mode einer stehenden Welle mit konstanter Amplitude. Innerhalb der Spiegel fällt die Mode exponentiell ab, wobei die Eindringtiefe antiproportional zur Linienbreite der Cavity-Resonanz ist. Im Vergleich zum

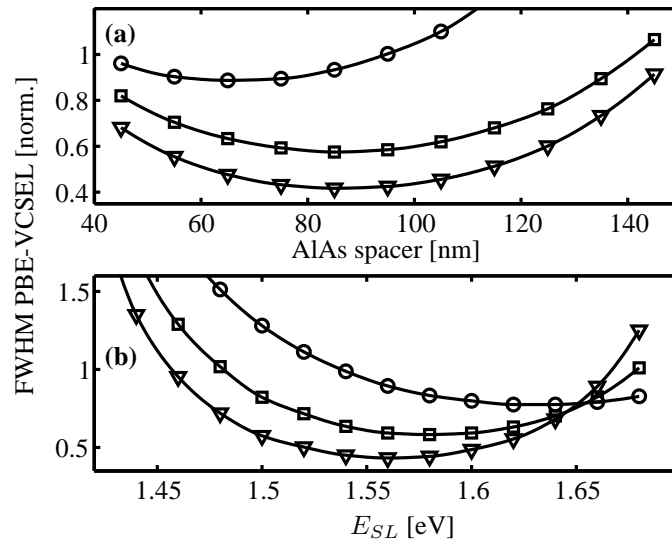


Abbildung 1.29: (a) FWHM der Laser-Mode für einen PBE-VCSEL mit 13 (Dreieck), 9 (Rechteck) oder 5 (Kreis) Quantenfilmen als Funktion von E_L bei konstanter Spacer-Dicke von 75 nm. (b) FWHM der Laser-Mode für einen PBE-VCSEL mit 13 (Dreieck), 9 (Rechteck) oder 5 (Kreis) Quantenfilmen als Funktion der Spacer-Dicke bei konstant gehaltenem $E_L = 1.56$ eV. Die Spiegel der Cavity bestehen in beiden Fällen aus 8 AlAs – $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Schichten, die Mitte der photonischen Bandlücke der Cavity liegt bei $E_M = 1.42$ eV. Das FWHM wurde auf das FWHM einer VCSEL-Struktur mit derselben Anzahl von Quantenfilmen, die im Abstand von $\lambda/2$ angeordnet sind, normiert. Die Symbole zeigen die Ergebnisse verschiedener FDTD-Simulationen, die Linien dienen zur Orientierung.

herkömmlichen VCSEL ändert sich im PBE-VCSEL in den Spiegelschichten kaum etwas. Der exponentielle Abfall und sonstige Verlauf weisen in (a)-(d) keine erkennbaren Unterschiede auf. Zwischen den Spiegeln ändert sich die Situation hingegen deutlich. Anstelle einer Mode mit konstanter Amplitude, d.h. gleich großen Werten an den Wellenbäuchen, wachsen die Wellenbäuche wie in Abbildung 1.25 (a) an und erreichen in der mittleren PBE-Schicht ihren Maximalwert. Platziert man die Quantenfilme an diesen Positionen, sollte eine größere Verstärkung zu erreichen sein als in einem herkömmlichen VCSEL.

In Abbildung 1.31 sind die Transmissions- (a) und Gain-Spektren (b)-(d) der PBE-VCSEL (rot) und der herkömmlichen VCSEL (schwarz) dargestellt. In Teilabbildung (a) ist zudem die Transmission der reinen PBE-Struktur (blau) dargestellt. Um vergleichbare Strukturen zu erhalten, werden jeweils die Spektren eines PBE-VCSELS mit $(2N+1)$ PBE-Perioden und eines herkömmlichen VCSELS mit $2N \times \lambda_M/2$ -Schichten gegenübergestellt. Damit sind die Strukturen zwischen den Spiegeln vergleichbar lang. Zudem haben beide Strukturen jeweils $(2N-1)$ Quantenfilme. Die Strukturen enthalten in (b) 13, (c) 9 und (d) 5 Quantenfilme. Die Spacer-Dicke und die Zentralfrequenzen der PBE-Materialien sind wie in Abbildung 1.30 an den optimalen Werten orientiert. Schon das Transmissionsspektrum in (a) zeigt, dass die PBE-VCSEL-Mode schmäler als die eines herkömmlichen VCSELS ist. Entsprechend übertrifft der maximale Gain der Raumtemperatur-Laser-Spektren zur Dichte $n = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ für Rechnungen mit PBE-Materialien die vergleichbaren Ergebnisse in herkömmlichen VCSELn. In diesen sollte der Gain unter Vernachlässigung von Effekten durch superradiantes Koppeln linear mit der Anzahl der Quantenfilme zunehmen. Im PBE-VCSEL hingegen nimmt

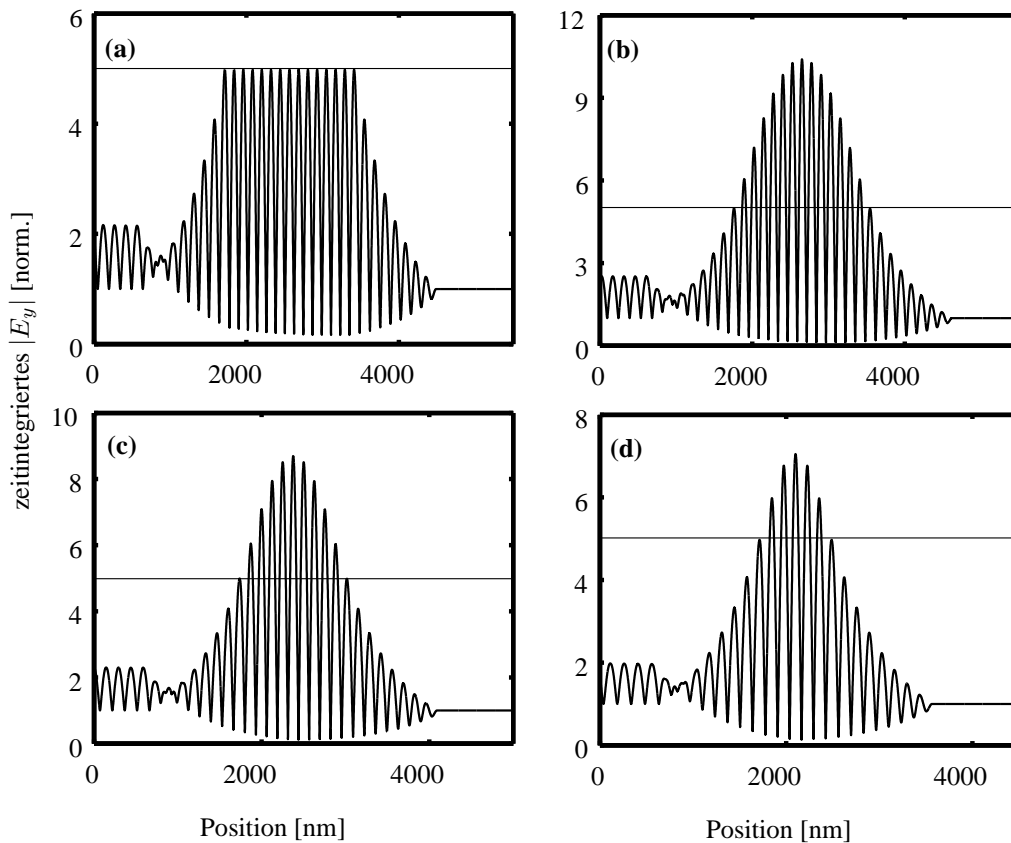


Abbildung 1.30: z -Abhängigkeit des zeitintegrierten Betrags der y -Komponente des elektrischen Feldes $|E_y(z, t)|$: (a) VCSEL-Struktur für 13 Quantenfilme, PBE-VCSEL für (b) 13, (c) 9 und (d) 5 Quantenfilme. Die Spiegel der Cavity bestehen in allen vier Fällen aus 8 $AlAs - Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Schichten, die Mitte der photonischen Bandlücke der Cavity liegt bei $E_M = 1.42$ eV. Die Dicke der Spacer-Schicht der PBE-VCSEL ist 75 nm, die Mitte der PBE-Bandlücke liegt in (b) bei $E_L = 1.56$ nm, (c) bei $E_L = 1.58$ nm und (d) bei 1.62 nm. Die horizontale Linie liegt auf der Höhe der Maxima von (a). Die Frequenz des eingekoppelten Feldes ist resonant zur jeweiligen Cavity-Mode.

die Modenstärke an den Quantenfilm-Positionen zur Mitte hin zu. Dadurch steigt der Gain im PBE-VCSEL superlinear mit der Anzahl der Quantenfilme. Für die Struktur mit 13 Quantenfilmen erreicht man eine nahezu 6-fache Verstärkung. Zudem verringert sich die spektrale Breite der Region, in der eine Verstärkung auftritt. Damit werden Laserverluste durch Kopplung an andere Moden stärker unterdrückt.

Insgesamt zeigt der PBE-VCSEL viel versprechende Eigenschaften. Experimentelle Untersuchungen solcher Strukturen sollten sich daher lohnen. Für tief greifendere theoretische Aussagen sollte man jedoch unter Umständen ein mikroskopisches Modell mit dynamisch mitgerechneten Dichten und Streutermen in zweiter Born'scher Näherung verwenden. Für zu hohe Dichten stößt das hier verwendete Modell an seine Grenzen. Ab einer bestimmten Schwelle für die Dichte n wird in der Struktur durch stimulierte Emission mehr Licht im Bereich der Laserfrequenz erzeugt als durch die Spiegel ausgekoppelt werden kann. Mit dem verwendeten konstanten γ lässt sich dann die Polarisation nicht mehr dämpfen. Statt einen exponentiellen Abfall zu zeigen, würde die Polarisation dann exponentiell steigen. Ein solches unphysikalisches Verhalten würde in einem besseren Modell durch Abbau von Dichte bzw. durch dichteabhängige Streutermen nicht auftreten. Die aus Abbildung 1.31 abgelesenen Verstärkungsfak-

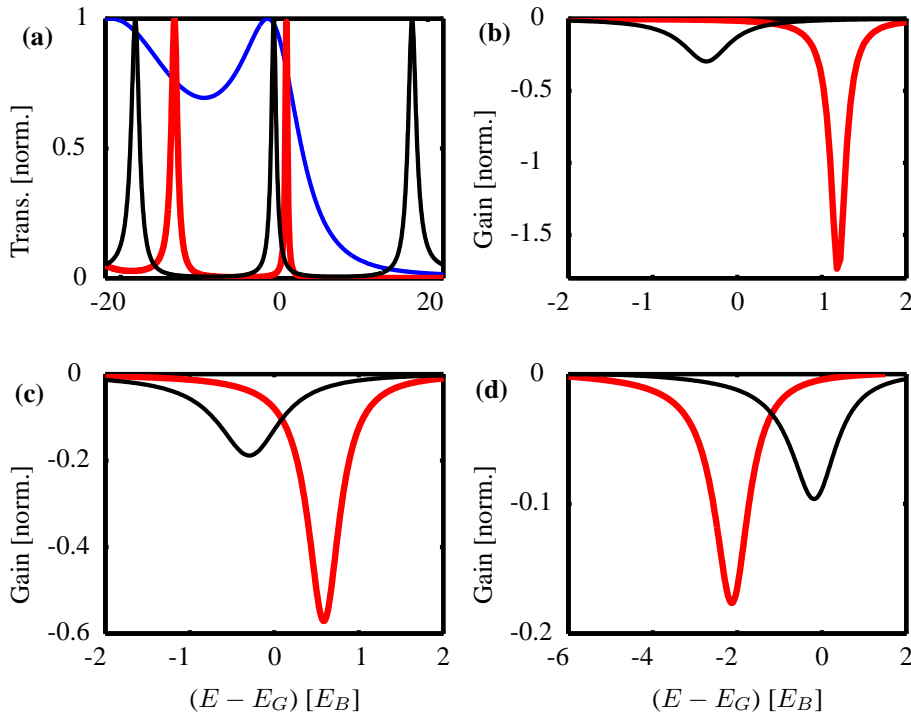


Abbildung 1.31: (a) Transmission eines herkömmlichen VCSELs mit einer $14\lambda/2$ Cavity (schwarz) und eines PBE-VCSELs mit 15 Bragg-Schichten in der Cavity (rot). Zudem ist die Transmission der reinen Bragg-Schicht (schwarz) dargestellt. Die Spiegel bestehen aus jeweils 8 $AlAs-Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Schichten, die Mitte der Bandlücke der Spiegel liegt bei $E_M = 1.42$ eV. (b)-(d) Gain-Spektren des herkömmlichen VCSELs (schwarz) und des PBE-VCSELs (rot) für $n = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $T = 300$ K, $d_{cv} = 3.5$ eÅ und $\gamma = 5$ meV. Die Strukturen enthalten in (b) 13, in (c) 9 und in (d) 5 Quantenfilme. Der AlAs-Spacer ist 75 nm dick. Die Detunings und die Mitte der PBE-Bandlücke sind: (b) $E_L = 1.56$ eV und $\Delta E_G = 9.58$ eV, (c) $E_L = 1.58$ eV und $\Delta E_G = 8.95$ eV, (d) $E_L = 1.62$ eV und $\Delta E_G = 6.16$ eV.

toren sollten daher nur als Richtwert betrachtet werden.

Die in diesem Abschnitt dargestellten Untersuchungen sind dennoch hilfreich für das Verständnis der Vorgänge und Zusammenhänge bei der Kopplung an die PBE-Moden der unteren oder oberen Bandkante. Mit dem verwendeten Modell konnte sowohl die räumliche Modenstruktur als auch deren Verstärkungseigenschaften exakt bestimmt werden. Die vorgestellte Theorie, die bei der Auswertung der FDTD-Simulationen verwendet wird, ist an sich schon ein wertvolles Ergebnis, das auf manch andere Situation übertragbar sein sollte. Zudem konnte die "Verwandtschaft" zwischen der ersten PBE-Mode der unteren und oberen Bandkante zur Cavity-Mode eines herkömmlichen VCSELs in Abbildung 1.28 (a) gezeigt werden. Auch die gewonnenen Erkenntnisse zu den PBE-VCSELn sollte bei der Realisierung solcher Strukturen hilfreich sein. Als Alternative könnte man auch an die Herstellung von PBE-VE(xternal)CSELn denken. In solchen Strukturen wird einer der Bragg-Spiegel in Abbildung 1.18 durch einen externen Spiegel ersetzt. Die Licht-Materie-Wechselwirkung mit Moden in der Nähe der photonischen Bandlücke scheint ein interessantes Teilgebiet der photonischen Kristalle zu sein, zu dem in den kommenden Jahren sicherlich noch einige interessante Ergebnisse und Anwendungen zu erwarten sind. Vielleicht könnte dabei auch das Auftreten von

mehreren PBE-Moden innerhalb der Bandlücke der PBE-VCSEL eine Rolle spielen.

1.9 Kurzes Resümee

Abschließend soll nun noch ein kurzes Resümee zu den Ergebnissen von Kapitel 1 gezogen werden, in dem sowohl Themen aus dem Bereich der Grundlagenphysik als auch solche aus dem Bereich der eher anwendungsorientierten Physik behandelt worden sind. Es ist klar, dass dabei nur ein sehr kleines Spektrum aus dem umfassenden Bereich der photonischen Kristalle gezeigt werden konnte. Dennoch sollte Kapitel 1 einige interessante Denkanstöße zu dieser Thematik liefern.

Als Erstes wurden in Abschnitt 1.2 mit Aufstellen der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen alle notwendigen Grundlagen geliefert, die für eine selbstkonsistente Beschreibung der Licht-Materie-Wechselwirkung in einem System aus photonischem Kristall und Halbleiter im Rahmen einer semiklassischen Theorie benötigt werden. Insbesondere wurde auf die Feststellung Wert gelegt, dass sich ein photonischer Kristall im Allgemeinen nicht nur auf seine transversalen Eigenschaften reduzieren lässt. Die longitudinalen Eigenschaften, im vorliegenden Fall die Modifikationen der Coulomb-Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen, spielen zwar nur in der nächsten Umgebung einer Grenzfläche zweier Medien mit unterschiedlicher dielektrischer Konstante eine Rolle, könnten aber gezielt für praktische Anwendungen genutzt werden. Dafür ist jedoch ein detailliertes Verständnis ihrer Auswirkungen auf das untersuchte Materialsystem von Nöten. Die in Abschnitt 1.6 gezeigten Ergebnisse zu räumlich inhomogenen exzitonischen Zuständen und Halbleiterdichten sowie deren Dynamik und Relaxation in Quasi-Gleichgewichtszustände liefert dazu die nötigen Grundkenntnisse [107]. Dabei konnte anhand der Analogie zum quantenmechanischen Problem eines Teilchens im endlich tiefen Kastenpotential ein einfaches Verständnis für die beobachteten Phänomene entwickelt werden. Als eine mögliche Anwendung kann das in Abschnitt 1.7 präsentierte Lasersystem angesehen werden. Hierbei wurde gezeigt, dass die durch die Coulomb-Modifikationen hervorgerufene räumliche Umverteilung der Ladungsdichten in Bereiche des Halbleiters mit möglichst großem Abstand zu den dielektrischen Grenzflächen des photonischen Kristalls zu einer lokalen Reduzierung der Laserschwelle führen sollte. Mit Laserschwelle wurde die mittlere Halbleiterdichte bezeichnet, bei der das System beginnt, an Stelle von Absorption optische Verstärkung aufzuweisen. Es sei darauf hingewiesen, dass für diesen Effekt die transversalen Eigenschaften des photonischen Kristalls gar nicht ausgenutzt worden sind. Durch Lichtpropagation in der Ebene des zweidimensionalen photonischen Kristalls statt, wie hier verwendet, senkrecht dazu, sollte sich die Effizienz eines solchen Systems durch Ankopplung an bestimmte optische Kristallmoden wesentlich verbessern lassen. Da solche Untersuchungen aufgrund der räumlich inhomogenen Halbleiter-Bloch-Gleichungen numerisch sehr aufwendig gewesen wären, wurden solche Effekte in Abschnitt 1.8 anhand einer numerisch weniger komplexen Situation untersucht. Dabei wurden Ergebnisse zur Licht-Materie-Kopplung von räumlich homogenen Halbleiter-Quantenfilmen an die Bandkantenmoden einer eindimensionalen Bragg-Struktur gezeigt. Neben der Tatsache, dass die dabei gewonnenen Erkenntnisse auch auf die inhomogenen Strukturen aus den Abschnitten 1.6 und 1.7 übertragbar sein sollten, konnte mit der Einführung der PBE-VCSEL-Struktur ein viel versprechendes Lasersystem vorgestellt werden [108]. Des Weiteren könnten die erzielten Erkenntnisse auch für eine Anwendung in einem VECSEL [52, 84] interessant sein. Diese ist eine VCSEL-Struktur mit einem externen Spiegel. Zudem würde sich eine Kombination der transversalen und longi-

tudinalen Eigenschaften der photonischen Kristalle bei der Untersuchung von superradianter Emission der räumlich periodisch variierenden Quasi-Gleichgewichtsverteilungen anbieten. Zudem könnte auch die Untersuchung der Einflüsse eines photonischen Kristalls auf statische elektrische Felder interessant sein. Unter Umständen ließen sich damit räumlich variierende Potentiale erzeugen, die ähnliche Lokalisierungseffekte wie die Coulomb-Selbstenergien bewirken sollten. Der Vorteil würde darin bestehen, dass man Stärke des Potentials von außen vorgeben könnte. Die kommenden Jahre werden sicherlich einige interessante Untersuchungen zu diesen Fragestellungen und hoffentlich auch einige experimentelle Realisierungen und Anwendungen liefern.

Neben diesen eher physikalisch motivierten Ergebnissen soll auch das vorgestellte numerische Lösungsschema nicht unbeachtet bleiben. Die vorgestellte Kombination aus FDTD-Algorithmus für die Lichtpropagation und die Predictor-Corrector-Methode für die dynamische Entwicklung der optisch angeregten Halbleiter-Kohärenzen aus Abschnitt 1.3 eignet sich hervorragend für eine selbstkonsistente Beschreibung der Licht-Materie-Wechselwirkung. Mit Hilfe des in diesem Zusammenhang beschriebenen Iterationsverfahrens, das im Rahmen dieser Arbeit nicht benötigt wurde, sollte eine selbstkonsistente Lösung selbst in numerisch kritischen Situationen gewährleistet sein und könnte daher auch für andere Anwendungen interessant werden wie z.B. das Lösen der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen für Problemstellungen aus dem Bereich der extrem nicht-linearen Optik [146]. Zudem stellt das beschriebene Verfahren, mit dem sich die Rotating-Wave-Approximation auf die FDTD-Implementierung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen übertragen lässt, eine interessante Möglichkeit dar, den notwendigen Rechenaufwand erheblich zu reduzieren. Dabei konnte unter Verwendung komplexer elektromagnetischer Felder die Licht-Materie-Wechselwirkung auf ihre resonanten Anteile beschränkt und die Halbleiter-Kohärenzen in langsam veränderliche Größen transformiert werden, die auf einem gröberen Zeitgitter gelöst werden können. Die für den FDTD-Algorithmus benötigten Werte für die aktuelle Polarisationsrichtung lassen sich ohne Beeinträchtigung der Selbstkonsistenz interpolieren. Der Begriff numerische RWA wurde in diesem Zusammenhang gewählt, da die schnell veränderliche Phase der Halbleiter-Polarisation durch numerische Multiplikation aus den mit dem FDTD-Algorithmus berechneten elektromagnetischen Feldern entfernt werden muss.

Somit liefert Kapitel 1 aus physikalischer Sicht einige interessante Phänomene und Einblicke in photonischen Kristallstrukturen mit integrierten Halbleitern. Zudem sollte das Kapitel auch als Einführung in die numerische Lösung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen geeignet sein. Damit soll nun das Kapitel abgeschlossen und der zweite Teil der Arbeit, die Untersuchung von kohärenten Spin- und Ladungsströmen in Halbleitern, angegangen werden. Obwohl die Lichtpropagation dabei nicht mitgerechnet wird, werden dennoch einige elementare Definitionen aus Abschnitt 1.2 Anwendung finden.

2 Kohärente Spin- und Ladungsströme in Halbleiter-Quantenfilmen

Eine Studie zur
Dynamik von
kohärenten Spin- und Ladungsströmen
in Halbleiter-Quantenfilmen
für ein Drei-Band-Modell
mit einer $k \cdot p$ -Bandstruktur und
auf der Wechselwirkung mit Phononen
basierenden Relaxationsprozessen

Inhaltsangabe

1.1	Einleitung	6
1.2	Die Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen	8
1.2.1	Maxwell-Gleichungen in inhomogenen linearen Medien	9
1.2.2	Die makroskopische Halbleiter-Polarisation als Quellterm	10
1.2.3	Der longitudinale Feldanteil	14
1.3	Finite-Difference-Time-Domain (FDTD)	16
1.3.1	Mur-Randbedingungen zweiter Ordnung	19
1.3.2	Einkopplung des Feldes	20
1.3.3	Num. selbstkonsistente Lösung der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gl.	21
1.3.4	Anwendbarkeit der Rotating-Wave-Approximation	23
1.3.5	”Messung” von Absorption und Gain in den FDTD-Simulationen	24
1.4	Ortsdarstellung des Hamilton-Operators in inhomogenen Systemen	25
1.5	Die Heisenberg-Gleichungen des Halbleiter-Systems	28
1.5.1	Näherungen für den Grenzfall schwacher Anregung	30
1.5.2	Dephasieren und Relaxation in das Quasi-Gleichgewicht	32
1.6	Exzitonische Wellenpaket-Dynamik von Quantendraht-Dichten	35
1.6.1	Das verwendete Modellsystem	36
1.6.2	Numerische Ergebnisse zu den Coulomb-Modifikationen	38
1.6.3	Räumlich inhomogene exzitonische Zustände	39
1.6.4	Kohärente Wellenpaket-Dynamik	42
1.6.5	Wellenpaket-Dynamik mit Dephasieren und Relaxieren	45
1.7	Räumlich inhomogener Halbleiter-Gain in photonischen Kristallstrukturen	49
1.7.1	Vorstellung des verwendeten Modellsystems	50
1.7.2	Lineare Absorptionsspektren der unangeregten Struktur	51
1.7.3	Dichteabhängige Quasi-Gleichgewichtsspektren	52
1.7.4	Reduzierung der Laserschwelle durch die Coulomb-Modifikationen	53
1.8	Verstärkte Licht-Materie-Wechselwirkung in 1D photonischen Kristallen	56
1.8.1	Das mikroskopische Halbleiter-Modell	57
1.8.2	Slow-Light-Propagation in der PBE-Struktur	58
1.8.3	Untersuchungen zum PBE-VCSEL	68
1.9	Kurzes Resümee	75

2.1 Einleitung

Interferenzphänomene treten in der Quantenphysik als Konsequenz des Superpositionsprinzips auf. Sie werden in atomaren, molekularen, biologischen und Halbleiter-Systemen verwendet, um dynamische Prozesse in Nicht-Gleichgewichtssituationen kurz nach deren Entstehung durch eine äußere Störung zu untersuchen und zu kontrollieren [19, 145, 46, 15, 57, 127]. Bei der optischen Erzeugung dieser Nicht-Gleichgewichtszustände können spezielle Lasereigenschaften, wie beispielsweise Phase oder Chirp, ausgenutzt werden.

In den letzten Jahren sind solche Interferenzphänomene vermehrt auch in Halbleiter-Systemen untersucht worden. Dabei hat sich insbesondere die optische Erzeugung von Photoströmen [32, 2, 50] zu einem viel beachteten Forschungsgebiet entwickelt. Nach einem Vorschlag aus dem Jahr 1996 von Atanasov et al. [2] sollte die Erzeugung von Ladungsströmen durch eine Zwei-Puls-Anregung möglich sein. Dafür muss der Halbleiter mit zwei linear parallel zueinander polarisierten Pulsen mit Zentralfrequenzen ω und 2ω oberhalb der Bandkante E_G , d.h. $2\hbar\omega > E_G$, angeregt werden. Die optisch erzeugten Elektronverteilungen weisen nach der Zwei-Puls-Anregung im k-Raum eine bestimmte Vorzugsrichtung auf. Diese Verteilungen sind für beide Spinsorten gleich und führen zu einem makroskopischen Elektronenstrom, dessen Richtung durch die Polarisationsrichtung und Phase der verwendeten Laserpulse vorgegeben ist. Das neuartige an dieser Idee war, diese Ströme ohne Anlegen eines statischen äußeren Feldes und nur unter Ausnutzung der Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen zu erzeugen. Wenig später konnten diese Ströme im Jahr 1997 experimentell nachgewiesen werden [50].

Mit einem ähnlichen Interferenzschema können unter Ausnutzung der Spinabhängigkeit der optischen Matricelemente, wie im Jahr 2000 von R.D.R. Bhat und J.E. Sipe [11] vorgeschlagen, auch reine Spinströme erzeugt werden, die nicht von einem Ladungsstrom begleitet werden. Für die experimentelle Realisierung müssen anstelle von zwei linear parallel zueinander polarisierten ω - und 2ω -Laserpulsen, wie sie bei der Erzeugung von Ladungsströmen verwendet werden, nur zwei linear senkrecht zueinander polarisierte Laserpulse verwendet werden. In Analogie zu den Ladungsströmen werden auch Spinströme durch Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen erzeugt. Nach der optischen Anregung sind in diesem Fall jedoch die Vorzugsrichtungen der k-Raum-Besetzungen spinabhängig. Präziser gesagt, verlaufen die Ströme in entgegengesetzte Richtungen. Damit liegt kein makroskopischer Ladungsstrom vor, jedoch ein Transport von Elektronspins. Der Spinstrom erfolgt in die Richtung der Polarisation des ω -Pulses, wobei sein Vorzeichen durch die Phasen der Laserpulse und die Spinorientierung (\uparrow , \downarrow) bestimmt wird. Im Jahr 2003 konnten Halbleiter-Spinströme in zwei experimentellen Gruppen von Stevens et al. [131, 130] und Hübner et al. [60] unabhängig voneinander nachgewiesen werden.

Des Weiteren wurde für ungeordnete Halbleiter das Auftreten von Stromechos vorhergesagt, die sich durch eine Folge von zeitlich versetzten Laserpulsen erzeugen lassen sollten [132, 125, 92]. Ein experimenteller Nachweis steht bis jetzt jedoch noch aus.

Mögliche Anwendungen für die Spinströme könnten in Zukunft aus dem Bereich der "Spintronics" kommen [148, 153]. Wie in den Referenzen [41, 114] gezeigt wird, lassen sich die Photoströme auch über die Phase der Trägerwellen-Einhüllenden kontrollieren. Dies könnte für den Bereich der Präzisionsmesstechnik interessant sein.

Für eine theoretische Beschreibung wurde anfangs mit der Verwendung von nichtlinearen optischen Halbleiter-Suszeptibilitäten ein möglichst einfaches Modell gewählt, mit dem sich die kohärente Erzeugung von Photoströmen mit zwei Laserpulsen der Frequenzen ω und 2ω er-

klären ließ [2, 99]. Die optischen Inter- und Intra-Band-Übergänge wurden dabei mit Hilfe von Fermi's Goldener Regel [102] berechnet. Diese wird zwar häufig mit recht gutem Erfolg eingesetzt, hinterlässt aber wegen der bei ihrer Herleitung verwendeten, sich teilweise eklatant widersprechenden Voraussetzungen immer einen faden Beigeschmack. Dennoch können mit diesem Ansatz qualitativ gute Voraussagen zum Auftreten und zur Stärke von Photoströmen für verschiedene Kristallsymmetrien und Anregungsbedingungen getroffen werden.

Für ein detailliertes Verständnis der mikroskopischen Vorgänge während der kohärenten Erzeugung, zeitlichen Entwicklung und Relaxation der Ströme wird jedoch eine dynamische Theorie benötigt. Dabei hat sich das Aufstellen und Lösen von (Halbleiter-)Bloch-Gleichungen für die relevanten Interband-Kohärenzen und Elektronbesetzungen vielfach bewährt. Hierzu seien folgende Beispiele genannt: Untersuchungen zum Auftreten von Stromechos in ungeordneten Halbleitern auf Basis eines Zwei-Band-Modells [132, 125], Untersuchung von Strömen in geordneten Halbleitern unter Berücksichtigung von Multi-Band-Effekten und Verwendung realistischer $k \cdot p$ -Bandstrukturen und $k \cdot p$ -Matrixelemente [88, 89] sowie diverse Untersuchungen zu den mikroskopischen Vorgängen bei der Stromrelaxation [30, 29, 91]. Zudem konnte gezeigt werden, dass Coulomb-Effekte in Volumenhalbleitern zu phasenverschobenen Ladungs- und Spinströmen führen [12] und dass die Interferenz von optisch erlaubten und verbotenen Exzitonen in Quantendrähten [89] und Quantenfilmen [116] zu oszillierenden Strömen führen kann.

Für die zeitliche Entwicklung der Halbleiter-Polarisationen und Elektrondichten nach der optischen Anregung spielen Dephasierungs- und Relaxationsprozesse eine entscheidende Rolle. Vielen Publikationen greifen dabei jedoch häufig auf phänomenologische Modelle zurück [131, 60, 41, 88, 114]. Für *GaAs*-Volumenmaterial gibt es jedoch auch Analysen zur Relaxation von Photoströmen über Ladungsträger-Phonon-Streuung [74]. Ebenso wurden für *GaAs*-Volumenhalbleiter einige auf einem einfachen Modell basierende Untersuchungen zum Abfall von Spinströmen aufgrund von Ladungsträger-Ladungsträger-Streuung publiziert [115]. Eine numerische Berechnung dieser mikroskopischen Streuprozesse ist in zwei- oder dreidimensionalen Systemen jedoch selbst für ein Zwei-Band-Modell extrem zeitaufwendig. Erschwerend kommt hinzu, dass die Polarisationen und Besetzungen keine Rotationssymmetrie aufweisen. Daher werden Untersuchungen zu den mikroskopischen Streuprozessen vielfach an eindimensionalen Quantendrähten durchgeführt.

Eine mikroskopische Beschreibung der Dephasierung und Relaxation ist zwar numerisch anspruchsvoll, jedoch lassen sich damit einige interessante Phänomene beobachten. Auf dem Niveau von Streutermen der zweiten Born'scher Näherung mit Markov-Approximation [56, 123, 81, 122, 90] konnte gezeigt werden, dass als Konsequenz der Spin-Erhaltung bei der Coulomb-Streuung der Spinstrom schneller abfällt als der Ladungsstrom [30]. Des Weiteren gibt es Untersuchungen zu quantenkinetischen Effekten [54] bei der Dynamik und Relaxation von Ladungs- und Spinströmen auf der Basis einer auf Nicht-Gleichgewichtssituationen erweiterten Green's-Funktionen-Theorie, die zur Beschreibung der Ladungsträger-LO-Phonon-Streuung bzw. der Ladungsträger-Ladungsträger-Streuung verwendet wird [29]. Hierbei zeigen die Ströme interessante oszillierende Signaturen. Aufgrund der komplexen Theorie sind dabei nur Rechnungen für Quantendrähte möglich. Es sei jedoch angemerkt, dass in all diesen numerischen Simulationen keine Spin-Relaxationsmechanismen [149, 69, 109] berücksichtigt worden sind.

Die vorliegende Arbeit soll die in den Referenzen [30, 29] begonnenen Untersuchungen fortführen und durch eine Erweiterung der zugrunde liegenden Theorie neue Aspekte einbringen, die bisher nicht berücksichtigt werden konnten. Dabei soll die Entstehung und Relaxation von

Ladungs- und Spinströmen auf der Basis der Halbleiter-Bloch-Gleichungen analysiert werden. Während in den bisherigen beiden Marburger Veröffentlichungen von Duc et al. [30, 29] ein ideales Zwei-Band-Modell mit rotationssymmetrischen optischen Matrixelementen verwendet wurde, das zudem teilweise auf den eindimensionalen Fall von Halbleiter-Quantendrähten reduziert werden musste, sollen hier generell nur Quantenfilme untersucht werden. Außerdem soll die theoretische Beschreibung des Halbleiters auf ein Drei-Band-Modell mit einem Leitungsband und zwei Valenzbändern erweitert werden, dem eine realistische $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur zugrunde liegt. Die optischen Matrixelemente sollen wie die Coulomb- und Elektron-Phonon-Matrixelemente über die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Eigenfunktionen berechnet werden. In den Veröffentlichungen [87, 88] wurden zwar auch schon Multi-Band-Gleichungen unter Verwendung $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrixelementen gelöst, dies, aber ohne Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung. Bei Verwendung der optischen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Interband- und Intraband-Matrixelemente können physikalische Effekte beobachtet werden, die in einem einfachen Halbleiter-Modell mit \mathbf{k} -unabhängigen, rotationssymmetrischen Matrixelementen nicht auftreten können. Durch Überlagerung der Schwerloch- und Leichtloch-artigen Anteile bei der optischen Interbandanregung wird jeder Ladungsstrom durch einen senkrecht dazu fließenden Spinstrom und jeder Spinstrom durch einen senkrecht dazu fließenden Ladungsstrom begleitet werden. Es sei nochmals explizit darauf hingewiesen, dass solche Effekte im Zwei-Band-Modell eines idealen, d.h. unendlich dünnen, Quantenfilms ausgeschlossen sind. Die Grundlagen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie werden in Abschnitt 2.2 zusammengefasst und in Abschnitt 2.3 bei der Einführung und Berechnung der verschiedenen Matrixelemente für symmetrische Quantenfilme angewendet. Insbesondere wird es dabei auch um die Symmetrie-Eigenschaften der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen gehen, die bei der Erstellung von Auswahlregeln für die verschiedenen Matrixelemente benötigt werden. Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen soll im Rahmen dieser Arbeit auf der Ebene einer unabgeschirmten dynamischen Hartree-Fock-Näherung [56] beschrieben werden. Dies ist gegenüber den Veröffentlichungen [30] und [29] ein Rückschritt. Dort wurde die Coulomb-Wechselwirkung auf dem Niveau der zweiten Born'schen Näherung beschrieben, jedoch ist dabei zu beachten, dass das hier vorliegende Modell von den Grundvoraussetzungen her wesentlich aufwendiger ist. Dies liegt zum einen an der Berücksichtigung von drei anstelle von zwei Bändern, wodurch viele zusätzliche Streuterme auftreten würden, zum anderen an der ausschließlichen Verwendung von Quantenfilmen anstelle von Quantendrähten. Die numerische Komplexität der Ladungsträger-Ladungsträger-Streuterme der zweiten Born'schen Näherung besteht darin, dass Doppelsummen über Wellenvektoren ausgeführt werden müssen. Im Gegensatz dazu treten bei der Hartree-Fock-Näherung oder in den Ladungsträger-Phonon-Streuterme nur Einfachsummen auf. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die in den Veröffentlichungen [30, 29] gezeigten Rechnungen zu Quantenfilmen schon an der Grenze des numerisch Machbaren laufen, sofern nicht angedacht ist, zusätzliche Näherungen wie z.B. die Verwendung von Monte-Carlo-Techniken einzusetzen. Dies hätte aber wohl den Rahmen dieser Arbeit gesprengt und sei zukünftigen Untersuchungen überlassen.

Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und dispersionslosen LO-Phononen hingegen soll wie in den beiden bisher veröffentlichten Artikeln [30, 29] über die Streuterme der zweiten Born'schen Näherung in die numerischen Simulationen eingefügt werden. Zur Vereinfachung werden dabei die Phononenbesetzungen als statische Gleichgewichtsverteilungen angesetzt. Zusätzlich werden bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung explizit Gedächtniseffekte berücksichtigt, indem die in den Streuterme auftretenden Zeitintegrale numerisch gelöst werden. Es wird also keine Markov-Näherung verwendet.

Die zu den Matrixelementen gehörenden Heisenberg-Bewegungsgleichungen werden in Ab-

schnitt 2.4 hergeleitet und unter Berücksichtigung der in Abschnitt 2.3 bestimmten Auswahlregeln vereinfacht. Um die numerische Komplexität dieses gekoppelten Gleichungssystems zu verdeutlichen, sei hier angemerkt, dass schon für das Drei-Band-Modell an jedem \mathbf{k} -Punkt über 100 \mathbf{k} -Summen bei der Bearbeitung der Hartree-Fock- und Phonon-Streuterme gelöst werden müssen. Dabei sind alle möglichen Anteile eingeschlossen, die nach Auswertung der Coulomb-Auswahlregeln einen nichtverschwindenden Beitrag liefern.

Der darauf folgende Abschnitt 2.5 beschäftigt sich mit der numerischen Auswertung der Bewegungsgleichungen. In Abschnitt 2.5.1 sollen zunächst einige wichtigen Definitionen sowie die gewählten optischen Anregungsbedingungen festgelegt werden. Hierbei wird es vor allem auch um die Frage gehen, welche Ströme untersucht und welche Bezeichnungen dafür angebracht sind, da der Spin innerhalb der Valenzbänder keine geeignete Quantenzahl mehr ist. Die Valenzbandzustände tragen als Mischzustände Anteile von beiden Spins. Im Gegensatz dazu haben die Leitungsbandzustände im gewählten theoretischen Modell eine eindeutige Spinorientierung. Nach einer Beschreibung der gewählten Modellsysteme bezüglich ihrer Zusammensetzung, Bandstruktur, Wellenfunktionen und optischen Matrixelemente in Abschnitt 2.5.2 sollen schließlich einige numerische Ergebnisse zur Dynamik von Spin- und Ladungsströmen gezeigt werden. Dabei soll es vor allem um die Effekte gehen, die durch die Wechselwirkung von Schwerloch- (engl. heavy hole) und Leichtloch-artigen (engl. light hole) Anteilen der Matrixelemente bestimmt werden. Zur Analyse und Erklärung einiger dieser Effekte wird in Abschnitt 2.5.5 eine einfache theoretische Entwicklung vorgestellt. Zudem sollen numerische Ergebnisse verglichen werden, die mit und ohne Verwendung der Markov-Näherung berechnet worden sind. Abgeschlossen wird das Kapitel in Abschnitt 2.6 durch ein kurzes Resümee der gezeigten Ergebnisse.

2.2 Bandstruktur und $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Störungsrechnung

In diesem Abschnitt soll kurz die Theorie eingeführt werden, die in dieser Arbeit bei der Berechnung der Bandstruktur und der zugehörigen Wellenfunktionen verwendet wird. Die theoretischen Grundlagen beruhen im Wesentlichen auf einen Artikel von M.G. Burt [20] aus dem Jahr 1992.

Den Ausgangspunkt der Betrachtung bildet die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

der Halbleiter-Elektronen, wobei $V(\mathbf{r})$ das mikroskopische Kristallpotential darstellt. Passend zum Bravais-Gitter wird zunächst eine vollständige, an das Problem angepasste gitterperiodische Basis $\{u_0^n(\mathbf{r})\}$ gewählt, in der die Gleichung entwickelt werden soll:

$$\Phi_\lambda(\mathbf{r}) = \sum_n f_\lambda^n(\mathbf{r}) u_0^n(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

Die Einhüllenden $f_\lambda^n(\mathbf{r})$ sind im Vergleich zu den Basis-Funktionen langsam veränderlich, da ihre Fourier-Darstellungen auf die erste Brillouin-Zone des Bravais-Gitters beschränkt sind, in dem die gitterperiodischen Basisfunktionen $u_0^n(\mathbf{r})$ definiert worden sind. Hingegen beruht eine solche Entwicklung für die gitterperiodischen Basisfunktionen natürlicher Weise auf den reziproken Gittervektoren \mathbf{G} :

$$f_\lambda^n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} F_{\lambda\mathbf{k}}^n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{und} \quad u_0^n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}}^n e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.3)$$

Die Vollständigkeit der Basisfunktionen lässt sich damit in folgender Weise darstellen:

$$\frac{1}{V_0} \int_{GZ} d^3 \mathbf{r} u_0^n(\mathbf{r})^* u_0^m(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} U_{\mathbf{G}}^n U_{\mathbf{G}'}^m \delta_{\mathbf{G}', \mathbf{G}} = \delta_{n,m} \quad (2.4)$$

Wie sich leicht zeigen lässt, stellt die Beschränkung der einen Fourier-Entwicklung aus Gleichung (2.3) auf die erste Brillouin-Zone stellt keine Näherung dar. Dafür werden zunächst die von Natur aus gitterperiodischen ebenen Wellen $\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$ in den Basisfunktionen $u_0^n(\mathbf{r})$ entwickelt

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{V_0} \sum_n \left[\int_{GZ} d^3 r' u_0^n(\mathbf{r}')^* e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}'} \right] u_0^n(\mathbf{r}) = \sum_n (U_{\mathbf{G}}^n)^* u_0^n(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

wobei V_0 das Volumen einer Gitterzelle (GZ) ist. Setzt man dies in die Fourier-Entwicklung der Elektron-Wellenfunktion $\Phi(\mathbf{r})$ ein,

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} = \sum_n \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} (U_{\mathbf{G}}^n)^* \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right] u_0^n(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

wird klar, wie die $f^n(\mathbf{r})$ zu definieren sind. Mit Hilfe der Fourier-Darstellung (2.3) der Funktionen $f^n(\mathbf{r})$ und $u_0^n(\mathbf{r})$ kann man auch die Orthonormalität zweier Lösungen Φ_i und Φ_j elegant transformieren:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_i(\mathbf{r}) | \Phi_j(\mathbf{r}) \rangle &= \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} F_{i\mathbf{k}}^n U_{\mathbf{G}}^n F_{j\mathbf{k}'}^m U_{\mathbf{G}'}^m \int_V d^3 r e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}} \\ &= \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} F_{i\mathbf{k}}^n U_{\mathbf{G}}^n F_{j\mathbf{k}'}^m U_{\mathbf{G}'}^m \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{G} - \mathbf{G}'} V \end{aligned} \quad (2.7)$$

Da die Wellenvektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' auf die erste Brillouin-Zone beschränkt und \mathbf{G} und \mathbf{G}' reziproke Gittervektoren sind, kann die Bedingung der Delta-Distribution nur erfüllt werden, wenn $\mathbf{G} = \mathbf{G}'$ und damit auch $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ gilt. Mit der Vollständigkeit (2.4) erhält man damit:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_i(\mathbf{r}) | \Phi_j(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{V_0} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} F_{i\mathbf{k}}^n F_{j\mathbf{k}'}^m V \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} U_{\mathbf{G}}^n U_{\mathbf{G}'}^m V_0 \delta_{\mathbf{G}', \mathbf{G}} \\ &= \sum_n \left[\int_V d^3 r f_i^n(\mathbf{r})^* f_j^n(\mathbf{r}) \right] = \delta_{i,j} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Dieser kurze Einschub wurde vor allem wegen der darin vorkommenden Auswertung der Delta-Distribution über die Definition der Wellenvektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' sowie \mathbf{G} und \mathbf{G}' eingefügt. Diese Argumentation wird auch später bei der Berechnung der Matrixelemente von Bedeutung sein.

Damit kann man sich wieder dem eigentlichen Problem zuwenden. Mit dem Ansatz (2.2) wird der kinetischen Anteil der Schrödinger-Gleichung (2.1) zur üblichen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Gleichung:

$$T\Phi(\mathbf{r}) = \sum_n \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \Delta f^n(\mathbf{r}) - \sum_m \frac{i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{nm} \cdot \nabla f^m(\mathbf{r}) + \sum_m T_{nm} f^m(\mathbf{r}) \right] u_0^n(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

Dabei wurde die Vollständigkeit der Basisfunktionen innerhalb einer Gitterzelle ausgenutzt und der Impuls- und der Laplace-Operator in den Basisfunktionen entwickelt:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}_{nm} &= \frac{1}{V_0} \int_{GZ} d^3\mathbf{r} u_0^n(\mathbf{r})^* \mathbf{p} u_0^m(\mathbf{r}) \\ T_{nm} &= \frac{1}{V_0} \int_{GZ} d^3\mathbf{r} u_0^n(\mathbf{r})^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \right) u_0^m(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (2.10)$$

Die Behandlung des Kristallpotentialterms $V\Phi$ ist wesentlich komplizierter, da eine Entwicklung in ebenen Wellen sowohl Wellenvektoren innerhalb als auch außerhalb der Brillouin-Zone beinhaltet. Dabei treten nichtlokale Potentialterme der Form

$$\left[\sum_m \int d^3\mathbf{r}' V_{nm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f^m(\mathbf{r}') \right] u_0^n(\mathbf{r}) \quad (2.11)$$

auf. Die Nichtlokalität des Potentials kann jedoch nach Burt [20] für langsam veränderliche Funktionen ohne wesentlichen Fehler vernachlässigt werden.

Des Weiteren muss die Behandlung der Grenzflächen geklärt werden, die innerhalb der Halbleiter-Heterostruktur zwischen Quantenfilm und dem Barrierenmaterial auftreten. Der Einfluss dieser Grenzflächen sollte aber nur für die direkt angrenzenden Einheitszellen zu wesentlichen Abweichungen vom Kristallpotential des lokalen Materials führen. Ein sprung-

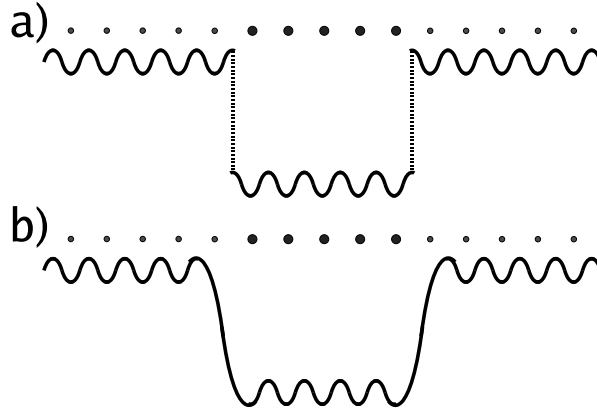


Abbildung 2.1: Sprunghafter (a) und fiktiver stetiger (b) Potentialverlauf zwischen Quantenfilm und Barrierenmaterial

artiger, unstetiger Übergang des Potentials an der Grenzfläche

$$V(\mathbf{r}) \simeq \sum_A \theta_A(\mathbf{r}) V_i(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad \theta_A(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \mathbf{r} \text{ in Volumen A liegt} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.12)$$

sollte daher eine akzeptable Näherung darstellen. Das Potential nimmt folglich innerhalb der homogenen Volumina immer den Wert des lokalen Mediums an. Damit erhält man folgendes gekoppeltes Gleichungssystem für die Einhüllenden $f^n(\mathbf{r})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta f^n(\mathbf{r}) - \sum_m \frac{i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{nm} \cdot \nabla f^m(\mathbf{r}) + \sum_m H_{nm}(\mathbf{r}) f^m(\mathbf{r}) = E f^n(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

$$\text{mit } H_{nm}(\mathbf{r}) = T_{nm} + V_{nm}(\mathbf{r})$$

Hierbei nehmen die Matrixelemente $H_{nm}(\mathbf{r})$ jeweils die lokalen Werte des jeweiligen Materials an. Eine Ortsabhängigkeit der Impulsmatrixelemente wurde hingegen nicht berücksichtigt. An dieser Stelle teilt man das System der Basisfunktionen in zwei Gruppen auf. Die erste Gruppe (S) umfasst alle Funktionen, deren Eigenwerte H_{nn} energetisch nahe der zu berechnenden Eigenenergie E liegen, die zweite Gruppe (R) umfasst alle anderen Funktionen. Damit sollte die Gruppe S die dominanten Beiträge zur Bandstruktur liefern, während die Beiträge der Gruppe R störungstheoretisch betrachtet werden können.

Da die Energiedifferenz $E - H_{rr}$ wesentlich größer als der kinetische Anteil ($\propto \Delta f_r$), bzw. alle Korrekturen durch die Wechselwirkung zwischen Basisfunktionen der Gruppe R über den Impulsoperator π_{nm} oder das Potential $H_{nm}(\mathbf{r})$ sein sollte, kann die Gleichung für die nicht dominant beitragenden Einhüllenden $f^r(\mathbf{r})$ mit $r \in R$ in folgender Weise approximiert werden:

$$f^r(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} \sum_{m \in S} \left[\frac{-i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{rm} \cdot \nabla f^m(\mathbf{r}) + H_{rm}(\mathbf{r}) f^m(\mathbf{r}) \right] \quad (2.14)$$

Eine solche Näherung ist zwar ziemlich grob, aber vollkommen ausreichend, um bei der Berechnung der dominanten Einhüllenden $f^s(\mathbf{r})$ verwendet zu werden. Die explizite Form der Einhüllenden $f^r(\mathbf{r})$ spielt zudem keine Rolle, da die nichtdominanten Energiekorrekturen später durch effektive Parameter dargestellt werden sollen.

Die Näherung (2.14) kann demnach ohne Bedenken in die Bestimmungsgleichung der dominanten Beiträge $f^s(\mathbf{r})$ mit $s \in S$ eingesetzt werden:

$$\begin{aligned} E f^s(\mathbf{r}) = & -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{m \in S} \nabla \cdot [\boldsymbol{\gamma}_{sm}^R(\mathbf{r}) \cdot \nabla f^m(\mathbf{r})] \\ & + \sum_{m \in S} [H_{sm}(\mathbf{r}) + \delta H_{sm}^R(\mathbf{r})] f^m(\mathbf{r}) \\ & - \sum_{\substack{m \in S \\ r \in R}} \frac{i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{sr} \cdot \nabla \left[\frac{H_{rm}(\mathbf{r})}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} \right] f^m(\mathbf{r}) \\ & - \sum_{m \in S} \frac{i\hbar}{m_0} [\boldsymbol{\pi}_{sm} + \delta \boldsymbol{\pi}_{sm}^R(\mathbf{r})] \cdot \nabla f^m(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.15)$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\gamma}_{sm}^R(\mathbf{r})$ ein verallgemeinerter (inverser) Effektive-Masse-Tensor, $\delta H_{sm}^R(\mathbf{r})$ ein Energie-Tensor sowie $\boldsymbol{\pi}_{sm}^R(\mathbf{r})$ ein Impuls-Tensor:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\gamma}_{sm}^R(\mathbf{r}) &= I \delta_{sm} + \frac{2}{m} \sum_{r \in R} \boldsymbol{\pi}_{sr} \frac{1}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} \boldsymbol{\pi}_{rm} \\ \delta H_{sm}^R(\mathbf{r}) &= \sum_{r \in R} H_{sr}(\mathbf{r}) \frac{1}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} H_{rm}(\mathbf{r}) \\ \delta \boldsymbol{\pi}_{sm}^R(\mathbf{r}) &= \sum_{r \in R} \frac{\boldsymbol{\pi}_{sr} H_{rm}(\mathbf{r}) + H_{sr}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\pi}_{rm}}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Der Gradient $\nabla[H_{rm}(\mathbf{r})/(E - H_{rr}(\mathbf{r}))]$ im dritten Term von (2.15) sollte nur in der Nähe der Grenzflächen wesentliche Beiträge liefern und zudem wegen der Energiedifferenz im Nenner klein sein. δH und $\delta \boldsymbol{\pi}$ sind laut [87, 20] Energie- bzw. Impulskorrekturen erster Ordnung und

werden im Folgenden wie in vielen anderen Arbeiten vernachlässigt. Eine Diskussion über die Einflüsse einiger dieser Terme bei der Bandstrukturrechnung liefert Referenz [40]. Damit reduziert sich (2.15) auf folgende kompakte Form:

$$\begin{aligned}
 E f^s(\mathbf{r}) = & -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{m \in S} \nabla \cdot [\gamma_{sm}^R(E, \mathbf{r}) \cdot \nabla f^m(\mathbf{r})] \\
 & - \sum_{m \in S} \frac{i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{sm} \cdot \nabla f^m(\mathbf{r}) + \sum_{m \in S} H_{sm}(\mathbf{r}) f^m(\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Wählt man wie in den meisten Arbeiten als Basis $u_0^n(\mathbf{r})$ die zum Γ -Punkt des Quantenfilm-Materials gehörenden Bloch-Funktionen, so reduziert sich $H_{sm}(\mathbf{r})$ auf die dortigen lokalen Bandenergien $\delta_{sm} V_{conf}^s$. Ebenso können für den Effektive-Masse-Tensor γ_{sm} sowie den Impuls-Tensor $\boldsymbol{\pi}_{sm}$ innerhalb des Quantenfilms die Werte des homogenen Volumenmaterials verwendet werden. Da sich das Barrieren-Material jedoch in seiner atomaren Zusammensetzung vom Quantenfilm unterscheidet, sind die gewählten Basisfunktionen dort keine Eigenlösungen mehr. In dieser Arbeit sind jedoch nur die im Quantenfilm gebundenen Lösungen von Bedeutung. Diese fallen innerhalb der Barrieren exponentiell ab. Nähert man daher H_{sm} und γ_{sm} innerhalb der Barrieren mit den Werten eines homogenen Barrieren-Materials, sollte der Fehler gering ausfallen. Die damit ortsabhängige Energie $H_{sm}(\mathbf{r}) = \delta_{sm} V_{conf}^s(\mathbf{r})$ bildet das Confinement-Potential für die Elektronen in den Valenz- und Leitungsbändern.

Die bisher eingeführten allgemeinen Gleichungen sollen nun im Folgenden auf ein spezielles System angewendet werden. Dafür werden im nächsten Abschnitt zunächst ein paar für III-V-Halbleiter typische Anpassungen vorgenommen, um damit in den darauf folgenden Abschnitten unter Ausnutzung der vorliegenden Symmetrien die Bandstruktur und Wellenfunktionen der Leitungs- und Valenzbänder zu berechnen.

2.2.1 Luttinger-Parameter: Effektive-Masse-Tensor

Die in dieser Arbeit untersuchte Halbleiter-Heterostruktur ist ein $Ga_x In_{1-x} As$ -Quantenfilm zwischen $Ga_x Al_{1-x} As$ -Barrieren. Beide Materialien sind direkte Halbleiter und haben eine Zinkblende-Struktur. In diesem Materialsystem sind die Basisfunktionen der Gruppe S die beiden s-artigen Leitungsband-Funktionen mit einem Gesamtdrehimpuls $J = 1/2$, einem Bahndrehimpuls $L = 0$ und Spin $S = 1/2$

$$\begin{aligned}
 u_0^{cb1}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{1}{2}, L = 0, m_J = +\frac{1}{2} \rangle = \langle \mathbf{r} | S \uparrow \rangle \\
 u_0^{cb2}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{1}{2}, L = 0, m_J = -\frac{1}{2} \rangle = \langle \mathbf{r} | S \downarrow \rangle \\
 \text{mit } \langle \mathbf{r} | S \rangle &\propto f(|\mathbf{r}|)
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

	γ_1	γ_2	γ_3	$\bar{\gamma}/\bar{\mu}$	$E_G(T = 0K)$	Δ_{so}
AlSb	5.18	1.19	1.97	4.05	2.386 eV	0.676 eV
AlAs	3.76	0.82	1.42	3.73	3.099 eV	0.280 eV
AlP	3.35	0.71	1.23	3.73	3.630 eV	0.070 eV
GaSb	13.4	4.70	6.00	8.23	0.812 eV	0.760 eV
GaAs	6.98	2.06	2.93	5.74	1.519 eV	0.341 eV
GaP	4.05	0.49	2.93	1.40	2.350 eV	0.080 eV
InSb	34.8	15.5	16.5	32.0	0.235 eV	0.810 eV
InAs	20.0	8.50	9.20	25.3	0.417 eV	0.390 eV
InP	5.08	1.60	2.10	7.40	1.424 eV	0.108 eV

Tabelle 2.1: Material-Parameter III-V-Halbleiter [144]. Für Arsenide und Antimonide können die "split-off"-Bänder in der Regel vernachlässigt werden.

sowie die p-artigen Valenzband-Funktionen mit einem Gesamtdrehimpuls $J = \{3/2, 1/2\}$ bei einem Bahndrehimpuls von $L = 1$ sowie Spin $S = 1/2$

$$\begin{aligned}
u_0^{hh_1}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{3}{2}, L = 1, m_J = +\frac{3}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle \mathbf{r} | (X + iY) \uparrow \rangle] \\
u_0^{lh_1}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{3}{2}, L = 1, m_J = -\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [\langle \mathbf{r} | (X - iY) \uparrow \rangle + 2\langle \mathbf{r} | Z \downarrow \rangle] \\
u_0^{so_1}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{1}{2}, L = 1, m_J = -\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\langle \mathbf{r} | (X - iY) \uparrow \rangle - \langle \mathbf{r} | Z \downarrow \rangle] \\
u_0^{so_2}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{1}{2}, L = 1, m_J = +\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\langle \mathbf{r} | (X + iY) \downarrow \rangle + \langle \mathbf{r} | Z \uparrow \rangle] \\
u_0^{lh_2}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{3}{2}, L = 1, m_J = +\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [\langle \mathbf{r} | (X + iY) \downarrow \rangle - 2\langle \mathbf{r} | Z \uparrow \rangle] \\
u_0^{hh_2}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | J = \frac{3}{2}, L = 1, m_J = -\frac{3}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle \mathbf{r} | (X - iY) \downarrow \rangle] \\
\text{mit } \langle \mathbf{r} | X \rangle &\propto x \cdot h(|\mathbf{r}|), \quad \langle \mathbf{r} | Y \rangle \propto y \cdot h(|\mathbf{r}|), \quad \langle \mathbf{r} | Z \rangle \propto z \cdot h(|\mathbf{r}|).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Die hiermit festgesetzte Reihenfolge der Basisfunktionen wird im Folgenden bei den Matrixdarstellungen der Tensoren beibehalten. Die verwendeten Abkürzungen stehen für **conduction band**, **heavy hole**, **light hole** und **split off**. Für Vergleichszwecke sei darauf hingewiesen, dass sich die hier gewählte Reihenfolge von der in der Dissertation von D.H. Marti [87] unterscheidet. Für das gewählte System ist der energetische Abstand Δ_{so} zwischen den *so*-Bändern und der Bandkante groß genug (siehe Tabelle 2.1), so dass diese des Weiteren vernachlässigt werden können.

In der gewählten Basis sind die (inversen) Effektive-Masse-Tensoren für die Leitungsbänder isotrop:

$$\gamma^{xx} = \begin{pmatrix} \gamma_c & 0 \\ 0 & \gamma_c \end{pmatrix} = \gamma^{yy} = \gamma^{zz} \quad \text{mit} \quad \gamma_c = \frac{me}{m_c} \tag{2.20}$$

Im Gegensatz dazu erhält man unter Verwendung der Luttinger-Parameter γ_1 , γ_2 und γ_3 [85] für die Valenzbänder folgende Form:

$$\gamma^{xx} = - \begin{pmatrix} \gamma_1 + \gamma_2 & -\sqrt{3}\gamma_2 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}\gamma_2 & \gamma_1 - \gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1 - \gamma_2 & -\sqrt{3}\gamma_2 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}\gamma_2 & \gamma_1 + \gamma_2 \end{pmatrix} \tag{2.21}$$

$$\gamma^{yy} = - \begin{pmatrix} \gamma_1 + \gamma_2 & \sqrt{3}\gamma_2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}\gamma_2 & \gamma_1 - \gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1 - \gamma_2 & \sqrt{3}\gamma_2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\gamma_2 & \gamma_1 + \gamma_2 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

$$\gamma^{zz} = - \begin{pmatrix} \gamma_1 - 2\gamma_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 + 2\gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1 + 2\gamma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_1 - 2\gamma_2 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

$$\gamma^{xy} = - \begin{pmatrix} 0 & +i\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 \\ -i\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +i\sqrt{3}\gamma_3 \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3}\gamma_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

$$\gamma^{yz} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & +i\sqrt{3}\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\sqrt{3}\gamma_3 \\ -i\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +i\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

$$\gamma^{zx} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{3}\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +\sqrt{3}\gamma_3 \\ -\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Nach der Definition der γ -Tensoren (2.16) gilt zudem:

$$(\gamma^{\alpha\beta})^+ = \gamma^{\beta\alpha} \quad (2.27)$$

Das negative Vorzeichen vor den Tensoren resultiert aus der Verwendung des Elektron- anstelle des Lochbildes für die Valenzbänder. Die rot markierten Luttinger Parameter werden später im Zuge der paraxialen Näherung durch einen effektiven Luttinger-Parameter $\bar{\gamma}$ ersetzt.

Aufgrund der Symmetrien der s- und p-artigen Basisfunktionen (S,X,Y,Z) sind nur folgende Impulsbeiträge ungleich Null:

$$\pi^x = \sqrt{m_0 E_p / 2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{TM-Mode}) \quad (2.28)$$

$$\pi^y = \sqrt{m_0 E_p / 2} \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{6}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{TM-Mode}) \quad (2.29)$$

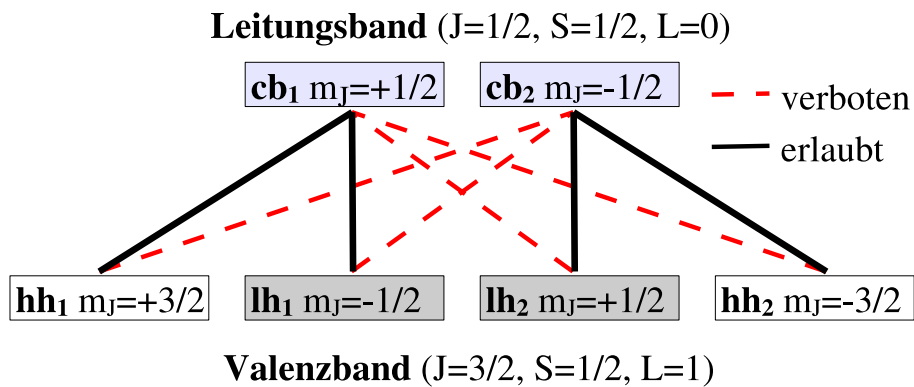


Abbildung 2.2: TM-Dipol-Auswahlregeln für die Basisfunktionen aus Gleichung (2.18) und (2.19)

$$\pi^z = \sqrt{m_0 E_P / 2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{TE-Mode}) \quad (2.30)$$

Der Parameter E_P ist dabei die Kane-Energie. Damit sorgt der Impulstensor π_{sm} in Gleichung (2.17) für eine Kopplung zwischen den Valenzband- und Leitungsband-Einhüllenden. Auch dieser Anteil soll bei der Bandstrukturrechnung näherungsweise vernachlässigt werden. Damit sind die Valenzbänder von den Leitungsbandern entkoppelt und Gleichung (2.17) reduziert sich auf folgende kompakte Form:

$$E f^s(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{m \in S} \nabla \cdot [\gamma_{sm}^R(\mathbf{r}) \cdot \nabla f^m(\mathbf{r})] + E_s(\mathbf{r}) f^s(\mathbf{r}) \quad (2.31)$$

Diese Gleichung soll nun für die Leitungs- und Valenzbänder separat ausgewertet werden. Dabei wird aufgrund der einfacheren Zusammenhänge mit den Leitungsbandern begonnen.

2.2.2 Wellenfunktionen der Leitungsband-Elektronen

Im Falle eines Quantenfilms mit Wachstumsrichtung z sollte für die weitere Verwendung der Ortsvektor \mathbf{r} in den Anteil parallel zum Quantenfilm \mathbf{r}_\parallel und den in Wachstumsrichtung z zerlegt werden. Damit ist das Material für festgehaltenes z homogen und somit k_\parallel eine gute Quantenzahl. Nach einer Fourier-Transformation innerhalb dieser ($z = \text{const}$)-Ebenen erhält man damit für die Leitungsbander aus Relation (2.31) mit

$$\left[\frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_{cb}(z)} - \frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_{cb}(z)} \frac{d}{dz} + V_{conf}^{cb} \right] f_{\lambda k_\parallel}^{cb_m}(z) = E_{\lambda k_\parallel} f_{\lambda k_\parallel}^{cb_m}(z) \quad (2.32)$$

Gleichung (6.18) aus Referenz [24]. Die Einhüllenden sind demnach unabhängig von der Spineinstellung $m = \{1, 2\}$ und reell wählbar. Da das Gleichungssystem die Leitungsband-Basisfunktionen (cb_1, cb_2) nicht koppelt, bleibt der Spin weiterhin eine gute Quantenzahl. Die Gesamtlösung setzt sich aus einer ebenen Welle, einer k_\parallel -rotationssymmetrischen, spinunabhängigen Einhüllenden sowie einer der beiden Leitungsbandfunktionen zusammen:

$$\phi_{\lambda m k_\parallel}^{cb}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel)}{L_\parallel} \cdot f_{\lambda k_\parallel}^{cb}(z) \cdot u_0^{cb_m}(\mathbf{r}) \quad \text{mit } m \in \{1, 2\} \quad (2.33)$$

An dieser Stelle soll nicht weiter auf die Leitungsbandlösungen eingegangen werden. Diese werden später im Rahmen von Symmetrieüberlegungen wieder aufgegriffen.

2.2.3 Wellenfunktionen der Valenzband-Elektronen

Die Matrixgleichung (2.31) entspricht für die Valenzbänder bis auf die Unterschiede, die aus der Verwendung des Elektronbildes resultieren, im Wesentlichen der Luttinger-Matrix aus Referenz [24]. An dieser Stelle soll nun explizit die Luttinger-Darstellung der Valenzband-Gleichung angegeben werden, da sich in dieser Form die Grundlagen der paraxialen Näherung leichter diskutieren lassen:

$$H_{Luttinger} = \begin{pmatrix} H_{hh} & -c & -b & 0 \\ -c^* & H_{lh} & 0 & b \\ -b^* & 0 & H_{lh} & -c \\ 0 & b^* & -c^* & H_{hh} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Hierbei gelten folgende Definitionen

$$\begin{aligned} H_{hh} &= -\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{hh}(z)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_{XY}^{hh}(z)} + V_{conf}^{hh}(z) \\ \text{mit } m_Z^{hh}(z) &= \frac{-m_0}{\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z)}, \quad m_{XY}^{hh}(z) = \frac{-m_0}{\gamma_1(z) + \gamma_2(z)} \\ H_{lh} &= -\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{lh}(z)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_{XY}^{lh}(z)} + V_{conf}^{lh}(z) \\ \text{mit } m_Z^{lh}(z) &= \frac{-m_0}{\gamma_1(z) + 2\gamma_2(z)}, \quad m_{XY}^{lh}(z) = \frac{-m_0}{\gamma_1(z) - \gamma_2(z)} \end{aligned} \quad (2.35)$$

für die Diagonalterme sowie

$$\begin{aligned} b &= i \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \cdot \left[\frac{d}{dz} \gamma_3(z) + \gamma_3(z) \frac{d}{dz} \right] \cdot (k_x - ik_y) \\ c &= -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \cdot [\bar{\gamma}(z)(k_x - ik_y)^2 - \bar{\mu}(z)(k_x + ik_y)^2] \\ \text{mit } \bar{\gamma}(z) &= \frac{\gamma_3(z) + \gamma_2(z)}{2}, \quad \bar{\mu}(z) = \frac{\gamma_3(z) - \gamma_2(z)}{2} \end{aligned} \quad (2.36)$$

für die Nichtdiagonalterme. Die hh - und lh -Massen sind aufgrund des verwendeten Elektronbildes negativ definiert. Als Basisfunktionen dienen die p-artigen Spin-Bahn-Eigenfunktionen aus Gleichung (2.19) in der dort vorgegebenen Reihenfolge ohne die "split-off"-Bänder. Die Bezeichnungen "heavy hole" und "light hole" richten sich nach der Größe der Valenzband-Masse in z -Richtung.

Die Heterostruktur setzt sich aus Materialien mit unterschiedlicher Gitterkonstante zusammen. Beim Wachstumsprozess wird der gesamten Struktur jedoch eine einheitliche Gitterperiodizität aufgezwungen. Die dabei entstehende Materialverspannung verschiebt die Bandkante je nachdem, ob es sich um Druck- oder Zugspannung handelt, zu höheren oder tieferen Energien. Dieser Effekt wirkt sich unterschiedlich auf die hh - und lh -Zustände aus. Berücksichtigt man daher, wie in dieser Arbeit geschehen, die Materialverspannung unterscheiden sich die Confinement-Potentiale $V_{conf}^n(z)$ und $V_{conf}^{lh}(z)$ voneinander. Auf den genauen Formalismus

soll hier aber nicht eingegangen werden, sondern auf das Buch von W.W. Chow und S.W. Koch "Semiconductor-Laser-Fundamentals" [24] als Referenz verwiesen werden.

Für die Arsenide und Antimonide unterscheiden sich die Luttinger-Parameter γ_2 und γ_3 nur geringfügig voneinander (vgl. Tab. 2.1). Demzufolge ist der effektive Parameter $\bar{\mu}$ klein im Vergleich zu $\bar{\gamma}$ und kann demnach in erster Näherung in Gleichung (2.36) vernachlässigt werden:

$$\bar{\mu} = 0 \quad \Rightarrow \quad c \simeq -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \bar{\gamma}(z)(k_x - ik_y)^2 \quad (\text{paraxiale Näherung}) \quad (2.37)$$

Diese Näherung bietet zwei Vorteile. Zum einen wird die Bandstruktur rotationssymmetrisch, wodurch eine Klassifizierung nach Raumrichtungen entfällt, zum anderen kann die Luttinger-Matrix dadurch in eine Blockdiagonalform [17] transformiert werden, die eine detailliertere Analyse der Eigenlösungen und Eigenwerte zulässt und eine numerische Lösung erleichtert:

$$\begin{aligned} \bar{H} &= U \cdot H \cdot U^+ \\ U &= \begin{pmatrix} e^{-i\lambda(\mathbf{k})} & 0 & 0 & -e^{i\lambda(\mathbf{k})} \\ 0 & e^{-i\eta(\mathbf{k})} & -e^{i\eta(\mathbf{k})} & 0 \\ 0 & e^{-i\eta(\mathbf{k})} & e^{i\eta(\mathbf{k})} & 0 \\ e^{-i\lambda(\mathbf{k})} & 0 & 0 & e^{i\lambda(\mathbf{k})} \end{pmatrix} / \sqrt{2} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Nach Ausführen der Matrixmultiplikation treten außerhalb der (2×2) -Diagonalblöcke Matrixelemente folgender Form auf, die für beliebig gewählte $k_{||}$ -Werte verschwinden müssen:

$$\begin{aligned} 0 &= k_{||} [A k_z \cos(\eta + \lambda + \xi) + B k_{||} \sin(\eta - \lambda - 2\xi)] \\ \text{mit } k_{||} &= \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \text{ und } \xi = \angle \mathbf{k}_{||}, \text{ d.h. } \mathbf{k}_{||} = \begin{pmatrix} k_{||} \cdot \cos(\xi) \\ k_{||} \cdot \sin(\xi) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Die Parameter A und B sind dabei von $k_{||}$ und k_z unabhängige Konstanten. Entsprechend lassen sich die Phasen $\lambda(\mathbf{k})$ und $\eta(\mathbf{k})$ leicht analytisch bestimmen:

$$\lambda(\mathbf{k}) =: \phi_{\Delta \mathbf{k}_{||}}^{hh} = 3(\pi/4 - \xi/2), \quad \eta(\mathbf{k}) =: \phi_{\Delta \mathbf{k}_{||}}^{lh} = -(\pi/4 - \xi/2) \quad (2.40)$$

Diese Definitionen sind mit Ausnahme von $k_{||} = 0$ eindeutig bestimmt. Die hier verwendete Darstellung der Phasen über den Winkel ξ unterscheidet sich von der Definition (5.87) aus Referenz [24], die eine Darstellung des Winkels über den Arcustangens $\text{atan}(k_x/k_y)$ verwendet. Da der Arcustangens nur im Intervall $[0, \pi]$ definiert ist, wird dadurch eine Unterscheidung der Fälle $0 \leq \xi \leq \pi$ und $\pi \leq \xi \leq 2\pi$ notwendig. Dies macht eine weitere Behandlung nur komplizierter. Somit lautet die Luttinger-Matrix:

$$\bar{H}_{\text{Luttinger}} = \begin{pmatrix} H_{hh} & R & 0 & 0 \\ R^* & H_{lh} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{lh} & R \\ 0 & 0 & R^* & H_{hh} \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

$$\text{mit } R = -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} (\bar{\gamma}(z) k_{||}^2 - 2i\gamma_3(z) \cdot k_z \cdot k_{||}), \quad k_z = -i \frac{d}{dz}$$

In dieser Darstellung wird auch die Bezeichnung paraxiale Näherung klar, da die Matrix und damit auch die Bandstruktur in der (k_x, k_y) -Ebene rotationssymmetrisch wird. Die neuen Basiszustände können den Zeilen der Transformationsmatrix U entnommen werden:

$$\begin{aligned}
\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{hh_1}(\mathbf{r}) &= [e^{-i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{hh}} \cdot u_0^{hh_1}(\mathbf{r}) - e^{i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{hh}} \cdot u_0^{hh_2}(\mathbf{r})]/\sqrt{2} \\
\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{lh_1}(\mathbf{r}) &= [e^{-i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{lh}} \cdot u_0^{lh_1}(\mathbf{r}) - e^{i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{lh}} \cdot u_0^{lh_2}(\mathbf{r})]/\sqrt{2} \\
\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{lh_2}(\mathbf{r}) &= [e^{-i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{lh}} \cdot u_0^{lh_1}(\mathbf{r}) + e^{i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{lh}} \cdot u_0^{lh_2}(\mathbf{r})]/\sqrt{2} \\
\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{hh_2}(\mathbf{r}) &= [e^{-i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{hh}} \cdot u_0^{hh_1}(\mathbf{r}) + e^{i\phi_{\Delta\mathbf{k}_\parallel}^{hh}} \cdot u_0^{hh_2}(\mathbf{r})]/\sqrt{2}
\end{aligned} \tag{2.42}$$

An dieser Stelle sei noch explizit darauf hingewiesen, dass die neuen Basiszustände bezüglich \mathbf{k}_\parallel nicht überall stetig sind. Bei einer Drehung von \mathbf{k}_\parallel um 2π , d.h. $\xi \rightarrow \xi + 2\pi$ geht der Zustand $\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{n_j}(\mathbf{r})$ in $-\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{n_j}(\mathbf{r})$ über. Diese Unstetigkeit muss im Folgenden bei der Berechnung der Matrixelemente gegebenenfalls durch geeignete Linearkombinationen von Lösungen korrigiert werden, da eine Verwendung von unstetigen Basisfunktionen zu numerischen Komplikationen führen könnte.

Durch Fourier-Transformation ($k_z \rightarrow -i d/dz$) in Confinement-Richtung liefert die Matrix (2.41) zwei fast identische Gleichungssysteme, sie sich wegen der R - und R^* -Terme nur im Vorzeichen unterscheiden:

$$\begin{aligned}
0 &= \left[\frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_{XY}^{hh}(z)} - \frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{hh}(z)} \frac{d}{dz} + V_{conf}^{hh}(z) - E_{\lambda k_\parallel} \right] \bar{f}_{\lambda k_\parallel}^{hh_m}(z) \\
&\quad - \frac{\sqrt{3}\hbar^2 k_\parallel}{2m_0} \left[\bar{\gamma}(z) k_\parallel \mp \left(\gamma_3(z) \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} \gamma_3(z) \right) \right] \bar{f}_{\lambda k_\parallel}^{lh_m}(z) \\
0 &= \left[\frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_{XY}^{lh}(z)} - \frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{lh}(z)} \frac{d}{dz} + V_{conf}^{lh}(z) - E_{\lambda k_\parallel} \right] \bar{f}_{\lambda k_\parallel}^{lh_m}(z) \\
&\quad - \frac{\sqrt{3}\hbar^2 k_\parallel}{2m_0} \left[\bar{\gamma}(z) k_\parallel \pm \left(\gamma_3(z) \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} \gamma_3(z) \right) \right] \bar{f}_{\lambda k_\parallel}^{hh_m}(z)
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Das obere Vorzeichen gilt für den $(m=1)$ - und das untere für den $(m=2)$ -Block aus (2.41). Hierbei ist $\bar{\gamma}$ der gemittelte Luttinger-Parameter der paraxialen Näherung, m_{XY}^{hh} und m_Z^{hh} sind die "heavy-hole"- und m_{XY}^{lh} und m_Z^{lh} die "light-hole"-Massen parallel und senkrecht zur Quantenfilmebene aus Gleichung (2.35). Die Kennzeichnung \bar{f} soll explizit auf die Verwendung der neuen Basisfunktionen $\bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^n(\mathbf{r})$ aus (2.42) verweisen. Das vorliegende Gleichungssystem ist symmetrisch, d.h. reell und hermitesch. Damit können die Einhüllenden analog zum Leitungsband reell gewählt werden. Die Ortsabhängigkeit der Lösungen wird abgesehen von den Basisfunktionen (2.42) erneut in z -Richtung durch die k_\parallel -rotationssymmetrischen Einhüllenden sowie in der Quantenfilm-Ebene durch eine ebenen Welle bestimmt. Für das λ_m -Valenzsubband gilt somit:

$$\bar{\phi}_{\lambda_m \mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel)}{L_\parallel} \cdot \sum_{n=\{hh, lh\}} \bar{f}_{\lambda k_\parallel}^{n_m}(z) \cdot \bar{u}_{\mathbf{k}_\parallel}^{n_m}(\mathbf{r}) \quad \text{mit } m \in \{1, 2\} \tag{2.44}$$

Aufgrund des unterschiedlichen Vorzeichens im zweiten Kopplungsterm sind die hh - und lh -Anteile explizit vom Index m abhängig. Für symmetrische Quantenfilme besteht jedoch ein fester Zusammenhang, der im Folgenden diskutiert werden soll.

2.2.4 Symmetrische Quantenfilme

Symmetrien sind wichtige System-Eigenschaften, mit denen sich die Bearbeitung eines physikalischen Problems enorm vereinfachen lässt. Bisher wurde bei der Beschreibung der Heterostruktur nur oberflächlich auf die für den Quantenfilm und die Barrieren verwendeten Materialien eingegangen. Strukturen mit zwei unterschiedlichen Barrieren oberhalb und unterhalb des Quantenfilms werden im Folgenden als asymmetrisch, Strukturen mit einheitlichen Barrieren demzufolge als symmetrisch bezeichnet (vgl. Abbildung 2.2.4). In dieser Arbeit werden

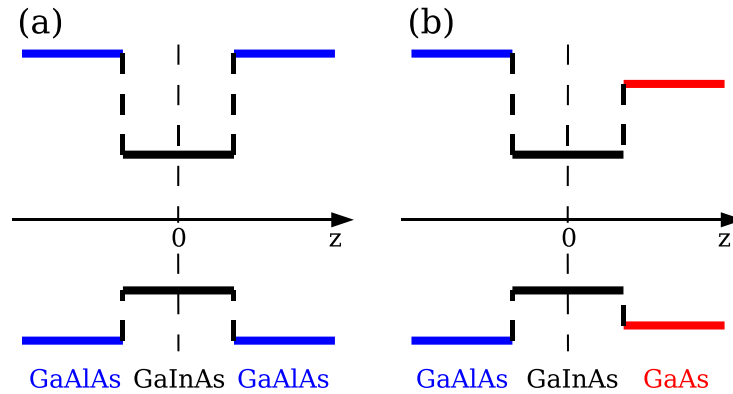


Abbildung 2.3: Potentialverlauf für (a) einen symmetrischen und (b) einen asymmetrischen $Ga_xIn_{1-x}As$ -Quantenfilm zwischen $Ga_xAl_{1-x}As$ -Barrieren

nur symmetrische Quantenfilme betrachtet, um die Problemstellung durch symmetriebedingte Auswahlregeln vereinfachen zu können.

Legt man die ($z=0$)-Ebene genau in die Mitte des Quantenfilms, wie in Abbildung 2.3 dargestellt, so sind alle ortsabhängigen Materialparameter wie z.B. die Luttinger-Parameter $\gamma(z)$ z -symmetrisch, d.h. $\gamma(z) = \gamma(-z)$. Nach dieser Festlegung kann man nun die einzelnen Kopplungsterme aus Gleichung (2.32) und (2.43) nach deren Parität klassifizieren. Die homogenen Lösungen haben eine eindeutige z -Parität, da die entsprechenden Anteile der Hamiltonoperatoren (2.32) und (2.43) mit dem Paritätsoperator vertauschen:

$$\begin{aligned}
 \left[-\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{cb}(z)} \frac{d}{dz} + V_{conf}^{cb}(z) - E_{hom,n}^{cb} \right] \Psi_n^{cb}(z) &= 0 \\
 \left[-\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{hh}(z)} \frac{d}{dz} + V_{conf}^{hh}(z) - E_{hom,n}^{hh} \right] \Psi_n^{hh}(z) &= 0 \\
 \left[-\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_Z^{lh}(z)} \frac{d}{dz} + V_{conf}^{lh}(z) - E_{hom,n}^{lh} \right] \Psi_n^{lh}(z) &= 0
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Damit sind die zugehörigen Lösungen abwechselnd z -symmetrisch und z -antisymmetrisch, beginnend mit einem symmetrischen Grundzustand. Zudem lassen sich reelle Lösungsfunktionen finden.

In den weiteren Überlegungen sollen nun zunächst die Leitungsbandsymmetrien analysiert werden. Der kinetische Anteil parallel zum Quantenfilm

• (cb-cb)-Kopplungsterme

$$H_{cb,n_2}^{cb,n_1} = E_{hom,n_1}^{cb} \cdot \delta_{n_1,n_2} + \int \Psi_{n_1}^{cb}(z) \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{XY}^{cb}(z)} \Psi_{n_2}^{cb}(z) dz \tag{2.46}$$

liefert nur Beiträge für Funktionen gleicher Parität. Damit haben die Leitungsbandlösungen eine eindeutige Parität, die Wellenfunktionen (2.33) sind somit entweder symmetrisch oder antisymmetrisch. Die Lösungen werden in zwei Gruppen aufgeteilt, in die Entartungsgruppen U und L:

$$\begin{aligned}
\phi_{\lambda_U \mathbf{k}_\parallel}^{cb}(\mathbf{r}) &= \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel)}{L_\parallel} S_{\lambda k_\parallel}^{cb}(z) \cdot u_0^{cb_1}(\mathbf{r}) \\
\phi_{\lambda_U \mathbf{k}_\parallel}^{cb}(\mathbf{r}) &= \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel)}{L_\parallel} A_{\lambda k_\parallel}^{cb}(z) \cdot u_0^{cb_2}(\mathbf{r}) \\
\phi_{\lambda_L \mathbf{k}_\parallel}^{cb}(\mathbf{r}) &= \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel)}{L_\parallel} S_{\lambda k_\parallel}^{cb}(z) \cdot u_0^{cb_2}(\mathbf{r}) \\
\phi_{\lambda_L \mathbf{k}_\parallel}^{cb}(\mathbf{r}) &= \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel)}{L_\parallel} A_{\lambda k_\parallel}^{cb}(z) \cdot u_0^{cb_1}(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Dabei werden die symmetrischen Einhüllenden mit "S" und die antisymmetrischen mit "A" gekennzeichnet. In die Gruppe U werden alle Lösungen mit symmetrischer Einhüllender und Spin \uparrow sowie die mit antisymmetrischer Einhüllender und Spin \downarrow eingeordnet. Entsprechend umfasst Gruppe L alle anderen Lösungen, d.h. die mit symmetrischer Einhüllender und Spin \downarrow sowie die mit antisymmetrischer Einhüllender und Spin \uparrow . Die an dieser Stelle noch recht willkürlich wirkende Einteilung wurde im Vorgriff auf die in Abschnitt 2.3.1 hergeleiteten optischen Auswahlregeln der TM-Mode angepasst.

Im Folgenden sollen nun auch die Valenzbandlösungen jeweils einer der beiden Gruppen zugeordnet werden. Die Untersuchung der Valenzbänder ist nicht zuletzt aufgrund der aufwendigeren Struktur von Gleichung (2.43) geringfügig komplizierter. Im Gegensatz zu den Leitungsbandern ist für die gesamte Wellenfunktion keine einheitliche z-Parität zu erwarten. Es soll jedoch gezeigt werden, dass man dennoch Lösungen finden kann, bei denen zumindest jede Einhüllende eine eindeutige Parität aufweist. Entwickelt man Gleichung (2.43) analog zur Leitungsband-Rechnung in den homogenen reellen Valenzband-Lösungen, so findet man vier Kopplungsterme:

- **(hh-hh)-Kopplungsterme**

$$H_{hh,n_2}^{hh,n_1} = E_{hom,n_1}^{hh} \cdot \delta_{n_1,n_2} + \int \Psi_{n_1}^{hh}(z) \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_{XY}^{hh}(z)} \Psi_{n_2}^{hh}(z) dz \tag{2.48}$$

- **(lh-lh)-Kopplungsterme**

$$H_{lh,n_2}^{lh,n_1} = E_{hom,n_1}^{lh} \cdot \delta_{n_1,n_2} + \int \Psi_{n_1}^{lh}(z) \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_{XY}^{lh}(z)} \Psi_{n_2}^{lh}(z) dz \tag{2.49}$$

- **(hh-lh)-Kopplungsterme**

$$\begin{aligned}
H_{lh,n_2}^{hh,n_1}(a) &= c_1 k_\parallel^2 \int \Psi_{n_1}^{hh}(z) \bar{\gamma}(z) \Psi_{n_2}^{lh}(z) dz \quad \text{mit } c_1 = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \\
H_{lh,n_2}^{hh,n_1}(b) &= c_1 k_\parallel \int \gamma_3(z) \left[\Psi_{n_1}^{hh}(z) \frac{d}{dz} \Psi_{n_2}^{lh}(z) - \Psi_{n_2}^{lh}(z) \frac{d}{dz} \Psi_{n_1}^{hh}(z) \right] dz
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Im vierten Kopplungsterm wurde eine Ableitung des unstetigen effektiven Luttinger-Parameters mit Hilfe einer partiellen Integration vermieden.

Für den symmetrischen Quantenfilm liefern die ersten drei Kopplungsintegrale nur Beiträge für Wellenfunktionen gleicher Parität, das letzte Kopplungsintegral aufgrund der z-Ableitung

hingegen nur für Wellenfunktionen unterschiedlicher Parität. Damit ist eine einheitliche Parität aller Einhüllender ausgeschlossen. Der vierte Term hat gemäß Gleichung (2.43) je nach Zugehörigkeit zum oberen oder unteren Teil der Blockdiagonalmatrix ein anderes Vorzeichen. Wie sich zeigen wird, hat dieses Vorzeichen in symmetrischen Quantenfilmen bei der Berechnung der Bandstruktur keinen Einfluss, führt jedoch zu unterschiedlichen Lösungsfunktionen. Bisher wurde angedacht, bei der Entwicklung beider Blöcke dieselben reellen homogenen Lösungen zu verwenden. Diese sind jedoch nur bis auf eine Phase eindeutig bestimmt. Aufgrund dieser freien Phasenwahl könnte man nun alle antisymmetrischen, homogenen Lösungen, die bei der Entwicklung des unteren Blocks verwendet werden, mit dem Faktor (-1) multiplizieren. Damit würden sich die antisymmetrischen Entwicklungsfunktionen beider Blöcke im Vorzeichen unterscheiden. Eine solche Phasenwahl erhält das Vorzeichen der ersten drei Kopplungsterme, da hier nur Funktionen gleicher Parität beitragen, und wechselt das Vorzeichen des letzten Terms. Das blockspezifische Vorzeichen kann demnach durch eine geeignete Wahl der zu den homogenen Lösungen gehörenden Phasenfaktoren kompensiert werden. Damit bleibt die Entartung der Bänder im symmetrischen Fall erhalten.

Daher ist es auch nicht verwunderlich, dass die Eigenlösungen beider Blöcke einen festen Zusammenhang haben. Aus der Mathematik ist bekannt, dass jede beliebige Funktion in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil zerlegbar ist. Berücksichtigt man die obigen Überlegungen, können sich die Einhüllenden beider Blöcke abgesehen von einer beliebig wählbaren Phase nur im Vorzeichen des antisymmetrischen Anteils unterscheiden:

$$\begin{aligned}\bar{f}_{\lambda k_{ii}}^{n1}(Z) &= S_{\lambda k_{ii}}^n(Z) + A_{\lambda k_{ii}}^n(Z) \\ \bar{f}_{\lambda k_{ii}}^{n2}(Z) &= S_{\lambda k_{ii}}^n(Z) - A_{\lambda k_{ii}}^n(Z) \quad n \in \{hh, lh\}\end{aligned}\tag{2.51}$$

Hierbei steht die Funktion $S_{\lambda k_{ii}}^n(Z)$ für den blockunabhängigen symmetrischen und $A_{\lambda k_{ii}}^n(Z)$ für den blockunabhängigen antisymmetrischen Anteil.

Wie sich zeigen lässt, sind die Symmetrieüberlegungen in Einklang mit Gleichung (2.41). Fouriertransformiert man nämlich die Darstellung (2.51), liefert der symmetrische Anteil den Realteil und der antisymmetrische Anteil den Imaginärteil

$$\begin{aligned}\bar{f}_{\lambda k_{ii}}^{nm}(k_z) &= \int S_{\lambda k_{ii}}^n(Z) \cos(-k_z \cdot Z) dz \quad (\text{Realteil}) \\ &\pm i \int A_{\lambda k_{ii}}^n(Z) \sin(-k_z \cdot Z) dz \quad (\text{Imaginärteil}),\end{aligned}\tag{2.52}$$

womit für den symmetrischen Fall

$$\bar{f}_{\lambda k_{ii}}^{n2}(k_z) = \bar{f}_{\lambda k_{ii}}^{n1}(k_z)^*\tag{2.53}$$

gelten muss. Damit wird der untere Block der Matrix (2.41) in den komplex konjugierten oberen Block überführt. Der Eigenwert E_λ ist somit zweifach entartet, was indirekt die Richtigkeit der vorangegangenen Symmetrieüberlegungen bestätigt.

Die Praxis zeigt, dass die Ausnutzung von Symmetrien Probleme wesentlich vereinfachen kann. Im Gegensatz zu den Leitungsbändern weisen die Valenzband-Einhüllenden noch keinerlei Symmetrien auf, was sich jedoch durch eine geschickte Linearkombination der entarte-

ten Lösungen (2.44) korrigieren lässt:

$$\begin{aligned}
\phi_{\lambda_U \mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) &= e^{+i\chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel}} \left[\bar{\phi}_{\lambda(m=1)\mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) + \bar{\phi}_{\lambda(m=2)\mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) \right] / \sqrt{2} \\
&= \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel)}{L_\parallel} \sum_{n=\{hh, lh\}} S_{\lambda k_\parallel}^n(Z) \exp(-i(\phi_{\Delta \mathbf{k}_\parallel}^n - \chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel})) u_0^{n1}(\mathbf{r}) \\
&\quad - \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel)}{L_\parallel} \sum_{n=\{hh, lh\}} A_{\lambda k_\parallel}^n(Z) \exp(+i(\phi_{\Delta \mathbf{k}_\parallel}^n + \chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel})) u_0^{n2}(\mathbf{r}) \\
\phi_{\lambda_L \mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) &= e^{-i\chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel}} \left[\bar{\phi}_{\lambda(m=1)\mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) - \bar{\phi}_{\lambda(m=2)\mathbf{k}_\parallel}^{vb}(\mathbf{r}) \right] / \sqrt{2} \\
&= \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel)}{L_\parallel} \sum_{n=\{hh, lh\}} A_{\lambda k_\parallel}^n(Z) \exp(-i(\phi_{\Delta \mathbf{k}_\parallel}^n + \chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel})) u_0^{n1}(\mathbf{r}) \\
&\quad - \frac{\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel)}{L_\parallel} \sum_{n=\{hh, lh\}} S_{\lambda k_\parallel}^n(Z) \exp(+i(\phi_{\Delta \mathbf{k}_\parallel}^n - \chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel})) u_0^{n2}(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Die Gruppen U und L sind die schon für die Leitungsbänder eingeführten Entartungsgruppen. Damit wird jeder Basisfunktion $u_0^n(\mathbf{r})$ eine Confinement-Funktion mit eindeutiger z-Parität sowie eine Phase zugeordnet. Eine einheitliche Parität für alle vier Anteile ist aufgrund des vierten Kopplungsterms nicht realisierbar. Durch die zusätzliche \mathbf{k}_\parallel -abhängige Phase $\chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel}$ kann die Unstetigkeit der Wellenfunktionen, die am Γ -Punkt aufgrund der dortigen undefiniertheit der Phasen $\phi_{\Delta \mathbf{k}_\parallel}^n$ auftritt, korrigiert werden. Am Γ -Punkt entsprechen die Lösungen jedoch jeweils einer der homogenen Einhüllenden aus (2.45), da alle Kopplungsterme proportional zum Betrag des Wellenvektors k_\parallel sind. Folglich ist dort nur eine der vier Einhüllenden ungleich Null. Ist diese Funktion eine symmetrische hh-Einhüllende, setzt man $\chi_{\lambda \mathbf{k}_\parallel} = \phi_{\Delta \mathbf{k}_\parallel}^{hh}$ und erhält eine überall stetige Wellenfunktion. In allen anderen Fällen verfährt man analog. Somit liegen nun sowohl die Valenzband- als auch die Leitungsbandsfunktionen in der optimal zu erreichenden Symmetrie vor. Analoge Symmetriebetrachtungen über gruppentheoretische Argumente findet man in Referenz [87]. Darin werden die hier angestellten Symmetrieüberlegungen bestätigt. In dieser Arbeit wurde trotz der Eleganz und Kürze des gruppentheoretischen Ansatzes das hier verwendete Verfahren vorgezogen, da es neben den richtigen Symmetrien auch weitere Informationen zur Berechnung, Winkelabhängigkeit und Form der Einhüllenden liefert.

Unabhängig von der Einföhrungsweise der Symmetrieeigenschaften können diese nun im Folgenden bei der Berechnung der Licht-Materie-, Coulomb- und Elektron-Phonon-Matrixelemente mehrfach ausgenutzt werden. Zuvor soll der Abschnitt zur $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie noch durch einige Bemerkungen zu asymmetrischen Quantenfilmen abgeschlossen werden.

2.2.5 Bemerkungen zum asymmetrischen Quantenfilm

Die vorangegangenen Überlegungen wurden alle für symmetrische Quantentöpfe durchgeführt. Im Folgenden soll anhand eines einfachen Beispiels gezeigt werden, wie sich der asymmetrischen vom symmetrischen Fall unterscheidet. Dafür nimmt man von den homogenen hh- und lh-Eigenfunktionen (2.45) jeweils nur den Grundzustand und diagonalisiert damit das gekoppelte Gleichungssystem (2.43). Beide homogene Lösungen haben keine eindeutige z-Parität mehr, sie sind also weder symmetrisch, noch antisymmetrisch. Die zugehörige

Eigenwertgleichung lässt sich leicht analytisch lösen:

$$\det \begin{pmatrix} H_{hh}^{hh} - \lambda & H_{hh}^{lh}(a) \pm H_{lh}^{hh}(b) \\ H_{hh}^{lh}(a) \pm H_{lh}^{hh}(b) & H_{hh}^{hh} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$\lambda_1 = [H_{hh}^{hh} + H_{lh}^{lh}]^2/2 + \sqrt{[H_{hh}^{hh} - H_{lh}^{lh}]^2/4 + [H_{hh}^{lh}(a) \pm H_{lh}^{hh}(b)]^2}$$

$$\lambda_2 = [H_{hh}^{hh} + H_{lh}^{lh}]^2/2 - \sqrt{[H_{hh}^{hh} - H_{lh}^{lh}]^2/4 + [H_{hh}^{lh}(a) \pm H_{lh}^{hh}(b)]^2}$$
(2.55)

Die Koeffizienten sind in Gleichung (2.48)–(2.50) definiert, wobei die Indizes $n_1 = n_2 = 1$ weggelassen worden sind. Da die reellen homogenen Lösungen bis auf eine Phase (± 1) eindeutig bestimmt sind, haben beide Blöcke, sofern nicht gerade $H_{lh}^{hh}(b) = 0$ gilt, unterschiedliche Eigenwerte. Für den symmetrischen Fall ist die Bedingung $H_{lh}^{hh}(b) = 0$ grundsätzlich erfüllt, da der hh - und der lh -Grundzustand dieselbe Parität aufweisen. Für den asymmetrischen Fall verschwindet der Beitrag $H_{lh}^{hh}(b)$ im Allgemeinen nicht. Damit lassen sich auch keine Paritätsauswahlregeln bestimmen, welche die Berechnung der Matrixelemente und die Lösung der Heisenberg-Gleichungen wesentlich vereinfachen würden.

Wenn die Entartung im nicht symmetrischen Fall schon bei diesem einfachen Modell aufgehoben wird, sollte das ebenso für eine Entwicklung mit beliebig vielen hh - und lh -Funktionen gelten. Analytisch lässt sich das jedoch nicht mehr so einfach und anschaulich zeigen.

2.3 Matrixelemente und Auswahlregeln

Im vorigen Abschnitt wurde mit Hilfe der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie eine Methode vorgestellt, mit der sich die Elektronen-Wellenfunktionen in der Nähe des Zonenzentrums (Γ -Punktes) von III-V-Halbleitern berechnen lassen. Im Folgenden sollen auf dieser Basis Matrixelemente für die Wechselwirkung mit einem Lichtfeld sowie die Coulomb- und Elektron-Phonon-Matrixelemente berechnet werden, die bei der Aufstellung der Bewegungsgleichungen benötigt werden. Dafür werden zunächst einige Notationen eingeführt:

$$\begin{aligned} a_{\lambda \mathbf{k}_i}^+, a_{\lambda \mathbf{k}_i} & \text{ Erzeuger, Vernichter von Elektronen} \\ c_{\lambda \mathbf{k}_i}^+, c_{\lambda \mathbf{k}_i} & \text{ Erzeuger, Vernichter von Leitungsband-Elektronen} \\ v_{\lambda \mathbf{k}_i}^+, v_{\lambda \mathbf{k}_i} & \text{ Erzeuger, Vernichter von Valenzband-Elektronen} \\ b_{\mathbf{k}_i}^+, b_{\mathbf{k}_i} & \text{ Erzeuger, Vernichter von LO-Phononen} \end{aligned}$$
(2.56)

Anstelle der Leitungsband- und Valenzbandlösungen (2.47) und (2.54) wird für die folgenden Herleitungen eine allgemeine Darstellung gewählt

$$\phi_{\lambda \mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i)}{L_i} \sum_n f_{\lambda \mathbf{k}_i}^n(z) \cdot u_0^n(\mathbf{r}),$$
(2.57)

in der die \mathbf{k}_i -abhängigen Einhüllenden auch die Phasen beinhalten. Dadurch wird eine unnötige Unterscheidung zwischen Valenzband- und Leitungsband-Funktionen vermieden. Die Kennung λ enthält sowohl die Bandquantenzahl als auch den Entartungsindex $m \in \{U, L\}$, sofern dieser nicht explizit angegeben wird. Die genaue Form der Wellenfunktionen ergibt sich jeweils aus dem Zusammenhang. Der Bandstrukturanteil berücksichtigt neben den im vo-

rigen Abschnitt berechneten Elektron-Eigenenergien noch die dispersionslosen LO-Phonon-Eigenenergien:

$$H_0 = \sum_{\lambda_m, \mathbf{k}_i} E_{\lambda_m \mathbf{k}_i}^c c_{\lambda_m \mathbf{k}_i}^+ c_{\lambda_m \mathbf{k}_i} + \sum_{\lambda_m, \mathbf{k}_i} E_{\lambda_m \mathbf{k}_i}^v v_{\lambda_m \mathbf{k}_i}^+ v_{\lambda_m \mathbf{k}_i} + \sum_{\mathbf{k}} E_{LO}^p b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \quad (2.58)$$

Vor der Bearbeitung der wesentlich komplexeren Vielteilchen-Wechselwirkungen sollen zunächst die optischen Matrixelemente berechnet werden.

2.3.1 Optische Inter- und Intradband-Matrixelemente

Auf der Ebene einer Ein-Teilchen-Theorie kann der Hamilton-Operator für die Wechselwirkung von Festkörper-Elektronen mit einem Lichtfeld in einen Bandstrukturanteil H_0 und den Wechselwirkungsanteil H_I zerlegt werden. Die genaue Form von H_I richtet sich nach der gewählten Eichung. Bei Verwendung der Dipol-Näherung für H_I hat man üblicher Weise die Wahl zwischen der Längen- und Geschwindigkeitseichung:

$$H_I = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} \quad (\text{Längeneichung}) \quad (2.59)$$

$$H_I = \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + e^2 \mathbf{A}^2 / 2m \quad (\text{Geschwindigkeitseichung}) \quad (2.60)$$

Sofern das Lichtfeld als klassisch angesetzt wird, liefert der \mathbf{A}^2 -Term beim Aufstellen der Heisenberg-Gleichungen keinen Beitrag.

Bei Wahl der Geschwindigkeitseichung entspricht die Licht-Materie-Wechselwirkung dem Ansatz der minimalen Kopplung aus Abschnitt 1.2. Beide Ansätze sollten äquivalent sein, da der Unterschied nur in der verwendeten Eichtransformation besteht. Die wenigsten Probleme lassen sich jedoch ohne weitere Näherungen lösen. Demzufolge werden die berechneten Ergebnisse dennoch von der Wahl der Eichung abhängen, sofern eichtypische Näherungen verwendet werden.

Bei den bisher in Marburg zu Spin- und Ladungsströmen veröffentlichten theoretischen Arbeiten [30, 29, 91] wurde die Längeneichung verwendet. Dabei treten nach Blount [13] Intradband-Beschleunigungsterme proportional zu $\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}$ in den Halbleiter-Bloch-Gleichungen auf. Zunächst wurde in Fortführung der bisher veröffentlichten Arbeiten angedacht, auch für das $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Modell die Längeneichung zu verwenden. Die bisher veröffentlichten Untersuchungen beruhen jedoch auf einfachen Zwei-Band-Modellen idealer eindimensionaler bzw. zweidimensionaler Halbleiter. Die Matrixelemente solcher Systeme sind rotationssymmetrisch, die in dieser Arbeit verwendeten Matrixelemente hingegen weisen eine komplexe Phasenabhängigkeit auf. Das natürlich dazu passende Koordinatensystem sollte ein Polargitter sein. Alle bisherigen Versuche mit der Längeneichung scheiterten an numerischen Instabilitäten der Intradband-Beschleunigung $\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}$ auf dem Polargitter. Eine Verfeinerung der Gitterauflösung hätte die numerischen Probleme unter Umständen beseitigen können, doch wäre dann eine Berücksichtigung von Coulomb- oder Elektron-Phonon-artigen Vielteilchen-Effekten nicht mehr im Bereich des numerisch Machbaren gewesen.

Die Geschwindigkeitseichung hingegen lässt sich numerisch stabil auf beliebigen Gittern (kartesisch, polar, etc.) realisieren, da anstelle von Ableitungen nur normale Inter- und Intradband-Matrixelemente auftreten. Zudem passt sie hervorragend zu der im Rahmen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung vorgestellten Theorie von Burt [20]. Verwendet man die Näherung (2.14), so lassen sich über die Luttinger-Parameter auch Beiträge der nichtdominanten Einhüllenden $f_{\lambda_m \mathbf{k}_i}^r(z)$ mit

$r \neq \{hh_1, hh_2, lh_1, lh_2, cb_1, cb_2\}$ berücksichtigen. Damit ist die Geschwindigkeitseichung keine zweite Wahl, sondern wäre aufgrund der Verbindung zur $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung wohl die erste Wahl gewesen, wenn keine Vorarbeiten existiert hätten.

Bei der Berechnung der Matrixelemente wird der Operator H_I ausgehend von (2.60) zunächst in den $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Lösungen entwickelt:

$$\langle \lambda_1 | H_I | \lambda_2 \rangle = \int d^3r \Phi_{\lambda_1}(\mathbf{r})^* \left[\frac{e}{m_0} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot (-i\hbar \nabla) \right] \Phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}) \quad (2.61)$$

Nimmt man an, dass die Quantenfilmdicke im Vergleich zur Wellenlänge des Vektorpotentials $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ klein ist, kann dieses vor das Integral gezogen werden. Dies sollte für dünne Quantenfilme ($d < 10\text{nm}$) und Lichtpropagation in z -Richtung (TM-Mode) eine gute Näherung darstellen. Das Lichtfeld wird demzufolge innerhalb des Quantenfilms als konstant genähert und etwaige Propagationseffekte ignoriert. Für die TE-Mode, d.h. für eine Lichtpropagation in der Quantenfilmebene, sollte eine solche Näherung weniger geeignet sein. Setzt man nun die Entwicklung (2.2) an, so wirkt der Ableitungsoperator ∇ sowohl auf die Einhüllenden $f^n(\mathbf{r})$ als auch auf die Basisfunktionen $u_0^n(\mathbf{r})$. Unter Verwendung der Fourier-Darstellung

$$\begin{aligned} \langle \lambda_1 | \mathbf{p} | \lambda_2 \rangle &= \int d^3r \sum_{\substack{\mathbf{G}_1, \mathbf{k}_1, n_1 \\ \mathbf{G}_2, \mathbf{k}_2, n_2}} (U_{\mathbf{G}_1}^{n_1} F_{\lambda_1 \mathbf{k}_1}^{n_1} e^{+i(\mathbf{G}_1 + \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}})^* (-i\hbar \nabla) (U_{\mathbf{G}_2}^{n_2} F_{\lambda_2 \mathbf{k}_2}^{n_2} e^{+i(\mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (2.62)$$

liefert das \mathbf{r} -Integral zunächst die Impulserhaltung

$$\delta_{\mathbf{G}_1 + \mathbf{k}_1, \mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_2} = \delta_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (2.63)$$

Die vorgenommene Zerlegung ist exakt, da die \mathbf{k}_i auf die erste Brillouin-Zone beschränkt und die \mathbf{G}_i reziproke Gittervektoren sind. Nach Rücktransformation in z -Richtung und kurzer Rechnung hat das Matrixelement folgende Form:

$$\langle \lambda_1 | \mathbf{p} | \lambda_2 \rangle = \int dz \sum_{\mathbf{k}_i} \sum_{n_1, n_2} f_{\lambda_1 \mathbf{k}_i}^{n_1}(z)^* [\hbar \mathbf{k} \delta_{n_1, n_2} + \boldsymbol{\pi}_{n_1 n_2}] f_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^{n_2}(z) \quad (2.64)$$

$$\text{mit } k_z = -i\hbar \frac{d}{dz},$$

Die n_i -Summen sind hierbei noch nicht auf die Basisfunktionen aus (2.18) und (2.19) beschränkt. Unterteilt man diese erneut in dominante (R) und nichtdominante Funktionen (S) und setzt wiederum wie bei der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung die Näherung (2.14) für die nichtdominanten Anteile an, erhält man für den ersten Term

$$\sum_r \int dz f_{\lambda_1 \mathbf{k}_i}^r(z)^* \hbar \mathbf{k} f_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^r(z) \propto \sum_r \frac{1}{(E - H_{rr})^2} [\dots] \quad (2.65)$$

als nicht dominanten Beitrag. Aufgrund der Proportionalität zu $(E - H_{rr})^{-2}$ sollte der Term verschwindend klein sein. Damit kann die n_1 -Summe im ersten Term auf die dominanten Basisfunktionen aus (2.18) und (2.19) reduziert werden.

Da der zweite Term nicht diagonal in den Basisfunktionen ist, sind hier auch nichtdominante Korrekturen zu erwarten. Der Beitrag zweier nichtdominanter Einhüllender wäre proportional

zu $(E - H_{rr})^{-1}(E - H_{r'r'})^{-1}$ und kann damit im Voraus ignoriert werden. Zwei dominante Einhüllende liefern die Interbandmatrixelemente zwischen den p-artigen Valenz- und s-artigen Leitungsbändern aus (2.28)-(2.30). Ist $n_1 = s$ dominant und $n_2 = r$ nicht dominant, bekommt man durch Einsetzen von (2.14) folgende Terme:

$$\begin{aligned} & \int dz \sum_{\mathbf{k}_i, s, r} f_{\lambda_1 \mathbf{k}_i}^s(z)^* \pi_{sr} \frac{1}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} \sum_{m \in S} \left[\frac{-i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{rm} \cdot \nabla f_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^m(z) \right] \\ & + \int dz \sum_{\mathbf{k}_i, s, r} f_{\lambda_1 \mathbf{k}_i}^s(z)^* \pi_{sr} \frac{1}{E - H_{rr}(\mathbf{r})} \sum_{m \in S} [H_{rm}(\mathbf{r}) f_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^m(z)] \end{aligned} \quad (2.66)$$

Der erste Teil ist ein Bestandteil des (inversen) Effektive-Masse-Tensors $\gamma_{sm}^R(\mathbf{r})$ aus (2.16), der zweite Term wird im Folgenden wie bei der Bandstrukturechnung vernachlässigt. Der Fall, in dem $n_2 = s$ dominant und $n_1 = r$ nicht dominant ist, berechnet sich analog. Fasst man alle Terme zusammen, lässt sich das optische Matrixelement mit Hilfe der Luttinger-Matrizen (2.21)-(2.30) darstellen

$$\begin{aligned} \Pi_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^{\lambda_1 \mathbf{k}_i} &= -\frac{e}{m} \langle \lambda_1 | p_\alpha | \lambda_2 \rangle_{\mathbf{k}_i} \\ &= -\frac{e}{m} \int dz \sum_{\mathbf{k}_i, n_1, n_2} f_{\lambda_1 \mathbf{k}_i}^{n_1}(z)^* \left[\sum_{\beta=x,y,z} (k_\beta \gamma^{\beta\alpha} + \gamma^{\alpha\beta} k_\beta) + \pi^\alpha \right] f_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^{n_2}(z), \end{aligned} \quad (2.67)$$

wobei k_z mit der Ableitung $-i d/dz$ zu identifizieren ist und $\alpha = x, y, z$ jeweils einer kartesischen Raumrichtung entspricht. Die n_i -Summen sind auf die dominanten Einhüllenden beschränkt. Der erste Teil sorgt für die Intrabandübergänge sowie für Intervallenzband- und Interleitungsband-Übergänge, der Teil mit den π^α -Matrizen hingegen für Interbandübergänge zwischen Leitungs- und Valenzbänder. Die Matrixelemente $\langle p_x \rangle$ und $\langle p_y \rangle$ erlauben aufgrund der z-Parität der Einhüllenden, des Leitungsband-Spins sowie der Form der Matrizen (2.21)-(2.30) nur Übergänge innerhalb einer Entartungsgruppe. Hierbei ist zu beachten, dass die z-Ableitung ($k_z = -i d/dz$) die Parität der Einhüllenden wechselt. Im Gegensatz dazu beinhaltet $\langle p_z \rangle$ nur optische Übergänge zwischen Bändern aus unterschiedlichen Entartungsgruppen. Damit konnte unter Ausnutzung der Symmetrie und einer geschickten Wahl der Entartungsgruppen zumindest für TM-Anregung das Problem für beide Entartungsgruppen separiert werden. Der Hamilton-Operator der Licht-Materie-Wechselwirkung lautet somit:

$$\begin{aligned} H_I^{TE} &= -A_z \mathbf{e}_z \cdot \sum_{\lambda_{1n}, \lambda_{2m}} \sum_{\mathbf{q}_i} \Pi_{\lambda_{2m} \mathbf{q}_i}^{\lambda_{1n} \mathbf{q}_i} a_{\lambda_{1n} \mathbf{q}_i}^+ a_{\lambda_{2m} \mathbf{q}_i} \quad n \neq m \in \{U, L\} \\ H_I^{TM} &= -A_i \mathbf{e}_i \cdot \sum_{\lambda_{1n}, \lambda_{2n}} \sum_{\mathbf{q}_i} \Pi_{\lambda_{2n} \mathbf{q}_i}^{\lambda_{1n} \mathbf{q}_i} a_{\lambda_{1n} \mathbf{q}_i}^+ a_{\lambda_{2n} \mathbf{q}_i} \quad n \in \{U, L\}, \quad i = x, y \end{aligned} \quad (2.68)$$

Die folgenden Untersuchungen beschränken sich auf den TM-Anteil, da die in dieser Arbeit verwendeten Anfangsbedingungen die Lichtpropagation auf die Wachstumsrichtung festlegen. Somit kann man sich nun den Vielteilchen-Wechselwirkungen zuwenden. Im Gegensatz zum bisherigen Fall müssen dabei zusätzliche Näherungen verwendet werden.

2.3.2 Coulomb-Wechselwirkung

Die Coulomb-Wechselwirkung spielt in Halbleitern eine große Rolle. Eine Nichtberücksichtigung würde unter anderem jegliche exzitonische Effekte ignorieren. Zudem ließe sich eine

Relaxation der Ladungsträger analog zum Kapitel über die Wellenpaket-Dynamik in photonischen Kristallen 1.6 nur über phänomenologische Zerfallszeiten realisieren. Coulomb- oder, wie sich später zeigen wird, auch LO-Phonon-Streuterme wären von vornherein ausgeschlossen. Eine solche mikroskopische Theorie wäre daher höchst unzureichend.

Zur Analyse und Berechnung der im Coulomb-Hamilton-Operator auftretenden Matrixelemente wird erneut die Fourier-Darstellung gewählt:

$$\begin{aligned}
& \int_V d^3r_1 d^3r_2 \Phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)^* \Phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_2)^* \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_2) \Phi_{\lambda_4}(\mathbf{r}_1) \\
&= \int_V d^3r_1 d^3r_2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{4\pi}{V |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2} \\
& \quad \sum_{n_1, n_4} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_4}} (U_{\mathbf{G}_1}^{n_1})^* U_{\mathbf{G}_4}^{n_4} (F_{\lambda_1 \mathbf{k}_1}^{n_1})^* F_{\lambda_4 \mathbf{k}_4}^{n_4} e^{-i(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_4 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}_1} \\
& \quad \sum_{n_2, n_3} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3}} (U_{\mathbf{G}_2}^{n_2})^* U_{\mathbf{G}_3}^{n_3} (F_{\lambda_2 \mathbf{k}_2}^{n_2})^* F_{\lambda_3 \mathbf{k}_3}^{n_3} e^{-i(\mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_3 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_2}
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Hierbei liegt \mathbf{k} wie die \mathbf{k}_i innerhalb der ersten Brillouin-Zone und \mathbf{G} ist wie die \mathbf{G}_i ein reziproker Gittervektor. Die n_i -Summen sind auf die dominanten Einhüllenden beschränkt. Die Auswertung der Integrale liefert die Impulserhaltung in Form zweier Delta-Distributionen:

$$\delta_{\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_4 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4} \quad \text{sowie} \quad \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{G}_3 - \mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2} \tag{2.70}$$

Berücksichtigt man die Tatsache, dass die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung eine störungstheoretische Entwicklung in der Nähe eines bestimmten Symmetriepunktes darstellt (hier: um den Γ -Punkt $\mathbf{k} = 0$), sollten die Differenzen $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4$ und $\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2$ innerhalb der ersten Brillouin-Zone liegen. Dies lässt sich leicht abschätzen. Die in den numerischen Berechnungen relevanten k_{\parallel} sind alle kleiner als $10^9/m$. Bei einer Gitterkonstante von 5\AA hingegen sollte der Betrag aller nicht-trivialen Gittervektoren $|\mathbf{G}| \neq 0$ größer als $10^{10}/m$ sein. Beschränkt man die \mathbf{k}_i demzufolge auf die unmittelbare Umgebung des Γ -Punktes, können die Delta-Distributionen in folgender Weise umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
\delta_{\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_4 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4} &= \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_4} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4} \\
\delta_{\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{G}_3 - \mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2} &= \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}_3 - \mathbf{G}_2} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2}
\end{aligned} \tag{2.71}$$

Umklapp-Prozesse, die in der Nähe des Γ -Punktes keine Rolle spielen sollten, sind folglich ausgeschlossen.

Das Coulomb-Potential sollte für kleine \mathbf{G} den Hauptbeitrag liefern. Berücksichtigt man demnach nur den größten Anteil $\mathbf{G} = 0$, können die \mathbf{G}_i -Summen analytisch ausgeführt werden. Dabei erhält man über die Orthogonalitätsrelation der Basisfunktionen (2.4) die Bedingungen δ_{n_1, n_4} und δ_{n_2, n_3} . Es muss somit nur über gleichartige Einhüllende integriert werden. Eine solche Näherung ist notwendig, da die genaue Form der Basisfunktionen bis auf deren Symmetrie-Eigenschaften nicht bekannt ist. Danach wird die Fourier-Transformation in z -Richtung wieder rückgängig gemacht. Dabei lässt man die k_z -Integration wieder näherungsweise über das Intervall $[-\infty, \infty]$ laufen, um auf analytisch berechenbare Integrale zurückgreifen zu können:

$$\frac{L_z}{2\pi} \int_{BZ} dk_z \frac{e^{ik_z z}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} \simeq \frac{L_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\cos(k_z z)}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} = \frac{L_z e^{-|k_{\parallel}| |z|}}{2k_{\parallel}} \tag{2.72}$$

Abschließend erhält man unter Auswertung der Delta-Distributionen (2.71) für die Quantenfilm-Ebene folgendes Coulomb-Matrixelement:

$$\begin{aligned}
& \int_V d^3r_1 d^3r_2 \Phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)^* \Phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_2)^* \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_2) \Phi_{\lambda_4}(\mathbf{r}_1) \\
& \simeq \int_{L_z} dz_1 dz_2 \sum_{\mathbf{k}_{||}} \frac{2\pi e^2}{\epsilon L_{||}^2 k_{||}} e^{-|k_{||}||z_1 - z_2|} \\
& \quad \sum_{n_1, \mathbf{k}_1} f_{\lambda_1 \mathbf{k}_1}^{n_1}(z_1)^* f_{\lambda_4 \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_{||}}^{n_1}(z_1) \sum_{n_2, \mathbf{k}_2} f_{\lambda_2 \mathbf{k}_2}^{n_2}(z_2)^* f_{\lambda_3 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_{||}}^{n_2}(z_2) \\
& = V_{k_{||}}^{2d} F_{\lambda_3 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_{||}}^{\lambda_1 \mathbf{k}_1} |_{\lambda_4 \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_{||}} \quad \text{mit} \quad V_{k_{||}}^{2d} = \frac{2\pi e^2}{L_{||}^2 4\pi\epsilon_0\epsilon|k_{||}|}
\end{aligned} \tag{2.73}$$

Die dabei verwendete dielektrische Konstante ϵ nimmt den Materialwert des Quantenfilms an. Das Matrixelement setzt sich demnach aus dem idealen 2d-Coulomb-Potential und einem Formfaktor zusammen. Durch die Phasen der Valenzbandeigenfunktionen ist der Formfaktor im Allgemeinen komplex.

Dasselbe Ergebnis erhält man auch, wenn man die \mathbf{r}_i -Integration in (2.69) in eine Summe über die Position der Einheitszellen \mathbf{R}_i und ein Integral über die Einheitszelle zerlegt. Danach beschränkt man sich auf den so genannten Monopol-Monopol-Beitrag, d.h. die nullte Ordnung einer zweifachen Taylor-Entwicklung

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{1}{n! \cdot m!} \cdot (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_1)^n \cdot (\mathbf{r}_2 \cdot \nabla_2)^m \cdot V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Big|_{\mathbf{r}_2=0}^{\mathbf{r}_1=0} \tag{2.74}$$

des Potentials um $(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ für kleine \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 . Man approximiert das Potential also in folgender Weise:

$$\frac{1}{|\mathbf{R}_1 + \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_2|} \simeq \frac{1}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \tag{2.75}$$

Dabei wird z.B. mit der ersten Ordnung die Förster Dipol-Dipol-Wechselwirkung vernachlässigt. Da die Einhüllenden langsam veränderlich sind, können sie ebenso wie das genäherte Coulomb-Potential vor die Einheitszellen-Integrale gezogen werden. Diese liefern analog zur vorherigen Rechnung die Orthogonalität in den gitterperiodischen Basisfunktionen δ_{n_1, n_4} und δ_{n_2, n_2} . Alle weiteren Schritte können mit wenig Aufwand übernommen werden.

Das Ergebnis (2.73) entspricht der im Rahmen einer $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung für das Coulomb-Potential üblichen Näherung. Unter anderem findet man diese Form von $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Coulomb-Matrixelementen in einer Veröffentlichung von A. Girndt aus dem Jahr 1997 [44]. Im Gegensatz zu dieser Arbeit und vielen anderen Veröffentlichungen werden die Einhüllenden bei der numerischen Berechnung der Coulomb-Matrixelemente jedoch im Folgenden nicht durch $\mathbf{k}_{||}$ -unabhängige effektive Einhüllende ersetzt. Eine solche Näherung sollte nur in der unmittelbaren Umgebung des Γ -Punktes eine akzeptable Näherung darstellen. Stattdessen wird die volle $\mathbf{k}_{||}$ -Abhängigkeit der Formfaktoren aus (2.73) beibehalten. Damit hat der Coulomb-Hamilton-Operator H_C folgende Form:

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_3, \dots, \lambda_6 \\ \mathbf{p}_{||}, \mathbf{k}_{3||}, \mathbf{k}_{4||}}} V_{\mathbf{p}_{||}}^{2d} F_{\lambda_5 \mathbf{k}_{4||} + \mathbf{p}_{||}}^{\lambda_3 \mathbf{k}_{3||}} |_{\lambda_6 \mathbf{k}_{3||} - \mathbf{p}_{||}} v_{\lambda_3 \mathbf{k}_{3||}}^+ v_{\lambda_4 \mathbf{k}_{4||}}^+ v_{\lambda_5 \mathbf{k}_{4||} + \mathbf{p}_{||}} v_{\lambda_6 \mathbf{k}_{3||} - \mathbf{p}_{||}} \tag{2.76}$$

Beim Aufstellen der Heisenberg-Gleichungen ist auf Folgendes zu achten: Aufgrund der Verwendung des Elektronbildes müssen bei der Berechnung der Bewegungsgleichungen die Energie-Korrekturen abgezogen werden, die auf die vollbesetzten Valenzbänder zurückzuführen sind. Diese Korrekturen sind schon indirekt bei der Bandstrukturrechnung berücksichtigt worden.

Abschließend sollen unter Ausnutzung der z-Parität noch einige Auswahlregeln bestimmt werden. Geht man von (z_1, z_2) nach $(-z_1, -z_2)$ über, bleibt der Exponentialterm $\exp(-|\mathbf{k}_\parallel| \cdot |z_1 - z_2|)$ unverändert. Ob ein Matricelement verschwindet, wird somit durch die Parität der Confinement-Anteile bestimmt.

Coulomb-Auswahlregeln für $F_{\lambda_3 \mathbf{k}_{3\parallel} | \lambda_4 \mathbf{k}_{4\parallel}}^{\lambda_1 \mathbf{k}_{1\parallel} | \lambda_2 \mathbf{k}_{2\parallel}}$
mit Entartungsgruppen $A, B, C, D \in \{U, L\}$

• **Regel 1:**

Die Diagonalbänder der Formfaktoren $\{\lambda_1, \lambda_4\}$ bzw. $\{\lambda_2, \lambda_3\}$ müssen aufgrund der Orthogonalität der Basisfunktionen $u_0^n(\mathbf{r})$ entweder beides Leitungsbänder oder beides Valenzbänder sein. Unter anderem sind damit Kombinationen mit einem Valenzband und drei Leitungsbändern bzw. einem Leitungsband und drei Valenzbändern verboten.

• **Regel 2:**

Kommen die Bänder $\{\lambda_1, \lambda_4\}$ aus der Entartungsgruppe A sowie $\{\lambda_2, \lambda_3\}$ aus der Entartungsgruppe B , so müssen die Einhüllenden $f_{\lambda_1 \mathbf{k}_{1\parallel}}^n(z_1)$ und $f_{\lambda_4 \mathbf{k}_{4\parallel}}^n(z_1)$ sowie $f_{\lambda_2 \mathbf{k}_{2\parallel}}^n(z_2)$ und $f_{\lambda_3 \mathbf{k}_{3\parallel}}^n(z_2)$ jeweils dieselbe Parität aufweisen. Dies ist für Valenzbänder automatisch erfüllt und beruht für die Leitungsbänder auf dem Spin.

• **Regel 3:**

Kommen die Bänder $\{\lambda_1, \lambda_4\}$ aus unterschiedlichen Entartungsgruppen $A \neq B$ sowie $\{\lambda_3, \lambda_4\}$ ebenso aus unterschiedlichen Entartungsgruppen $C \neq D$, so müssen die Einhüllenden $f_{\lambda_1 \mathbf{k}_{1\parallel}}^n(z_1)$ und $f_{\lambda_4 \mathbf{k}_{4\parallel}}^n(z_1)$ sowie $f_{\lambda_2 \mathbf{k}_{2\parallel}}^n(z_2)$ und $f_{\lambda_3 \mathbf{k}_{3\parallel}}^n(z_2)$ jeweils unterschiedliche Parität aufweisen. Dies ist für Valenzbänder automatisch erfüllt und beruht für die Leitungsbänder auf dem Spin.

• **Regel 4:**

Kombinationen bei denen jeweils drei Bänder aus der einen Entartungsgruppe A und das vierte Band aus der anderen Entartungsgruppe $B \neq A$ kommen, sind aufgrund von Parität und Spin verboten.

• **Regel 5:**

Aufgrund der Orthogonalität der Wellenfunktionen haben nur Matricelemente mit $\lambda_1 = \lambda_4$ und gleichzeitig $\lambda_2 = \lambda_3$ einen nichtverschwindenden Beitrag für $\mathbf{k}_\parallel = 0$.

2.3.3 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Als letzter Vielteilchen-Anteil soll nun die Elektron-Phonon-Wechselwirkung eingeführt werden, mit der im Rahmen dieser Arbeit Streuprozesse und damit die Relaxation der Leitungs- und Valenzband-Elektronen realisiert werden sollen. Dafür wird zunächst die Ortsdarstellung der Fröhlich-Wechselwirkung von Elektronen mit einer Dipoldichte [53] angesetzt

$$- \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi_{\lambda_1}^*(\mathbf{r}_1) \Phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_1) \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \nabla_{\mathbf{r}_2} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}_2) \quad (2.77)$$

und die Dipoldichte \mathbf{P} in ebenen Wellen entwickelt:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar\gamma}{8\pi V |\mathbf{w}|}} \mathbf{w} e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_2} (b_w - b_{-w}^+) \text{ mit } \gamma = \omega_{LO} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right] \quad (2.78)$$

Danach kann die Divergenz ausgewertet

$$\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar\gamma}{8\pi V}} (i|\mathbf{w}|) e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_2} (b_w - b_{-w}^+) \quad (2.79)$$

und in die Ausgangsgleichung (2.77) eingesetzt werden:

$$\begin{aligned} & - \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \sum_{\mathbf{k}_{1i}, \lambda_1} \phi_{\lambda_1 \mathbf{k}_{1i}}^+(\mathbf{r}_1) \sum_{\mathbf{k}_{2i}, \lambda_2} \phi_{\lambda_2 \mathbf{k}_{2i}}(\mathbf{r}_1) \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ & \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar\gamma}{8\pi V}} (i|\mathbf{w}|) e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_2} (b_w - b_{-w}^+) a_{\lambda_1 \mathbf{k}_{1i}}^+ a_{\lambda_2 \mathbf{k}_{2i}} \end{aligned} \quad (2.80)$$

Im Gegensatz zur Berechnung der Coulomb-Matrixelemente kann bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung nach einer Koordinatentransformation ($\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}$) das \mathbf{r} -Integral analytisch ausgeführt werden (vgl. S. 118 aus [56]):

$$\int d\mathbf{r} \frac{\exp(-\mathbf{w} \cdot \mathbf{r})}{|\mathbf{r}|} = \frac{4\pi}{|\mathbf{w}|^2} \quad (2.81)$$

Hierbei wurden die Integrationsgrenzen näherungsweise nach unendlich verschoben ($L_i \rightarrow \infty$). Mit Hilfe der Fourier-Darstellung der Elektron-Wellenfunktionen erhält man dann:

$$\begin{aligned} & - \int d\mathbf{r}_1 \sum_{\substack{\lambda_1, n_1 \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{G}_1}} (U_{\mathbf{G}_1}^{n_1})^* (F_{\lambda_1 \mathbf{k}_1}^{n_1})^* e^{-i(\mathbf{G}_1 + \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1} \sum_{\substack{\lambda_2, n_2 \\ \mathbf{k}_2, \mathbf{G}_2}} U_{\mathbf{G}_2}^{n_2} F_{\lambda_2 \mathbf{k}_2}^{n_2} e^{+i(\mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}_1} \\ & \sum_{\mathbf{w}, \mathbf{W}} \sqrt{\frac{\hbar e^2 \gamma}{2\epsilon_0 V}} \frac{i e^{i(\mathbf{w} + \mathbf{W}) \cdot \mathbf{r}_1}}{|\mathbf{w} + \mathbf{W}|} \left(b_{(\mathbf{w} + \mathbf{W})} - b_{-(\mathbf{w} + \mathbf{W})}^+ \right) a_{\lambda_1 \mathbf{k}_{1i}}^+ a_{\lambda_2 \mathbf{k}_{2i}} \end{aligned} \quad (2.82)$$

Dabei ist \mathbf{w} wieder auf die erste Brillouin-Zone beschränkt und \mathbf{W} ist ein reziproker Gittervektor. Die Auswertung des \mathbf{r}_1 -Integrals liefert die Impulserhaltung $\delta_{\mathbf{W} + \mathbf{w}, \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}$. Die Delta-Distribution kann mit derselben Argumentation, die auch bei der Herleitung des Coulomb-Hamilton-Operators verwendet wurde, für \mathbf{k}_i in der Nähe des Γ -Punktes in folgender Weise zerlegt werden:

$$\delta_{\mathbf{W} + \mathbf{w}, \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} = \delta_{\mathbf{W}, \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2} \delta_{\mathbf{w}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} \quad (2.83)$$

In weiterer Analogie zur Berechnung des Coulomb-Matrixelements wird auch hier $\mathbf{W} = 0$ gesetzt. Damit liefern die Summen über die Gittervektoren \mathbf{G}_i wiederum die Diagonalität in den Einhüllenden δ_{n_1, n_2} . Wird nun die Fouriertransformation in z -Richtung wieder rückgängig gemacht, so ergibt sich folgende Darstellung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} H_p &= i\hbar \sum_{\mathbf{k}_{ii}, \mathbf{w}} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \sum_{n_1} (b_{-\mathbf{w}}^+ - b_{\mathbf{w}}) a_{\lambda_1 \mathbf{k}_{ii}}^+ a_{\lambda_2 \mathbf{k}_{ii} - \mathbf{w}_{ii}} \\ & \int dz_1 f_{\lambda_1 \mathbf{k}_{ii}}^{n_1}(z_1)^* f_{\lambda_2 \mathbf{k}_{ii} - \mathbf{w}_{ii}}^{n_1}(z_1) \sqrt{\frac{e^2 \gamma}{2\epsilon_0 \hbar V}} \frac{e^{i\mathbf{w}_z \cdot z_1}}{|\mathbf{w}|} \end{aligned} \quad (2.84)$$

Die z_1 -Integration muss wie bei den Coulomb-Formfaktoren numerisch ausgeführt werden. Demzufolge lautet der Elektron-Phonon-Hamilton-Operator:

$$H_{ep} = \hbar \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_i} \bar{M}_{\lambda_2 \mathbf{q}_i}^{\lambda_1 \mathbf{k}_i} |^{\mathbf{q}-\mathbf{k}_i} b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_i}^+ a_{\lambda_1 \mathbf{k}_i}^+ a_{\lambda_2 \mathbf{q}_i} + \hbar \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_i} \bar{M}_{\lambda_2 \mathbf{k}_i}^{\lambda_1 \mathbf{q}_i} |_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_i} a_{\lambda_1 \mathbf{q}_i}^+ a_{\lambda_2 \mathbf{k}_i} b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_i} \quad (2.85)$$

Auf etwaige Auswahlregeln soll hier nicht eingegangen werden. Vielmehr wird sich bei der Berechnung der Phononen-Streuterme zeigen, dass sich die dabei auftretenden Produkte von Phonon-Matrixelementen für dispersionslose LO-Gleichgewichtsphononen über die Coulomb-Matrixelemente darstellen lassen.

2.4 Heisenberg-Bewegungsgleichungen

In den vorigen beiden Abschnitten wurden zunächst die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen bestimmt und damit die Hamilton-Operatoren des Bandstrukturanteils H_0 , der Licht-Materie- H_I , der Coulomb- H_C und der Elektron-Phonon-Wechselwirkung H_{ep} aufgestellt. In diesem Abschnitt sollen nun die zugehörigen Halbleiter-Bloch-Gleichungen für das vorliegende Materialsystem hergeleitet werden. Dafür sollen in den folgenden drei Abschnitten mit den Hamilton-Operatoren ($H_0 + H_I$), H_C und H_{ep} die Heisenberg-Bewegungsgleichungen

$$-i\hbar \frac{d}{dt} A = [H_i, A]_- \quad (2.86)$$

gelöst werden. Zunächst werden jedoch die Zweier-Erwartungswerte vorgestellt, deren Dynamik beobachtet werden soll. Dies sind die

- Phononen-Dichten

$$n_{\mathbf{k}}^p = \langle b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.87)$$

- Interband-Polarisationen zwischen Valenz- und Leitungsbändern

$$p_{c_{\rho n} \mathbf{k}_i}^{v_{\lambda m}} = x_{c_{\rho n} \mathbf{k}_i}^{v_{\lambda m}} = \langle v_{\lambda m \mathbf{k}_i}^+ c_{\rho n \mathbf{k}_i} \rangle, \quad (2.88)$$

- Leitungsband-Besetzungen

$$f_{c_{\lambda m} \mathbf{k}_i}^e = x_{c_{\lambda m} \mathbf{k}_i}^{c_{\lambda m}} = \langle c_{\lambda m \mathbf{k}_i}^+ c_{\lambda m \mathbf{k}_i} \rangle, \quad (2.89)$$

- Interleitungsband-Polarisationen

$$p_{c_{\rho n} \mathbf{k}_i}^{c_{\lambda m}} = x_{c_{\rho n} \mathbf{k}_i}^{c_{\lambda m}} = \langle c_{\lambda m \mathbf{k}_i}^+ c_{\rho n \mathbf{k}_i} \rangle \quad \text{mit } (\lambda m) \neq (\rho n), \quad (2.90)$$

- Valenzband-Besetzungen

$$f_{v_{\lambda m} \mathbf{k}_i}^e = x_{v_{\lambda m} \mathbf{k}_i}^{v_{\lambda m}} = \langle v_{\lambda m \mathbf{k}_i}^+ v_{\lambda m \mathbf{k}_i} \rangle \quad (2.91)$$

- und Intervenzband-Polarisationen

$$p_{v_{\rho n} \mathbf{k}_i}^{v_{\lambda m}} = x_{v_{\rho n} \mathbf{k}_i}^{v_{\lambda m}} = \langle v_{\lambda m \mathbf{k}_i}^+ v_{\rho n \mathbf{k}_i} \rangle \quad \text{mit } (\lambda m) \neq (\rho n). \quad (2.92)$$

Für den in dieser Arbeit untersuchten Drei-Band-Fall mit einem Leitungs- und zwei Valenzbändern gibt es keine Interleitungsband-Polarisationen. Zudem wird sich zeigen, dass für bestimmte Anfangsbedingungen nur Interbandkohärenzen zwischen Bändern aus derselben Entartungsgruppe berücksichtigt werden müssen. Dies wird sich schon im nächsten Abschnitt bei der Herleitung der optischen Bloch-Gleichungen zeigen.

2.4.1 Optische Bloch-Gleichungen

In diesem Abschnitt sollen die optischen Bloch-Gleichungen für das vorliegende Materialsystem angegeben werden. Dafür werden mit Hilfe des Bandstrukturanteils H_0 und der Licht-Materie-Wechselwirkung H_I die Heisenberg-Bewegungsgleichungen aufgestellt. In Hinblick auf die späteren Anwendungen wird an dieser Stelle nur der TM-Anteil des Hamilton-Operators betrachtet. Das Lichtfeld propagiert somit senkrecht zum Quantenfilm in z-Richtung. Die Bewegungsgleichungen lauten somit:

$$-i\hbar\partial_t x_{\rho m \mathbf{k}_\parallel}^{\lambda n} = (E_{\lambda k_\parallel}^e - E_{\rho k_\parallel}^e) x_{\rho m \mathbf{k}_\parallel}^{\lambda n} - \mathbf{A}_\parallel \cdot \sum_{\tau} \left[\Pi_{\lambda n \mathbf{k}_\parallel}^{\tau n} x_{\rho m \mathbf{k}_\parallel}^{\tau n} - x_{\tau m \mathbf{k}_\parallel}^{\lambda n} \Pi_{\tau m \mathbf{k}_\parallel}^{\rho m} \right] \quad (2.93)$$

Ist ein Erwartungswert diagonal in der Entartungszahl ($n = m$), so wird dessen Dynamik nur von Kohärenzen bestimmt, die ebenfalls diagonal in der Entartungszahl sind. Analog wird die zeitliche Entwicklung von nichtdiagonalen ($n \neq m$) Erwartungswerten nur von ebenso nichtdiagonalen Größen bestimmt. Vor der optischen Anregung sind alle Valenzbänder voll besetzt und keine sonstigen Polarisierungen und Dichten vorhanden. Da die Dichten diagonal in der Entartungsgruppe ($n = m$) sind, werden durch eine optische TM-Anregung nur Kohärenzen zwischen/innerhalb von Bändern erzeugt, die aus derselben Entartungsgruppe stammen. Damit können nach einer optische TM-Anregung keine Kohärenzen zwischen Bändern aus unterschiedlichen Entartungsgruppen auftreten, sofern einige solcher Größen nicht schon vorher vorhanden waren. Des Weiteren sind auf der Ein-Teilchen-Ebene die Bewegungsgleichungen für die $x_{\sigma n \mathbf{k}_\parallel}^{\tau n}$ mit $n \in \{U, L\}$ entkoppelt. Eine Kopplung zwischen Kohärenzen beider Gruppen tritt erst unter Berücksichtigung der Coulomb- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung auf. Dabei wird sich zeigen, dass diese Terme die Bewegungsgleichungen beider Gruppen zwar miteinander koppeln, aber analog zum hier vorliegenden Fall keine Kohärenzen zwischen Bändern aus unterschiedlichen Gruppen erzeugen können.

2.4.2 Coulomb-Anteil in Hartree-Fock-Näherung

Die Herleitung der Heisenberg-Gleichungen für den Coulomb-Anteil kommt im Gegensatz zum vorigen Abschnitt nicht ohne Näherungen aus. Beim Auswerten der Kommutatoren tritt ein Hierarchie-Problem auf, da der 2er-Erwartungswert $\langle a^+ a \rangle$ über die Vielteilchen-Coulomb-Wechselwirkung an 4er-Erwartungswerte $\langle a^+ a^+ a a \rangle$ koppelt:

$$\begin{aligned} & [H_C, \langle a_{\lambda \mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\rho \mathbf{k}_\parallel} \rangle] \\ &= \sum_{\mathbf{q}_\parallel, \mathbf{p}_\parallel} \sum_{\sigma, \tau, \mu} V_{p_\parallel}^{2d} F_{\lambda \mathbf{k}_\parallel, \sigma \mathbf{q}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^{\tau \mathbf{q}_\parallel, \mu \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} \langle a_{\mu \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^+ a_{\tau \mathbf{q}_\parallel}^+ a_{\sigma \mathbf{q}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} a_{\rho \mathbf{k}_\parallel} \rangle \\ &- \sum_{\mathbf{q}_\parallel, \mathbf{p}_\parallel} \sum_{\sigma, \tau, \mu} V_{p_\parallel}^{2d} F_{\tau \mathbf{q}_\parallel, \mu \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^{\rho \mathbf{k}_\parallel, \sigma \mathbf{q}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} \langle a_{\lambda \mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\sigma \mathbf{q}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^+ a_{\tau \mathbf{q}_\parallel} a_{\mu \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} \rangle \end{aligned} \quad (2.94)$$

Stellt man wiederum Bewegungsgleichungen für die 4er-Erwartungswerte auf, so hängt deren Dynamik von 6er-Erwartungswerten $\langle a^+ a^+ a^+ a a a \rangle$ ab usw. An dieser Stelle soll das Hierarchieproblem auf niedrigster Ordnung entkoppelt werden, indem unter Verwendung der Hartree-Fock-Näherung die auftretenden 4er-Erwartungswerte in 2er-Erwartungswerte zerlegt werden. Aus dem ersten 4er-Erwartungswert wird somit unter Beachtung, dass der ($\mathbf{p}_\parallel = 0$)-

Beitrag nach dem Jellium-Modell ausgeschlossen ist

$$\begin{aligned} \langle a_{\mu\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^+ a_{\tau\mathbf{q}_\parallel}^+ a_{\sigma\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} \rangle &\simeq -\langle a_{\mu\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^+ a_{\sigma\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} \rangle \langle a_{\tau\mathbf{q}_\parallel}^+ a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} \rangle \\ &= -\langle a_{\mu\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^+ a_{\sigma\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel} \rangle \langle a_{\tau\mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} \rangle \delta_{\mathbf{q}_\parallel, \mathbf{k}_\parallel}. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Nach Umsummation $\mathbf{p}_\parallel \rightarrow \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel$ erhält man damit:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \bar{x}_{\rho\mathbf{k}_\parallel}^\lambda &\simeq \sum_{\tau} \left[\sum_{\mathbf{p}_\parallel} \sum_{\sigma, \mu} V_{\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^{2d} F_{\tau\mathbf{k}_\parallel | \mu\mathbf{p}_\parallel}^{\rho\mathbf{k}_\parallel | \sigma\mathbf{p}_\parallel} \bar{x}_{\mu\mathbf{p}_\parallel}^\sigma \right] x_{\tau\mathbf{k}_\parallel}^\lambda \\ &\quad - \sum_{\tau} \left[\sum_{\mathbf{p}_\parallel} \sum_{\sigma, \mu} V_{\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{p}_\parallel}^{2d} F_{\lambda\mathbf{k}_\parallel | \sigma\mathbf{p}_\parallel}^{\tau\mathbf{k}_\parallel | \mu\mathbf{p}_\parallel} \bar{x}_{\sigma\mathbf{p}_\parallel}^\mu \right] x_{\rho\mathbf{k}_\parallel}^\tau \end{aligned} \quad (2.96)$$

Mit der Verwendung von \bar{x} anstelle von x soll angedeutet werden, dass Beiträge der vollbesetzten Valenzbänder, die ja schon indirekt bei der Bandstrukturrechnung über die Luttinger-Parameter berücksichtigt wurden, abgezogen werden müssen, d.h. für Valenzband-Dichten gilt: $\bar{x}_{v_i\mathbf{p}_\parallel}^{v_i} = f_{v_i\mathbf{p}_\parallel}^e - 1$.

Zudem lässt sich mit Hilfe der Coulomb-Auswahlregeln leicht zeigen, dass die Hartree-Fock-Beiträge keine Kohärenzen zwischen Bändern aus verschiedenen Entartungsgruppen erzeugen können, falls diese nicht schon vorher vorhanden waren. Im ersten Anteil müssen von den im Formfaktor auftretenden Bändern $\{\sigma, \tau, \mu, \rho\}$ jeweils zwei Bänder aus demselben Schema $A \in \{U, L\}$ stammen (Coulomb-Regel 4). Falls sich λ und ρ aber in ihrer Gruppenzugehörigkeit unterscheiden (z.B. $\lambda \in U$ und $\rho \in L$), stammt entweder die Bandkombination $\{\sigma, \mu\}$ oder $\{\lambda, \tau\}$ aus unterschiedlichen Entartungsgruppen. Folglich ist einer der beiden Erwartungswerte nichtdiagonal in der Entartungszahl. Man kann sich also auf den Fall beschränken, bei dem $\{\lambda, \rho, \tau\}$ sowie $\{\mu, \sigma\}$ jeweils aus derselben Gruppe stammen.

Eine Wechselwirkung zwischen Kohärenzen aus unterschiedlichen Gruppen wird dagegen durch die Auswahlregeln nicht ausgeschlossen, da die Gruppe von $\{\lambda, \rho, \tau\}$ nicht mit der von $\{\mu, \sigma\}$ übereinstimmen muss. Zudem müssen die Diagonalkombinationen der Formfaktorbänder jeweils entweder beide Valenz- oder beide Leitungsbänder sein (Coulomb-Regel 1). Sonstige Auswahlregeln aufgrund des Leitungsband-Spins haben in dieser Arbeit keine Bedeutung, da nur das niedrigste Leitungsband berücksichtigt wird.

Damit kann nun der letzte Vielteilchen-Anteil, die Elektron-Phonon-Streuterme, hergeleitet werden.

2.4.3 Streuung durch Gleichgewichts-LO-Phononen

Analog zur Situation bei der Aufstellung der Coulomb-Beiträge koppeln auch bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung die 2er-Erwartungswerte an Erwartungswerte höherer Ordnung. Da Phononen Bosonen sind, sind das in diesem Fall 3er-Erwartungswerte:

$$\begin{aligned} &-i\partial_t \langle a_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} \rangle^{ep} \\ &= \sum_{\mathbf{q}, \mu} \left[\underbrace{\bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel | \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{q}} \langle b_{\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{q}}^+ a_{\mu\mathbf{q}_\parallel}^+ a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} \rangle}_{(1)} + \underbrace{\bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel | \mathbf{q} - \mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel} \langle a_{\mu\mathbf{q}_\parallel}^+ a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} b_{\mathbf{q} - \mathbf{k}_\parallel} \rangle}_{(2)} \right] \\ &\quad - \sum_{\mathbf{q}, \mu} \left[\underbrace{\bar{M}_{\mu\mathbf{q}_\parallel}^{\rho\mathbf{k}_\parallel | \mathbf{q} - \mathbf{k}_\parallel} \langle b_{\mathbf{q} - \mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\mu\mathbf{q}_\parallel} \rangle}_{(3)} + \underbrace{\bar{M}_{\mu\mathbf{q}_\parallel | \mathbf{k}_\parallel - \mathbf{q}}^{\rho\mathbf{k}_\parallel} \langle a_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\mu\mathbf{q}_\parallel} b_{\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{q}} \rangle}_{(4)} \right] \end{aligned} \quad (2.97)$$

Anders als bei der Coulomb-Wechselwirkung können diese 3er-Erwartungswerte aber nicht Hartree-Fock-artig in einen 2er-Elektron- und einen 1er-Phonon-Erwartungswert zerlegt werden, da $d\langle b_k^+ \rangle / dt = 0$ ist. Daher müssen auch für die 3er-Erwartungswerte (1)-(4) Bewegungsgleichungen aufgestellt werden. Näherungsweise wird dabei vom gesamten Hamilton-Operator nur der Bandstruktur- und Elektron-Phonon-Anteil berücksichtigt. Die 3er-Erwartungswerte koppeln über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung H_{ep} an 4er-Erwartungswerte der Form $\langle a^+ a^+ a a \rangle$ sowie $\langle b^+ a^+ a b \rangle$. Diese 4er Erwartungswerte können dann wie bei der Hartree-Fock-Zerlegung in 2er-Erwartungswerte aufgespalten werden. Für den ersten 3er-Term erhält man demnach

$$\begin{aligned}
& [-i\partial_t - (\epsilon_{\mu\mathbf{q}_\parallel}^e - \epsilon_{\rho\mathbf{k}_\parallel}^e + \epsilon_{LO}^p)] \sum_{q_z} \bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}} \langle b_{\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^+ a_{\mu\mathbf{q}_\parallel}^+ a_{\rho\mathbf{k}_\parallel} \rangle \\
&= \sum_{\tau,\sigma} \sum_{q_z} \bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}} M_{\sigma\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^{\tau\mathbf{k}_\parallel} (n_{\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^p + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) (\delta_\sigma^\mu - x_{\sigma\mathbf{q}_\parallel}^\mu) x_{\rho\mathbf{k}_\parallel}^\tau \\
&- \sum_{\tau,\sigma} \sum_{q_z} \bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}} M_{\sigma\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^{\tau\mathbf{k}_\parallel} (n_{\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^p + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}) x_{\sigma\mathbf{q}_\parallel}^\mu (\delta_\rho^\tau - x_{\rho\mathbf{k}_\parallel}^\tau)
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Die Bewegungsgleichungen der Terme (2)-(4) unterscheiden sich in ihrer Struktur nur unwesentlich von der hier gezeigten Gleichung (2.98) und werden daher nicht angegeben. Für die Phononenbesetzungen werden Bose-Verteilungen

$$n_{LO}^{eq} = \frac{1}{\exp(E_{LO}/(k_B T)) - 1.0} \tag{2.99}$$

angesetzt. Diese Gleichgewichtsverteilungen sind aufgrund der dispersionslosen LO-Phononen unabhängig vom Wellenvektor \mathbf{k} . Damit bleibt die q_z -Abhängigkeit nur in den Elektron-Phonon-Matrixelementen erhalten. Die q_z -Summe kann analytisch berechnet werden, wenn man die Integrationsgrenzen näherungsweise nach Unendlich verschiebt:

$$\begin{aligned}
\sum_{q_z} \bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}} M_{\sigma\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^{\tau\mathbf{k}_\parallel} &\propto \frac{L_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_z \frac{\exp[\pm iq_z(Z_1 - Z_2)]}{|\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{k}_\parallel|^2 + q_z^2} \\
&= \frac{L_z \exp[-|\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{k}_\parallel| |Z_1 - Z_2|]}{2 |\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{k}_\parallel|}
\end{aligned} \tag{2.100}$$

Demnach lässt sich die q_z -Summe über das Produkt zweier Phonon-Matrixelemente durch ein geeignetes Coulomb-Matrixelement darstellen:

$$\sum_{q_z} \bar{M}_{\lambda\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}} M_{\sigma\mathbf{q}_\parallel|\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}}^{\tau\mathbf{k}_\parallel} = \frac{\gamma\epsilon}{2\hbar} \mathbf{V}_{\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}_\parallel}^{2d} \mathbf{F}_{\sigma\mathbf{q}_\parallel|\tau\mathbf{k}_\parallel}^{\mu\mathbf{q}_\parallel|\lambda\mathbf{k}_\parallel} \tag{2.101}$$

Daher gelten auch für die q_z -summierten Produkte aus Phonon-Matrixelementen die Auswahlregeln von Seite 103. Es sei aber nochmals darauf hingewiesen, dass die Relation (2.101) nur angewendet werden kann, wenn man dispersionslose, d.h. \mathbf{k} -unabhängige, Phonondichten ansetzt.

Damit kann die Bewegungsgleichung (2.98) weiter ausgewertet werden. Diese lässt sich auf folgende schematische Form reduzieren

$$-i\partial_t x(t) = (\Omega + i\eta)x(t) + y(t), \tag{2.102}$$

wobei der eingefügte Parameter η ein Dephasieren der 3er-Korrelationen berücksichtigen soll. Dies ist vergleichbar mit dem Einführen einer phänomenologischen T_2 -Dephasierungszeit auf der Hartree-Fock-Ebene. Der Einfluss des η -Parameters auf die Dynamik ist jedoch wesentlich geringer, da er Prozesse jenseits der zweiten Born'schen Näherung ersetzen soll. Gleichung (2.102) lässt sich formal integrieren:

$$x(t) = x(t_0)e^{(i\Omega-\eta)(t-t_0)} + i \int_{t_0}^t dx e^{(i\Omega-\eta)(t-x)} y(x) \quad (2.103)$$

Beachtet man, dass vor Beginn der optischen Anregung im Halbleiter ($t < t_0$) keine Korrelationen vorhanden sein sollen, d.h. $x(t < t_0) = 0$, kann der erste Term vernachlässigt und die untere Integralgrenze auf $-\infty$ gesetzt werden. Die Funktion $y(t)$ ist im Vergleich zur Phase $\exp((i\Omega - \eta)t)$ häufig als langsam veränderlich anzusehen oder kann durch Separation einer Phase langsam veränderlich gemacht werden. Zur Vereinfachung wird für den Integraloperator folgende Abkürzung eingeführt:

$$\begin{aligned} x(t) &= i \hat{\mathbf{I}}_{\Omega}^{\eta} y(t) := i \int_{-\infty}^t dx e^{(i\Omega-\eta)(t-x)} y(x) \\ \Rightarrow \hat{\mathbf{I}}_{\Omega}^{\eta} [e^{i\omega t} \tilde{y}(t)] &= e^{i\omega t} I_{\Omega-\omega}^{\eta} \tilde{y}(t) \text{ und } [\hat{\mathbf{I}}_{\Omega}^{\eta} y(t)]^* = \hat{\mathbf{I}}_{-\Omega}^{\eta} y^*(t) \end{aligned} \quad (2.104)$$

Mit Hilfe des Integraloperators und unter Verwendung der Relation (2.101) kann die Lösung des Phononanteils angegeben werden. Dabei wurden auch die aus den 3er-Erwartungswerten (2)-(4) resultierenden Terme (vgl. Gleichung (2.97)) berücksichtigt:

$$\begin{aligned} & - \partial_t \langle a_{\lambda \mathbf{k}_1}^+ a_{\rho \mathbf{k}_1} \rangle^{ep} \\ &= \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \mu, \mathbf{q}}} \frac{\gamma \epsilon}{2\hbar} \mathbf{V}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1}^{2d} \mathbf{F}_{\sigma \mathbf{q}_1 | \lambda \mathbf{k}_1}^{\mu \mathbf{q}_1 | \tau \mathbf{k}_1} (n_{LO}^{eq} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \hat{\mathbf{I}}_{\epsilon_{\mu \mathbf{q}_1}^e - \epsilon_{\rho \mathbf{k}_1}^e \pm \epsilon_{LO}^p}^{\eta} (\delta_{\sigma}^{\mu} - \mathbf{x}_{\sigma \mathbf{q}_1}^{\mu}) \mathbf{x}_{\rho \mathbf{k}_1}^{\tau} \\ & - \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \mu, \mathbf{q}}} \frac{\gamma \epsilon}{2\hbar} \mathbf{V}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1}^{2d} \mathbf{F}_{\sigma \mathbf{q}_1 | \lambda \mathbf{k}_1}^{\mu \mathbf{q}_1 | \tau \mathbf{k}_1} (n_{LO}^{eq} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \hat{\mathbf{I}}_{\epsilon_{\mu \mathbf{q}_1}^e - \epsilon_{\rho \mathbf{k}_1}^e \mp \epsilon_{LO}^p}^{\eta} \mathbf{x}_{\sigma \mathbf{q}_1}^{\mu} (\delta_{\rho}^{\tau} - \mathbf{x}_{\rho \mathbf{k}_1}^{\tau}) \\ & + \sum_{\substack{\tau, \sigma \\ \mu, \mathbf{q}}} \frac{\gamma \epsilon}{2\hbar} \mathbf{V}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1}^{2d} \mathbf{F}_{\tau \mathbf{k}_1 | \mu \mathbf{q}_1}^{\rho \mathbf{k}_1 | \sigma \mathbf{q}_1} (n_{LO}^{eq} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \hat{\mathbf{I}}_{\epsilon_{\lambda \mathbf{k}_1}^e - \epsilon_{\mu \mathbf{q}_1}^e \mp \epsilon_{LO}^p}^{\eta} (\delta_{\mu}^{\sigma} - \mathbf{x}_{\mu \mathbf{q}_1}^{\sigma}) \mathbf{x}_{\tau \mathbf{k}_1}^{\lambda} \\ & - \sum_{\substack{\tau, \sigma \\ \mu, \mathbf{q}}} \frac{\gamma \epsilon}{2\hbar} \mathbf{V}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1}^{2d} \mathbf{F}_{\tau \mathbf{k}_1 | \mu \mathbf{q}_1}^{\rho \mathbf{k}_1 | \sigma \mathbf{q}_1} (n_{LO}^{eq} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \hat{\mathbf{I}}_{\epsilon_{\lambda \mathbf{k}_1}^e - \epsilon_{\mu \mathbf{q}_1}^e \pm \epsilon_{LO}^p}^{\eta} \mathbf{x}_{\mu \mathbf{q}_1}^{\sigma} (\delta_{\tau}^{\lambda} - \mathbf{x}_{\tau \mathbf{k}_1}^{\lambda}) \end{aligned} \quad (2.105)$$

Analog zu den Hartree-Fock-Anteilen werden auch durch die Phonon-Streuterme keine Kohärenzen zwischen Bändern erzeugt, die aus unterschiedlichen Entartungsgruppen stammen. Damit müssen $\{\lambda, \rho, \tau\}$ sowie $\{\mu, \sigma\}$ jeweils aus derselben Gruppe stammen. Zudem müssen die Diagonalaare der Formfaktorbänder jeweils entweder beides Valenz- oder beides Leitungsbander sein.

Die Kombinationen, bei denen die Elektron-Kohärenzen auf der rechten Seite von Gleichung (2.105) Elektron-Dichten entsprechen, haben die typische Form $(1 - f_{\mathbf{q}_1}^e) f_{\mathbf{q}_2}^e$, die bei einer Streuung in bzw. aus einem Zustand immer auftritt. Die Streuterme (2.105) sorgen für die Relaxation der Elektron-Besetzungen und das Dephasieren der Interband-Polarisationen. Dabei sind auch Relaxationsprozesse zwischen beiden entarteten Valenzbändern möglich. Bei allen Prozessen bleibt die Teilchenzahl im Leitungsband bzw. die Gesamtteilchenzahl beider Valenzbänder für jede Entartungsgruppe erhalten.

Für Elektronendichten ($\lambda = \rho$) entsprechen die unteren beiden Zeilen der Streuterme (2.105) den komplex-konjugierten ersten beiden Zeilen. Damit sind die Streuterme für Dichten, wie zu erwarten war, reell.

Abschließend sollen noch einige Bemerkungen zu möglichen Näherungen bei der Auswertung des Integral-Operators (2.104) gemacht werden. Dabei soll vor allem auf die häufig verwendete Markov-Näherung eingegangen werden.

2.4.4 Bemerkungen zur Markov-Näherung

Das Integral aus Gleichung (2.104) kann in einfacher Weise genähert werden, sofern die Funktion $y(t)$ im Vergleich zur Phase $\exp((i\Omega - \eta)t)$ langsam veränderlich ist. Dafür zerlegt man das Intervall $[-\infty, t]$ in unendlich viele Teilintervalle gleicher Länge:

$$[-\infty, t] = \bigcup_{i=0}^{\infty} [t_{i+1}, t_i] \text{ mit } t_0 = t, t_i > t_{i+1}, t_i - t_{i+1} = \Delta t \quad (2.106)$$

Die Intervall-Länge Δt kann dabei beliebig klein gewählt werden. Damit kann das Integral in eine Summe von Integralen über die Teilintervalle zerlegt und die langsam veränderliche Funktion $y(t)$ innerhalb der Intervalle durch Taylor-Reihen approximiert werden. Die Taylor-Reihe sollte bei langsam veränderlichem $y(t)$ nach wenigen Termen konvergieren:

$$\int_{-\infty}^t dx e^{(i\Omega - \eta)(t-x)} y(x) = \sum_{i=0}^{\infty} e^{(i\Omega - \eta)(t-\tau_i)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{(n)}(\tau_i)}{n!} \underbrace{\int_{-\Delta t/2}^{+\Delta t/2} dz z^n e^{-(i\Omega - \eta)z}}_{I_n} \quad (2.107)$$

$$\text{mit } \tau_i = t_{i+1} + \Delta t/2 = t_i - \Delta t/2 \text{ und } y^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} y(x)$$

Die dabei auftretenden Integrale I_n lassen sich iterativ lösen:

$$\int_{-\Delta t/2}^{+\Delta t/2} dz z^n e^{-(i\Omega - \eta)z} = - \frac{z^n e^{-(i\Omega - \eta)z}}{(i\Omega - \eta)} \Big|_{-\Delta t/2}^{+\Delta t/2} + \frac{n I_{n-1}}{(i\Omega - \eta)} \quad (2.108)$$

Somit kann das Ausgangsintegral nach Ordnungen von $(i\Omega - \eta)^{-1}$ entwickelt werden:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^t dx e^{(i\Omega - \eta)(t-x)} y(x) \\ &= - \sum_{i=0}^{\infty} e^{(i\Omega - \eta)(t-\tau_i)} \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{n=q}^{\infty} \frac{1}{(n-q)!} y^{(n)}(\tau_i) \frac{z^{n-q} e^{-(i\Omega - \eta)z}}{(i\Omega - \eta)^{q+1}} \Big|_{-\Delta t/2}^{+\Delta t/2} \\ &= - \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{(i\Omega - \eta)(t-t_i)}}{(i\Omega - \eta)^{q+1}} \sum_{n=q}^{\infty} \frac{1}{(n-q)!} y^{(n)}(\tau_i) (+\Delta t/2)^{n-q} \\ & \quad + \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{(i\Omega - \eta)(t-t_{i+1})}}{(i\Omega - \eta)^{q+1}} \sum_{n=q}^{\infty} \frac{1}{(n-q)!} y^{(n)}(\tau_i) (-\Delta t/2)^{n-q} \\ &= - \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{(i\Omega - \eta)(t-t_i)}}{(i\Omega - \eta)^{q+1}} y^{(q)}(t_i) + \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{(i\Omega - \eta)(t-t_{i+1})}}{(i\Omega - \eta)^{q+1}} y^{(q)}(t_{i+1}) \\ &= - \sum_{q=0}^{\infty} \frac{y^{(q)}(t)}{(i\Omega - \eta)^{q+1}} \end{aligned} \quad (2.109)$$

Da die optische Anregung langsam eingeschaltet wird, verschwinden alle Anfangsbeiträge von $y(t)$, d.h. $y^n(t = -\infty) = 0$. Dasselbe Ergebnis erhält man auch durch mehrmalige partielle Integration des Ausgangsintegrals. Dabei wird aber nicht so deutlich, warum die q -Summe nach wenigen Termen abgebrochen werden kann.

Häufig wird in der so genannten Markov-Näherung nur der ($q = 0$)-Term berücksichtigt:

$$x(t) = i \int_{-\infty}^t dx e^{(i\Omega - \eta)(t-x)} y(x) \simeq \frac{-y(t)}{\Omega + i\eta} + O((i\Omega - \eta)^{-2}) \quad (2.110)$$

In dieser Näherung tragen nur die aktuellen Werte von $y(t)$ bei, die Phonon-Streuung wird instantan. Alle Beträge von früheren Zeitpunkten haben keinen direkten Einfluss auf die Dynamik von $x(t)$ (Vernachlässigung von Memory-Effekten). Bei der optischen Anregung mit einem resonanten 2ω - und einem nichtresonanten ω -Puls ist jedoch während der Anregung nicht zu erwarten, dass die auftretenden Polarisierungen und Dichten langsam veränderlich sind bzw. durch Separation einer Phase langsam veränderlich gemacht werden können. Entsprechende Vergleiche zwischen der Markov-Näherung und der Auswertung des vollen Integrals werden später bei der Auswertung der numerischen Ergebnisse in Abschnitt 2.5.7 gezeigt.

2.4.5 Zusammenfassung

In den vorangegangenen drei Abschnitten wurde der Bandstruktur-, Coulomb- und Phonon-Beitrag zur Dynamik der Elektron-Besetzungen und Interband-Polarisationen hergeleitet. In diesem Abschnitt sollen die Ergebnisse nochmals kurz zusammengefasst werden. Verwendet man LO-Gleichgewichtsphononen, haben alle auftretenden Wellenvektoren keine z -Komponente. Im Folgenden kann daher auf eine explizite Kennzeichnung "||" des Wellenvektors als Anteil parallel zur Quantenfilmebene verzichtet werden, d.h mit \mathbf{k} ist im Folgenden $\mathbf{k}_{||}$ gemeint.

Betrachtet man die optischen Bloch-Gleichungen (2.93) und die Hartree-Fock-Beiträge (2.96), so können die optischen Matrixelemente und die Coulomb-Beiträge zu verallgemeinerten Matrixelementen zusammengefasst werden. Die dabei entstehenden Terme entsprechen verallgemeinerten Rabi-Frequenzen und Energie-Renormierungen. Die reellen Renormierungen enthalten neben den üblichen Termen (vgl. Referenz [56]) zusätzlich auch Intraband-Matrixelemente:

$$\begin{aligned} \text{Rabi-Frequenzen: } \lambda \neq \rho \\ \Omega_{c_{1m}\mathbf{k}}^{v\lambda m\mathbf{k}} &= \mathbf{A}_{||} \cdot \Pi_{c_{1m}\mathbf{k}}^{v\lambda m\mathbf{k}} + \sum_{\mu, \mathbf{q}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}^{2d} F_{c_{1m}\mathbf{k}|c_{1m}\mathbf{q}}^{v\lambda m\mathbf{k}} p_{v\mu m\mathbf{q}}^{c_{1m}} \\ \Omega_{v_{\rho m}\mathbf{k}}^{v\lambda m\mathbf{k}} &= \mathbf{A}_{||} \cdot \Pi_{v_{\rho m}\mathbf{k}}^{v\lambda m\mathbf{k}} + \sum_{\sigma, \mu, n, \mathbf{q}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}^{2d} F_{v_{\rho m}\mathbf{k}|v_{\mu n}\mathbf{q}}^{v\lambda m\mathbf{k}} \bar{x}_{v\mu n\mathbf{q}}^{v\sigma n} \\ \text{Energie-Renormierungen:} \\ \Omega_{v_{\lambda m}\mathbf{k}}^{v\lambda m\mathbf{k}} &= \mathbf{A}_{||} \cdot \Pi_{v_{\lambda m}\mathbf{k}}^{v\lambda m\mathbf{k}} + \sum_{\sigma, \mu, n, \mathbf{q}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}^{2d} F_{v_{\lambda m}\mathbf{k}|v_{\mu n}\mathbf{q}}^{v\lambda m\mathbf{k}} \bar{x}_{v\mu n\mathbf{q}}^{v\sigma n} \\ \Omega_{c_{1m}\mathbf{k}}^{c_{1m}\mathbf{k}} &= \mathbf{A}_{||} \cdot \Pi_{c_{1m}\mathbf{k}}^{c_{1m}\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}^{2d} F_{c_{1m}\mathbf{k}|c_{1m}\mathbf{q}}^{c_{1m}\mathbf{k}} f_{c_{1m}\mathbf{q}}^e \end{aligned} \quad (2.111)$$

Demnach entsprechen die Halbleiter-Bloch-Gleichungen formal den Bloch-Gleichungen, wenn man $\mathbf{A}_{||} \cdot \Pi_{\rho\mathbf{k}}^{\lambda\mathbf{k}}$ durch $\Omega_{\rho\mathbf{k}}^{\lambda\mathbf{k}}$ ersetzt. Für die Polarisierungen und Dichten erhält man so-

mit folgende Bewegungsgleichungen ($m \in \{U, L\}$):

$$\begin{aligned}
\partial_t p_{\rho m \mathbf{k}}^{\lambda m} &= \frac{i}{\hbar} (E_{\lambda k}^e - E_{\rho k}^e) p_{\rho m \mathbf{k}}^{\lambda m} - \frac{i}{\hbar} \Omega_{\lambda m \mathbf{k}}^{\rho m \mathbf{k}} [f_{\rho m \mathbf{k}}^e - f_{\lambda m \mathbf{k}}^e] \\
&\quad - \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{\tau \neq \rho} \Omega_{\lambda m \mathbf{k}}^{\tau m \mathbf{k}} p_{\rho m \mathbf{k}}^{\tau m} - \sum_{\tau \neq \lambda} p_{\tau m \mathbf{k}}^{\lambda m} \Omega_{\tau m \mathbf{k}}^{\rho m \mathbf{k}} \right] + \partial_t p_{\rho m \mathbf{k}}^{\lambda m}|_{ep} \\
\partial_t f_{\lambda m \mathbf{k}}^e &= \frac{2}{\hbar} \sum_{\tau \neq \lambda} \text{Imag} \left[\Omega_{\lambda m \mathbf{k}}^{\tau m \mathbf{k}} p_{\lambda m \mathbf{k}}^{\tau m} \right] + \partial_t f_{\lambda m \mathbf{k}}^e|_{ep}
\end{aligned} \tag{2.112}$$

Die mit ”|_{ep}” gekennzeichneten Terme beinhalten formal die Elektron-Phonon-Korrelationen (2.105). In dieser Darstellung entsprechen die Bewegungsgleichungen im Wesentlichen der üblichen Form der Halbleiter-Bloch-Gleichungen, wie man sie z.B. Referenz [56] entnehmen kann. Der Unterschied besteht neben der Verwendung des Elektronbildes vor allem im Auftreten der Intradband-Matrixelemente in den Energie-Renormierungen und der Verwendung zweier Valenzbänder. Im Gegensatz zu den Bewegungsgleichungen in Längeneichung aus [30, 29, 91], bei denen die Beschleunigungsterme sowohl für Dichten ($\propto \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^e$) als auch für Polarisationen ($\propto \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}$) auftreten, findet man bei Verwendung der Geschwindigkeitseichung keine Intradband-Matrixelemente in den Bewegungsgleichungen der Elektronendichten. Die Asymmetrien der Ladungsverteilungen und die daraus resultierenden Ströme werden nur indirekt über die Polarisationen erzeugt.

Hiermit kann die Herleitung der theoretischen Grundlagen abgeschlossen und die Bewegungsgleichungen im folgenden Abschnitt numerisch ausgewertet werden.

2.5 Kohärente optische Erzeugung von Spin- und Ladungsströmen

Wie bereits erwähnt, sind quantenmechanische Interferenzphänomene Konsequenzen des Superpositionsprinzips und können in atomaren, molekularen, biologischen und Halbleiter-Systemen zur Steuerung von dynamischen Prozessen in Nicht-Gleichgewichtssituationen verwendet werden [19, 145, 46, 15, 57, 127]. Ein in den letzten Jahren häufig untersuchter Aspekt

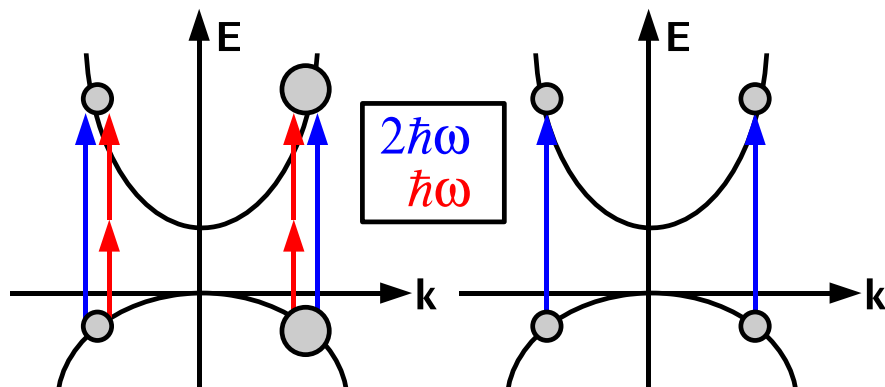


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Interband-Anregung für ein Zwei-Band-Modell: Rechts ist die optische Anregung durch einen Laserpuls mit Zentralfrequenz 2ω dargestellt. Dabei werden Elektronen aus dem Valenzband in das Leitungsband angeregt, wobei die Anregung symmetrisch im k -Raum ist. Auf der linken Seite ist die Anregung durch zwei Laserpulse mit Zentralfrequenzen ω und 2ω dargestellt. Aufgrund von Interferenzphänomenen können dabei Verteilungen erzeugt werden, die im k -Raum nicht symmetrisch sind. Die Stärke der Asymmetrie sowie deren Richtung lassen sich über die Phasendifferenz der verwendeten Laserpulse bestimmen.

Bemerkung: Aufgrund der Eigenschaften der optischen Matrixelemente sind alle optischen Anregungen diagonal im k -Raum.

bildet die optische Erzeugung von kohärenten Photoströmen, die im Wesentlichen auf den Vorschlag von Atanasov et. al. [2] aus dem Jahr 1996 zurückgeht und im Jahr 1997 experimentell nachgewiesen werden konnte [50]. Anstatt die in das Leitungsband eines Halbleiters angeregten Elektronen durch ein schwaches, äußeres, statisches Feld zum Strömen anzuregen, sollten Ladungsströme unter Ausnutzung der Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen erzeugt werden. Dafür muss der Halbleiter, wie in Abbildung 2.4 schematisch dargestellt, mit zwei linear parallel zueinander polarisierten Pulsen mit Zentralfrequenzen ω und 2ω oberhalb der Bandkante E_G angeregt werden:

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_\omega(t) + \mathbf{A}_{2\omega}(t) = A_\omega G(t) \cos(\omega t + \phi_\omega) \mathbf{e}_\omega + A_{2\omega} G(t) \cos(2\omega t + \phi_{2\omega}) \mathbf{e}_{2\omega} \quad (2.113)$$

mit $\hbar\omega < E_G < 2\hbar\omega$ und $\mathbf{e}_\omega \parallel \mathbf{e}_{2\omega}$

Hierbei sind A_ν und ϕ_ν die Amplitude und Phase sowie \mathbf{e}_ν die Polarisationsrichtung und $G(t)$ die langsam veränderliche Einhüllende ($\nu \in \{\omega, 2\omega\}$). Durch leichte Änderung der Anrengungsbedingungen, der Verwendung zweier senkrecht zueinander linear polarisierten ω - und 2ω -Laserpulse, lassen sich nach dem Vorschlag von R.D.R. Bhat und J.E. Sipe [11] aus dem Jahr 2000 auch reine Spinströme erzeugen, die nicht von einem Ladungsstrom begleitet wer-

den:

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_\omega(t) + \mathbf{A}_{2\omega}(t) = A_\omega G(t) \cos(\omega t + \phi_\omega) \mathbf{e}_\omega + A_{2\omega} G(t) \cos(2\omega t + \phi_{2\omega}) \mathbf{e}_{2\omega} \quad (2.114)$$

mit $\hbar\omega < E_G < 2\hbar\omega$ und $\mathbf{e}_\omega \perp \mathbf{e}_{2\omega}$

Ein experimenteller Nachweis dieser Ströme konnte drei Jahre später in Halbleitern von Ste-

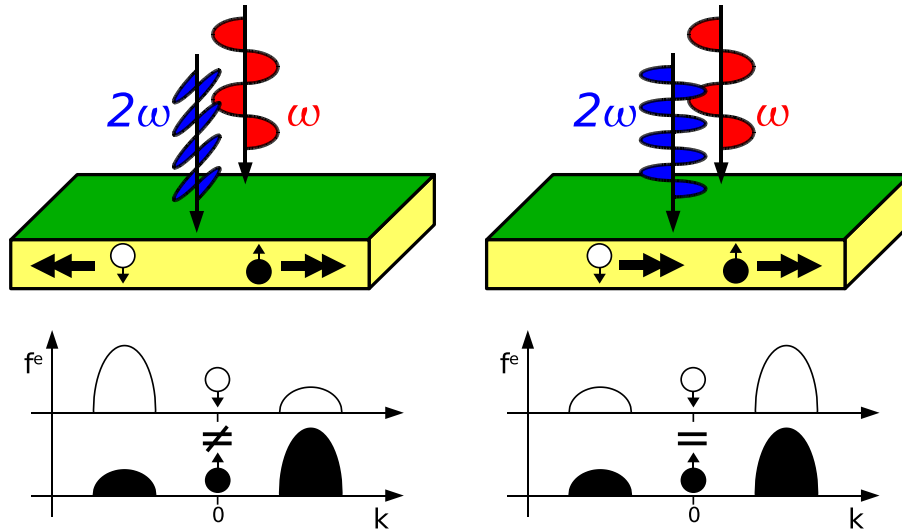


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der kohärenten optischen Erzeugung von Strömen: Links (rechts) ist eine Anregung mit linear senkrecht (parallel) zueinander polarisierten Licht mit Zentralfrequenzen ω und 2ω dargestellt. Durch die optische Anregung werden Spinströme (Ladungsströme) erzeugt. Bei der Erzeugung von Ladungsströmen werden die Elektronen eines Bandes unabhängig von ihrer Spin-Orientierung in die gleiche Richtung beschleunigt. Die Elektronen haben damit einen nicht verschwindenden mittleren Impuls. Beim Auftreten von Spinströmen ist die Richtung der Beschleunigung abhängig von der Spin-Orientierung, wobei sich die Ströme nur im Vorzeichen, nicht aber im Betrag unterscheiden. Daher verschwindet der gemittelte Elektronimpuls.

vens et al. [131, 130] und unabhängig davon von Hübner et al. [60] geführt werden. Beide Anregungskonfigurationen, die für Ladungs- und die für Spinströme, sind schematisch in Abbildung 2.5 dargestellt.

In Ladungsstrom-Konfiguration (rechte Seite von Abbildung 2.5) werden durch die optische Zwei-Puls-Anregung Elektronverteilungen erzeugt, die im k -Raum eine bestimmte Vorzugsrichtung aufweisen. Diese Verteilungen sind unabhängig vom Spin und entsprechen einem makroskopischen Ladungsstrom in positive oder negative Polarisationsrichtung. Das Vorzeichen des Stroms wird durch die Phase der verwendeten Laserpulse vorgegeben und folgt nachstehendem Gesetz:

$$j_{\text{Ladung}} \propto A_\omega^2 A_{2\omega} \cos(2\phi_\omega - \phi_{2\omega}) \quad (\text{vgl. Referenz [88]}) \quad (2.115)$$

Hierbei sind A_ω und $A_{2\omega}$ die Amplituden sowie ϕ_ω und $\phi_{2\omega}$ die Phasen der beiden Laserpulse. Auch die in Spinstrom-Konfiguration (linke Seite von Abbildung 2.5) erzeugten Elektronenbesetzungen weisen im k -Raum eine bestimmte Vorzugsrichtung auf. Nach der optischen Anregung liegt jedoch kein makroskopischer Ladungsstrom vor, da die zu Elektronen mit unterschiedlichem Spin gehörenden Verteilungen genau entgegengesetzte Ströme erzeugen.

Anstelle von Ladungen werden damit Spins transportiert. Der Spinstrom geht in positive oder negative Polarisationsrichtung des ω -Pulses, wobei das Vorzeichen von der Spinorientierung und den Phasen der beiden Laserpulse bestimmt wird:

$$j_{Spin} \propto A_{\omega}^2 A_{2\omega} \sin(2\phi_{\omega} - \phi_{2\omega}) \quad (\text{vgl. Referenz [88]}) \quad (2.116)$$

Demnach erhält man maximale Ladungsströme, wenn die Phasendifferenz $2\phi_{\omega} - \phi_{2\omega}$ einem ganzzahligen Vielfachen von π entspricht, und maximale Spinströme, wenn die Phasendifferenz $2\phi_{\omega} - \phi_{2\omega}$ einem halbzahligen Vielfachen von π entspricht.

Zu den Heisenberg-Gleichungen aus Abschnitt 2.4 werden nun im Folgenden einige numerische Simulationen durchgeführt. Dafür sollen aber an dieser Stelle nochmals die Grundzüge der verwendeten Theorie zusammengefasst werden. Die Theorie beruht auf den Halbleiter-Bloch-Gleichungen in einem Drei-Band-Modell, bestehend aus einem Leitungs- und zwei Valenzbändern. Die Bandstruktur und alle benötigten Matrixelemente werden wie in den Referenzen [87, 88] über die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie berechnet (vgl. Abschnitt 2.2–2.3). Die verwendeten Matrixelemente berücksichtigen die volle Abhängigkeit vom Betrag $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ und dem Winkel $\angle \mathbf{k}_{\parallel}$ der Wellenvektoren. Dies gilt insbesondere auch für die Coulomb-Matrixelemente, die nicht, wie in vielen anderen Publikationen [44], mit effektiven Einhüllenden, sondern mit den vollen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen berechnet werden. Ferner wird die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen auf der Ebene einer unabgeschirmten dynamischen Hartree-Fock-Näherung [56] beschrieben. Die Streuung zwischen Elektronen und dispersionslosen LO-Phononen wird in zweiter Born'scher Näherung behandelt. Näherungsweise werden dabei die Phononenbesetzungen als statische Gleichgewichtsverteilungen angesetzt. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung beinhaltet Memory-Effekte, es wird also keine Markov-Näherung verwendet. Eine Berücksichtigung von Ladungsträger-Ladungsträger-Streutermen ist aus numerischen Gründen derzeit noch nicht möglich. In zukünftigen Untersuchungen könnten dafür aber unter Umständen Monte-Carlo-Techniken eingesetzt werden.

Im Folgenden soll zunächst in Abschnitt 2.5.1 die Frage geklärt werden, welche Ströme untersucht und welche Bezeichnungen dafür angebracht sind. In der Einführung wurde teilweise von Spinorientierung, Spinströmen, etc. gesprochen. Der Spin ist in den Valenzbändern jedoch im Gegensatz zu den Leitungsbändern keine gute Quantenzahl mehr. Daher muss mit diesen Begriffen etwas vorsichtiger umgegangen werden.

Danach sollen in Abschnitt 2.5.2 die in dieser Arbeit verwendeten Modellsysteme mit ihren Bandstrukturen, Wellenfunktionen und optischen Matrixelementen vorgestellt werden. Aufgrund von Verspannungseffekten [24] ist das zweite Valenzband am Γ -Punkt für das eine System hh - und für das andere System lh -artig. In ersten numerischen Ergebnissen sollen dann ab Abschnitt 2.5.4 Coulomb-bedingte Phasenverschiebungen untersucht und Bilder zur Entstehung und Relaxation von Spin- und Ladungsströme gezeigt werden. Dabei soll es vor allem um Effekte gehen, die durch die Wechselwirkung von hh - und lh -artigen Anteilen der Matrixelemente bestimmt werden. Erklärungen für einige dieser Effekte liefert Abschnitt 2.5.5 mit einem einfachen theoretischen Modell. Abschließend sollen in Passage 2.5.7 numerische Ergebnisse zur Markov-Näherung gezeigt werden und diese mit Rechnungen, die Gedächtniseffekte beinhalten, verglichen werden.

2.5.1 Einführung und Definitionen

In diesem Abschnitt soll kurz auf die nachfolgend im Zusammenhang mit den Strömen verwendeten Terminologien und Definitionen eingegangen werden. Hierbei wird insbesondere auf Probleme bei der Berechnung und Definition von Spinströmen in der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Darstellung aufmerksam gemacht.

Die formale Definition der makroskopischen Stromdichte ist schon im ersten Kapitel bei der Analyse der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen eingeführt worden. Laut Gleichung (1.32) lässt sich diese über die Funktionalableitung des Wechselwirkungsanteils H_I bestimmen. Der zugehörige Strom berechnet sich durch Integration der Stromdichte über das Kristallvolumen:

$$\mathbf{j} = \int d^3r \frac{q}{m} \psi^\dagger (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \psi \quad (2.117)$$

Die Ladung q entspricht im vorliegenden Fall der negativen Ladung eines Elektrons ($-e$ mit $e=1.602 \times 10^{-19}C$). Wie schon bei der Herleitung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen festgesetzt wurde, soll das anregende Lichtfeld senkrecht zum Quantenfilm propagieren (TM-Anteil). Für diese Wahl sollte es sich innerhalb des Quantenfilms nur unwesentlich ändern, da dieser im Vergleich zu einer Lichtwellenlänge vernachlässigbar dünn ist. Das Feld \mathbf{A} entspricht näherungsweise dem lokalen Wert an der Quantenfilm-Position. Entwickelt man die Gesamtstromdichte (2.117) in den $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Eigenfunktionen aus den Abschnitten 2.2.2 und 2.2.3, liefert der erste Teil ($\propto \mathbf{p}$) die optischen Inter- und Intra-Band-Matrixelemente aus Passage 2.3.1, während der zweite Anteil ($\propto e\mathbf{A}$) aufgrund der Orthogonalität der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Eigenfunktionen proportional zur Gesamtelektronendichte ist. Damit erhält man folgenden Ladungsstrom:

$$\mathbf{j} = \sum_{m \in \{U, L\}} \sum_{\lambda, \rho, \mathbf{k}_\parallel} \Pi_{\rho m \mathbf{k}_\parallel}^{\lambda m \mathbf{k}_\parallel} |_{TM} \langle a_{\lambda m \mathbf{k}_\parallel}^+ a_{\rho m \mathbf{k}_\parallel} \rangle - \frac{e^2 \mathbf{A}_\parallel}{m_0} n_e \quad (2.118)$$

mit $\Pi_{\rho m \mathbf{k}_\parallel}^{\lambda m \mathbf{k}_\parallel} = -\frac{e}{m_0} \langle \lambda \mathbf{k}_\parallel | \mathbf{p}_\parallel | \rho \mathbf{k}_\parallel \rangle$

Hierbei ist n_e die homogene Elektronendichte der Ortsdarstellung. Die optischen TM-Matrixelemente sind, wie in Abschnitt 2.3.1 gezeigt, diagonal im Wellenvektor \mathbf{k}_\parallel und der Entartungsgruppe. Die explizite Kennzeichnung als TM-Anteil soll im Folgenden weggelassen werden.

Der zum Vektorpotential proportionale Stromanteil ist für die im Rahmen dieser Arbeit relevanten Fragestellungen unerheblich, da er nur während der optischen Anregung wesentliche Beiträge liefert, für längere Zeiten jedoch aufgrund der Proportionalität zum Vektorpotential schnell abfällt (vgl. Gleichungen (2.122) und (2.123) zur Definition von \mathbf{A}_\parallel).

Der erste Teil lässt sich in drei Komponenten zerlegen. Für das verwendete Drei-Band-Modell sind das der hochfrequente Interband-Polarisationsstrom

$$\mathbf{j}_{cv}^{inter} = \sum_{m \in \{U, L\}} \left[\sum_{\lambda \in \{1, 2\}} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \Pi_{c_{1m} \mathbf{k}_\parallel}^{v_{\lambda m} \mathbf{k}_\parallel} p_{c_{1m} \mathbf{k}_\parallel}^{v_{\lambda m}} + c.c. \right] \quad (2.119)$$

der niederfrequente Intervallenzband-Polarisationsstrom

$$\mathbf{j}_{vv}^{inter} = \sum_{m \in \{U, L\}} \left[\sum_{\mathbf{k}_\parallel} \Pi_{v_{2m} \mathbf{k}_\parallel}^{v_{1m} \mathbf{k}_\parallel} p_{v_{2m} \mathbf{k}_\parallel}^{v_{1m}} + c.c. \right] \quad (2.120)$$

sowie die Leitungs- und Valenzbandströme

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{cc}^{intra} &= \sum_{m \in \{U, L\}} \left[\sum_{\mathbf{k}_\parallel} \Pi_{c_{1m} \mathbf{k}_\parallel}^{c_{1m} \mathbf{k}_\parallel} f_{c_{1m} \mathbf{k}_\parallel}^e \right] \\ \mathbf{j}_{vv}^{intra} &= \sum_{m \in \{U, L\}} \left[\sum_{\lambda \in \{1, 2\}} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \Pi_{v_{\lambda m} \mathbf{k}_\parallel}^{v_{\lambda m} \mathbf{k}_\parallel} f_{v_{\lambda m} \mathbf{k}_\parallel}^e \right]. \end{aligned} \quad (2.121)$$

Der hochfrequente Polarisationsstrom fällt mit Abklingen des anregenden Lichtfeldes sehr schnell ab und trägt, zumindest bei den hier durchgeführten Simulationen, nur während der Anregung zum Strom bei. Er wird daher im Folgenden ignoriert. Im Gegensatz zu vielen bisherigen Veröffentlichungen, die sich auf Zwei-Band-Modelle oder auf mit Fermi's Goldener Regel berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten stützen, werden im Folgenden auch Stromanteile berücksichtigt, die zu Intersubband-Übergängen gehören. Direkte Messungen des elektrischen Stromes, z.B. über die durch Ladungsakkumulation aufgebaute Spannung [50], sind sensitiv auf die niederfrequenten Anteile, während die hohen (optischen) Frequenzen nicht zeitaufgelöst werden können und bei der Zeitintegration verschwinden.

Der Hauptteil der folgenden Untersuchungen wird sich auf die Intraleitungsband-Ströme konzentrieren. Dies hat mehrere Gründe. Zum einen liefern diese Ströme den größten Anteil zum Gesamtstrom, zum anderen ist der Spin nur im Leitungsband wohl definiert. Bei der Untersuchung von Spinströmen beschränkt sich diese Arbeit daher wie Referenz [87] auf die Auswertung des Leitungsband-Anteils. Die Valenzbänder haben hingegen Wellenfunktionsanteile mit beiden Spinorientierungen, was man schon den Volumeneigenfunktionen aus Gleichung (2.19) entnehmen kann. Eine Übertragung der Spinströme auf das vorliegende System kann jedoch durch die Einführung von Entartungsströmen vorgenommen werden. Die optische Anregung in Spinstrom-Konfiguration führt dabei in den einzelnen Bändern zu Strömen, die für Elektronen mit unterschiedlicher Entartungszahl $m \in \{U, L\}$ einander entgegengesetzt sind. Die Abhängigkeit dieser Ströme von den Phasen der anregenden ω - und 2ω -Pulse entspricht der von normalen Spinströmen aus Gleichung (2.116). Diese Eigenschaften sollten von der Verwendung der symmetrisierten Valenzbandfunktionen kommen.

Bevor im folgenden Abschnitt die Modellsysteme vorgestellt werden, sollen hier noch kurz die bei den numerischen Simulationen verwendeten Parameter aufgelistet werden. Zur optischen Anregung wird folgendes Feld verwendet

$$\mathbf{A}(t) = A_\omega G(t) \cos(\omega t + \phi_\omega) \mathbf{e}_\omega + A_{2\omega} G(t) \cos(2\omega t + \phi_{2\omega}) \mathbf{e}_{2\omega}, \quad (2.122)$$

wobei der ω -Puls immer in x-Richtung polarisiert ist, d.h. $\mathbf{e}_\omega = \mathbf{e}_x$. Die gewöhnlichen Spin- und Ladungsströme sind damit auf die x-Richtung festgelegt. Die Polarisationsrichtung des 2ω -Pulses ist für Ladungsstrom-Konfiguration die x-Richtung, d.h. $\mathbf{e}_{2\omega} = \mathbf{e}_x$, und für die Spinstrom-Konfiguration die y-Richtung, d.h. $\mathbf{e}_{2\omega} = \mathbf{e}_y$. Die Gauß'sche Einhüllende

$$G(t) = \exp(-B_0 t^2) \quad \text{mit } B_0 = \frac{4 \log(2)}{\tau_{Zeit}^2} \quad (2.123)$$

hat eine volle zeitliche Halbwertsbreite von $\tau_{Zeit} = 50 \text{ fs}$. Umgerechnet auf die Intensität entspricht dies einer vollen spektralen Halbwertsbreite $\tau_{Energie} = 51.6 \text{ meV}$. Da die Stärke und Richtung der Ströme nur durch die Phasendifferenz $2\phi_\omega - \phi_{2\omega}$ bestimmt wird,

kann eine der beiden Phasen konstant gehalten werden. Im vorliegenden Fall wird grundsätzlich $\phi_\omega = 0$ gesetzt. Die Zentralfrequenzen werden so gewählt, dass an der Bandkante bzw. 50 meV oder 150 meV oberhalb der Bandkante angeregt wird, d.h. $(2\hbar\omega - E_G) \in \{0\text{ meV}, 50\text{ meV}, 150\text{ meV}\}$. Zudem werden die Amplituden mit $A_\omega = -6 \times 10^7\text{ Vs/m}$ und $A_{2\omega} = -3 \times 10^6\text{ Vs/m}$ konstant gehalten. Damit werden relativ niedrige Dichten ($f_{\lambda_m \mathbf{k}}^e < 10^{-2}$) erzeugt. Für diesen Fall sollten die vernachlässigten Beträge zur Relaxation durch Ladungsträger-Ladungsträger-Streuung aufgrund deren Proportionalität zu

$$f_{\mathbf{k}}^e(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e)f_{\mathbf{k}'}^e(1 - f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^e) \text{ bzw. } f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e(1 - f_{\mathbf{k}}^e)f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^e(1 - f_{\mathbf{k}'}^e) \quad (\text{vgl. [56]})$$

zumindest für das Leitungsband nicht so entscheidend sein. Diese Terme überprüfen, inwieweit beide Ausgangszustände besetzt und die Endzustände frei sind. Für die Valenzbänder ist die Relaxation über LO-Phononen weniger geeignet, da der energetische Abstand der unbesetzten Valenzbandzustände zur Valenzbandkante in der Größenordnung von einer LO-Phononen-Energie (ca. 35 meV) liegt. Dies wird später an den numerischen Ergebnissen deutlich werden.

Für das \mathbf{k}_\parallel -Gitter werden Polarkoordinaten verwendet, wobei der Winkel $\angle \mathbf{k}_\parallel$ mit 64 äquidistanten Punkten und der Betrag k_\parallel mit 10 Punkten pro Einheit 10^8 m^{-1} aufgelöst wird. Der maximale k_\parallel -Wert variiert je nach Fragestellung zwischen $6 \times 10^8\text{ m}^{-1}$ und $8 \times 10^8\text{ m}^{-1}$. In den $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnungen wird die Confinement-Richtung mit einer Länge $L_z = 50\text{ nm}$ und periodischen Randbedingungen implementiert. Die Diskretisierung der Länge L_z entspricht mehr als 1000 äquidistanten Punkten. Von der Gesamtlänge entfallen jeweils 8 nm auf das Quantenfilm- und $2 \times 21.5\text{ nm}$ auf das Barrierenmaterial. Zudem werden alle Rechnungen grundsätzlich bei Raumtemperatur $T = 300\text{ K}$ durchgeführt.

Die weitere Spezifizierung der untersuchten Modellsysteme soll nun im Abschnitt 2.5.2 folgen.

2.5.2 Beschreibung der untersuchten Materialsysteme

Nachdem im vorigen Abschnitt die zum Verständnis der numerischen Untersuchungen notwendigen Definitionen eingeführt worden sind, fehlt nur noch eine genaue Beschreibung der verwendeten Halbleiter-Strukturen. Dafür werden zwei Systeme ausgewählt: ein $GaAs$ - bzw. ein $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilm zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ -Barrieren. Die Dicke des Quantenfilms beträgt 8 nm , die Länge L_z der gesamten Struktur in Confinement-Richtung 50 nm . Bei der numerischen Realisierung wurden in z -Richtung periodische Randbedingungen verwendet, was für die gebundenen Valenz- und Leitungsbänder eine gute Näherung darstellen sollte, da ihre Wellenfunktionen innerhalb der Barrieren exponentiell abfallen (vgl. Abbildungen 2.8 und 2.9).

Die für beide Strukturen verwendeten Material-Parameter sind den Referenzen [144, 86] entnommen. Dies sind im Wesentlichen die dielektrischen Konstanten ϵ und ϵ_∞ , die LO-Phonon-Energie E_{LO} , die Leitungsband-Massen m_c , die Gitterkonstanten a_0 , die α - und β -Parameter, die zur Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Bandlücke benötigt werden, die Verspannungsparameter, die Kane-Energien E_P , die Luttinger-Parameter γ_i und Bandlücken $E_G(T = 0\text{ K})$ aus Tabelle 2.1 sowie die Interpolationsformeln für die Bandlücken der Legierungshalbleiter ($Ga_{0.9}In_{0.1}As$, $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$). Die übrigen Werte werden linear interpoliert. Einige ausgewählte Konstanten findet man in Tabelle 2.2. Zudem wird der Valenzband-Offset im Verhältnis 2:1 zwischen den Leitungs- und Valenzbändern aufgeteilt und die Dephasierung der Elektron-Phonon-Korrelationen auf $\eta = 5\text{ meV}$ gesetzt. Diese Dephasierung

	ϵ	ϵ_∞	E_{LO} [meV]
<i>InAs</i>	15.15	12.25	29.58
<i>GaAs</i>	12.40	10.60	35.33

	m_c [m_e]	a_0 [Å]	α [$10^{-4}eV/K$]	β [K]	E_P [eV]
<i>InAs</i>	0.027	6.0583	2.760	93.0	21.5
<i>GaAs</i>	0.0665	5.65325	5.405	204.0	28.8
<i>AlAs</i>	0.124	5.660	8.850	530.0	21.1

Tabelle 2.2: Oben: Dielektrische Konstanten und LO-Phonon-Energien für *GaAs* und *InAs* nach [86]. Unten: Leitungsband-Massen, Gitterkonstanten, α - und β -Parameter und Kane-Parameter für *AlAs*, *GaAs* und *InAs* nach [144]. Die Werte für Legierungshalbleiter wie *Ga_{0.9}In_{0.1}As* werden bis auf die Energie der Bandlücke linear interpoliert.

ist der einzig frei wählbare Materialparameter, der sich nicht an experimentell gemessenen Werten orientiert. Alle anderen Parameter sind folglich durch die für den Quantenfilm und die Barrieren verwendeten Materialien festgelegt. Die in den numerischen Rechnungen bestimmten Werte (Streuzeiten, Phasenverschiebungen, etc.) lassen sich demnach nicht durch irgendwelche abgeschätzten Parameter beliebig manipulieren, wie es bei einer Verwendung von phänomenologischen Relaxationsmodellen möglich gewesen wäre.

Bandstruktur des *GaAs*-Quantenfilms:

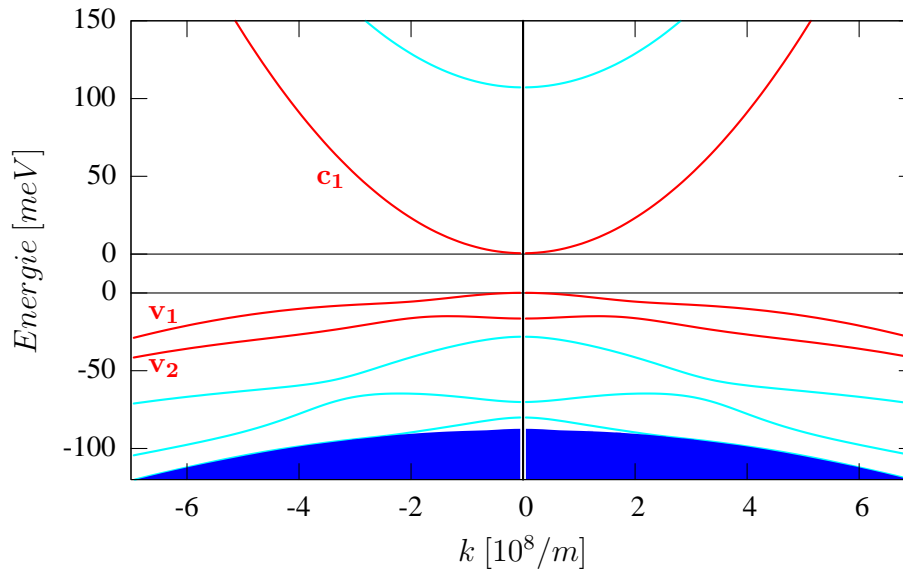


Abbildung 2.6: Bandstruktur eines 8nm dicken *GaAs*-Quantenfilms zwischen *Ga_{0.8}Al_{0.2}As* Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die im Rahmen dieser Arbeit berücksichtigten drei Bänder (zwei Valenzbänder, ein Leitungsband) sind rot, alle anderen im Quantenfilm gebundenen Bänder türkis sowie das ungebundene Kontinuum mit blau gekennzeichnet worden. Das erste Valenzband v_1 ist am Γ -Punkt hh-artig, das zweite Valenzband v_2 hingegen lh-artig. Die Bandlücke beträgt im Quantenfilm $E_G = 1.472eV$.

Die Bandstrukturen der beiden Systeme sind in den Abbildungen 2.6 und 2.7 dargestellt. Darin sind die in den numerischen Berechnungen verwendeten drei Bänder (ein Leitungs-, zwei Valenzbänder) rot markiert worden. Zur Orientierung wurden auch die nicht berücksichtigten Leitungs- und Valenzbänder (türkis) sowie das ungebundene Valenzband-Kontinuum (blau) eingezeichnet. Aufgrund der Verwendung symmetrischer Quantenfilme sind die Bandstrukturen für beide Entartungsgruppen identisch. Das Beimischen von Indium in den einen Quantenfilm bewirkt neben der Reduzierung der Bandlücke auch eine Vertiefung des Quantentopfs, da das Barrierenmaterial unverändert bleibt.

Bei der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung wurde davon ausgegangen, dass die Heterostruktur auf einem $GaAs$ -Kristall gewachsen ist. Da die Gitterkonstante von $InAs$ größer als die von $GaAs$ ist, das Kristallwachstum aber der gesamten Struktur eine einheitliche Gitterkonstante aufzwingt, sind die Atome im $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilm kompressiv verspannt. Durch diese Verspannung werden die am Γ -Punkt hh -artigen Wellenfunktionen tiefer in den Topf hinein gezogen und gleichzeitig die am Γ -Punkt lh -artigen Wellenfunktionen aus dem Topf herausgedrückt [24]. Dadurch haben beide berücksichtigten Valenzbänder der $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Struktur am Γ -Punkt hh -artige Einhüllende. Im Gegensatz dazu ist das oberste Valenzband im unverspannten $GaAs$ -Quantenfilm hh -artig, das zweite Valenzband hingegen lh -artig. Dies lässt sich anhand der k -Abhängigkeit der einzelnen Wellenfunktionsanteile (hh_1, hh_2, lh_1, lh_2) leicht nachweisen. In der $GaAs$ -Struktur trägt am Γ -Punkt von den vier Einhüllenden im v_1 -Band nur der z -symmetrische hh -Anteil sowie im v_2 -Band nur der z -symmetrische lh -Anteil bei (siehe Abbildung 2.8). Im Vergleich dazu sind nach Abbildung 2.9 in der $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Struktur die Γ -Punkt-Einhüllenden beider Valenzbänder hh -artig, wobei im v_1 -Band nur der symmetrische

Bandstruktur des $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilms:

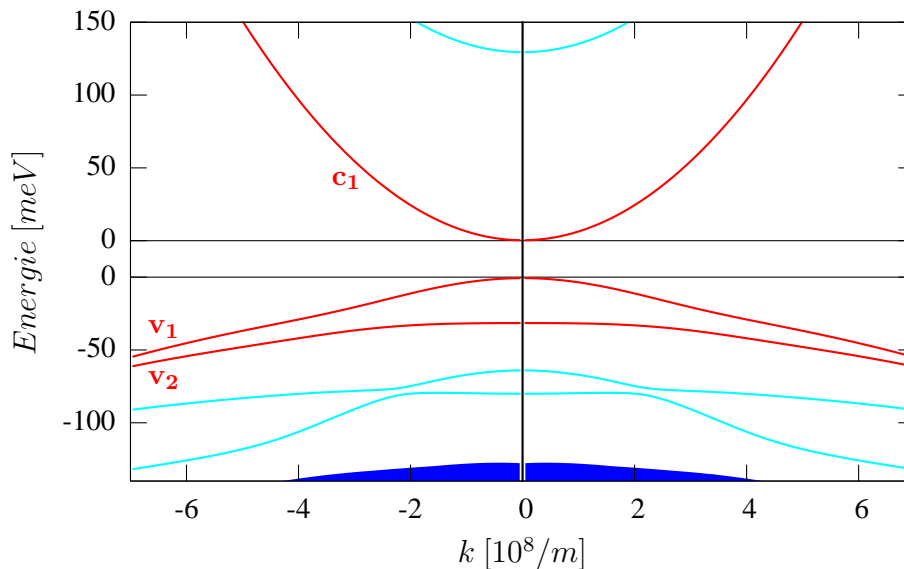


Abbildung 2.7: Bandstruktur eines 8nm dicken $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilms zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die im Rahmen dieser Arbeit berücksichtigten drei Bänder (zwei Valenzbänder, ein Leitungsband) sind rot, alle anderen im Quantentopf gebundenen Bänder türkis sowie das ungebundene Kontinuum mit blau gekennzeichnet worden. Beide Valenzbänder v_1 und v_2 sind aufgrund des kompressiv verspannten Quantenfilms am Γ -Punkt hh -artig. Die Bandlücke beträgt im Quantenfilm $E_G = 1.360eV$.

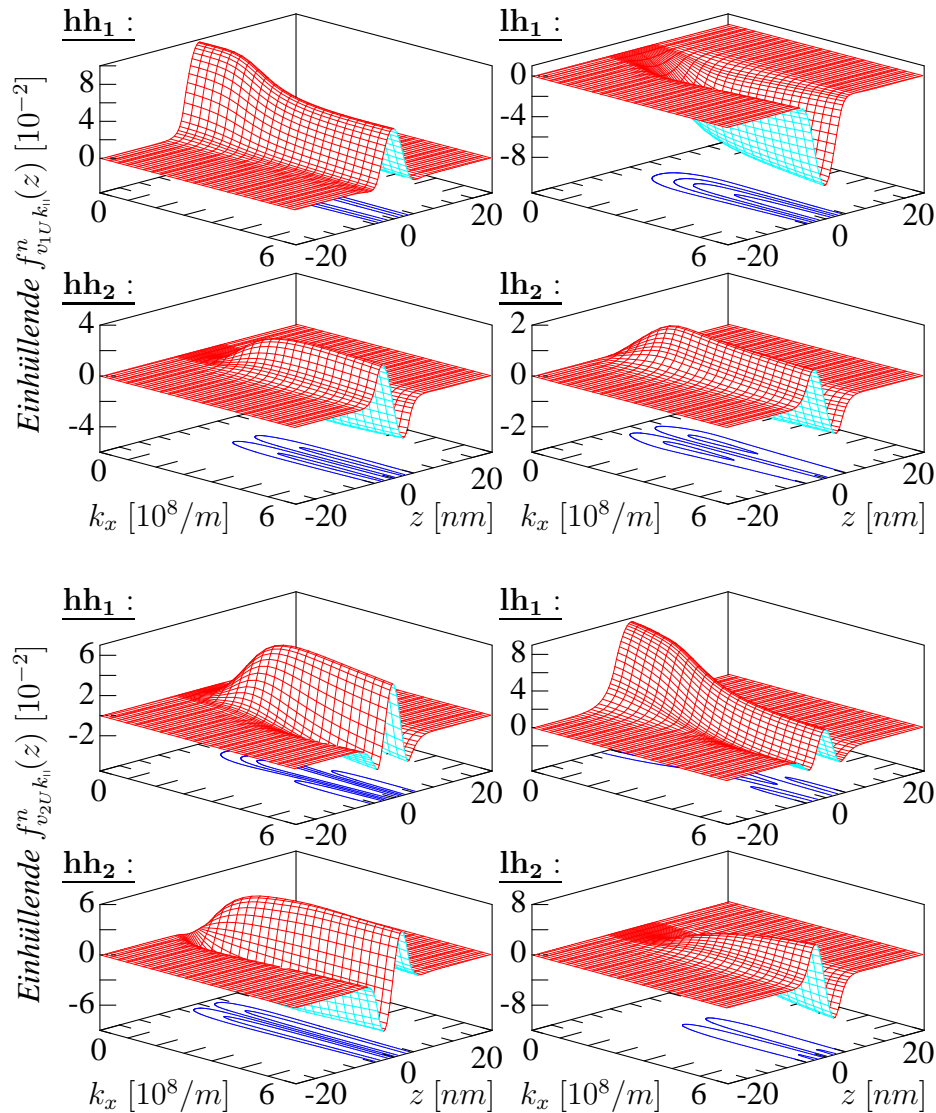
Valenzband-Einhüllende des $GaAs$ -Quantenfilms:

Abbildung 2.8: hh - und lh -artige Einhüllende $f_{\lambda k}^n(z)$ des v_{1U} - (oben) und des v_{2U} -Valenzbandes (unten). Am Γ -Punkt ist die v_{1U} -Wellenfunktion hh -artig, die v_{2U} -Wellenfunktion lh -artig. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $GaAs$ -Quantenfilm zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm , wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind.

und im v_2 -Band nur der antisymmetrische Beitrag ungleich Null ist. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass beide Wellenfunktionen eines entarteten Bandes dieselben Einhüllenden haben, diese jedoch anderen Basisfunktionen $u_0^n(\mathbf{r})$ zugeordnet werden (vgl. Formel (2.54)).

Die Einhüllenden beider Quantenfilme weisen eine unterschiedliche $|k|$ -Abhängigkeit auf. Während das höchsten Valenzband der $GaAs$ -Struktur aufgrund eines Anticrossings in der Bandstruktur zwischen $2 \cdot 10^8/m$ und $3 \cdot 10^8/m$ recht schnell auch lh -artige Anteile aufweist, lässt sich ein Beimischen anderer Valenzbandanteile in der $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Struktur wesentlich später beobachten. Dies liegt nicht zuletzt daran, dass die Terme (2.48)-(2.50) nur hh -artige Einhüllende gleicher Parität miteinander koppeln können, die beiden höchsten Valenzbänder

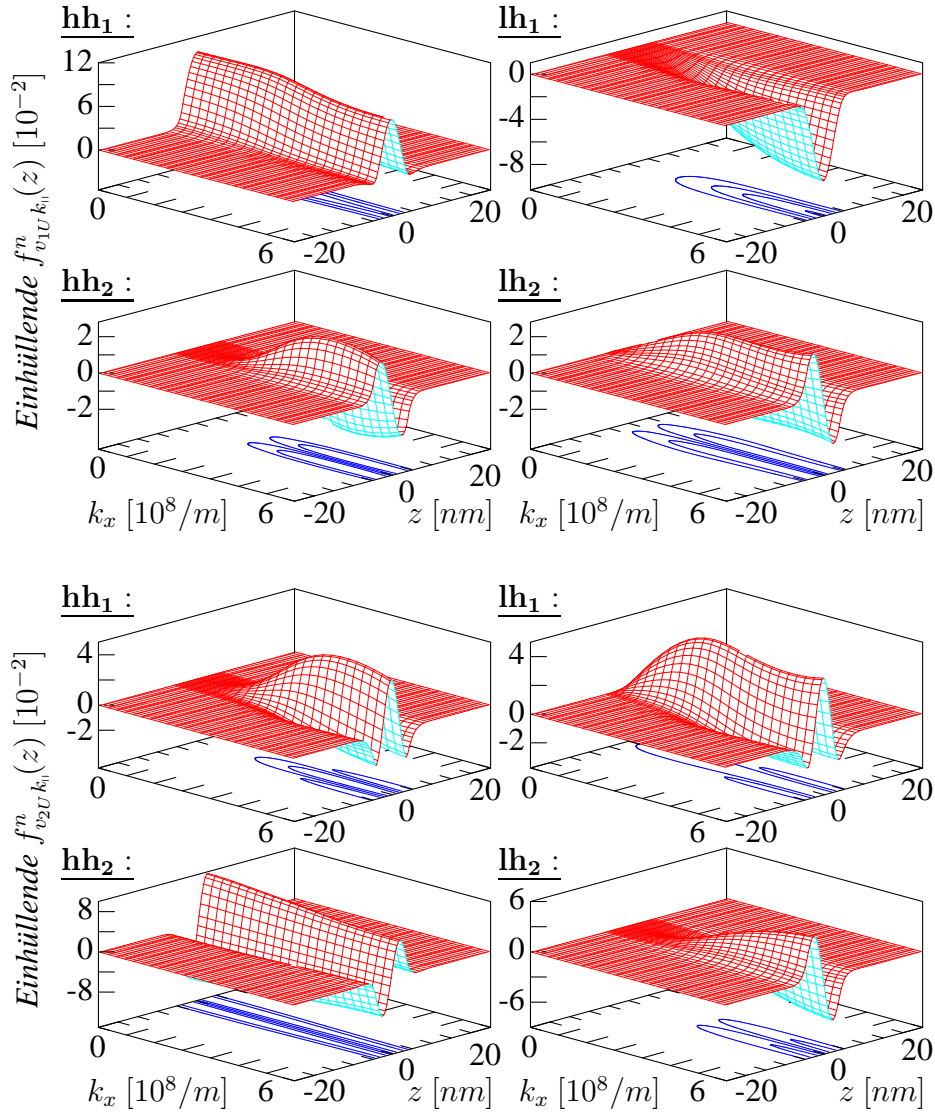
Valenzband-Einhüllende des $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilms:

Abbildung 2.9: *hh- und lh-artige Einhüllende $f_{\lambda k}^n(z)$ des v_{1U} - (oben) und des v_{2U} -Valenzbandes (unten). Am Γ -Punkt sind beide Wellenfunktionen hh-artig. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilm zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind.*

in der verspannten Struktur jedoch am Γ -Punkt eine unterschiedliche Parität aufweisen. Zudem haben beide Bänder in der Nähe des Γ -Punktes dieselbe Bandkrümmung.

Vergleicht man beide Bandstrukturen, sind die Valenzbänder in der $GaAs$ -Struktur wesentlich flacher. Im Bereich $k \leq 7 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ beträgt die Differenz zwischen der maximalen und minimalen Energie des v_1 -Bandes mehr als 50 meV in der $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Struktur, jedoch nur ungefähr 30 meV in der $GaAs$ -Struktur. Dies sollte die Relaxation innerhalb der Valenzbänder durch LO-Phononen wesentlich erschweren, da beide Differenzen nahe der Phonon-Energie ($E_{LO} \simeq 35 \text{ meV}$) liegen. Bei der Relaxation muss jedoch die Energie-Erhaltung gewährleistet sein, d.h. Anfangs- und Endzustand des Elektrons müssen durch ungefähr eine Phonon-Energie voneinander getrennt sein, damit eine Streuung an einem LO-Phonon möglich ist.

Bei der Darstellung der optischen Matrixelemente in Abbildung 2.10–2.17 wird jeweils nur die x-Komponente der Übergänge innerhalb der U -Entartungsgruppe gezeigt. Die Interband-Matrixelemente zwischen den v_1 - und den c_1 -Bändern in Abbildung 2.11 und 2.15 sowie die zugehörigen Intraband-Matrixelemente in Abbildung 2.10 und 2.14 ähneln sich für beide Strukturen stark. Sobald an den optischen Übergängen jedoch das v_2 -Band beteiligt ist, gibt es deutliche Unterschiede in der Form und Stärke der Matrixelemente. Infolge des verspannungsbedingt deutlich unterschiedlichen Charakters der v_2 -Bänder beider Strukturen entspricht dies auch den Erwartungen. Unter anderem ist am Γ -Punkt der (v_2-c_1) -Interbandübergang in der $Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Struktur paritätsbedingt verboten, in $GaAs$ hingegen erlaubt.

Alle Interband-Matrixelemente sind nicht rotationssymmetrisch, was sich leicht erklären lässt. Dafür betrachtet man z.B. das v_{1U} -Valenzband, das am Γ -Punkt nur eine z-symmetrische hh_1 -Einhüllende besitzt. Nach (2.54) wird die Wellenfunktion durch eine Zusatzphase $\chi_{\lambda k_{||}}$ stetig gemacht, welche die eigentliche Phase vor der hh_1 -artigen Einhüllenden kompensiert. Dadurch wird der hh -artige Anteil am Interband-Matrixelement unabhängig vom Winkel $\angle k_{||}$ und somit rotationssymmetrisch. Vor der lh_1 -artigen symmetrischen Einhüllenden bleibt aber eine $\angle k_{||}$ -abhängige Phase erhalten. Damit weist der lh -artige Anteil am Interband-Matrixelement keine Rotationssymmetrie auf, sondern folgt dieser Phase. Da der lh_1 -artige Anteil der v_{1U} -Wellenfunktion in der Nähe des Γ -Punktes verschwindet, bleibt das Matrixelement trotz der Phasenabhängigkeit des lh -Anteils überall stetig. An dieser Stelle sei Folgendes angemerkt: Bei der Berechnung der optischen Interband-Matrixelemente zwischen den Valenzbändern $\{v_1, v_2\}$ und dem c_1 -Leitungsband tragen aus Paritätsgründen nur die symmetrischen Valenzband-Anteile bei, da die Leitungsband-Einhüllende symmetrisch ist (vgl. Gleichung (2.67)). Zudem sind die Intervenzband-Matrixelemente wesentlich kleiner als die anderen optischen Matrixelemente.

Für beide Strukturen werden im folgenden Abschnitt numerische Ergebnisse zur Entstehung, Phasenabhängigkeit und Relaxation der Ladungs- und Spinströme gezeigt. Zuvor findet man jedoch noch in den Abbildungen 2.10–2.17 Darstellungen der verschiedenen optischen Matrixelemente.

Optische Matrixelemente der GaAs-Struktur:

Intraband-Matrixelemente des c_{1U} -, v_{1U} - und v_{2U} -Bandes:

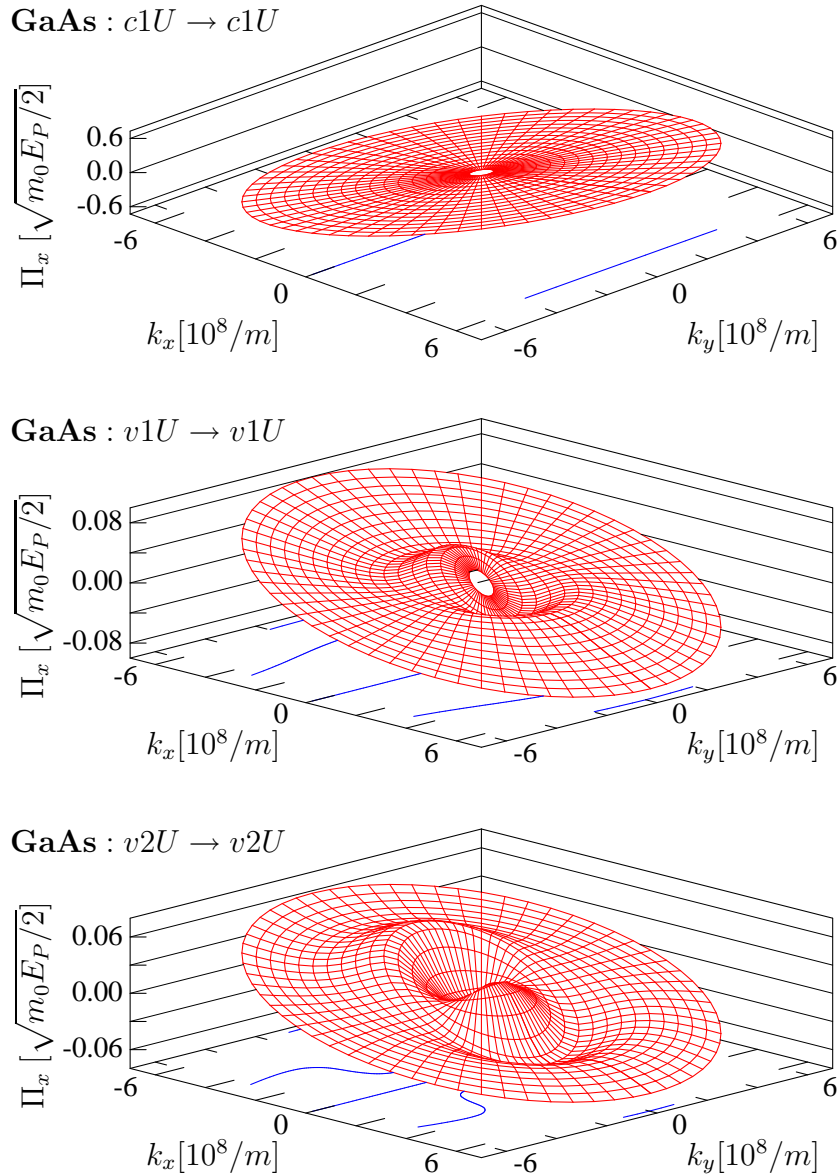


Abbildung 2.10: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{\lambda_U \mathbf{k}}^{\lambda_U \mathbf{k}}$ einer Intraband-Anregung innerhalb der v_{1U} und v_{2U} Valenzbänder sowie des c_{1U} Leitungsbandes. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken GaAs-Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p(\text{GaAs})}/2 \simeq 1.45 \cdot 10^{-24} \text{kg m/s}$.

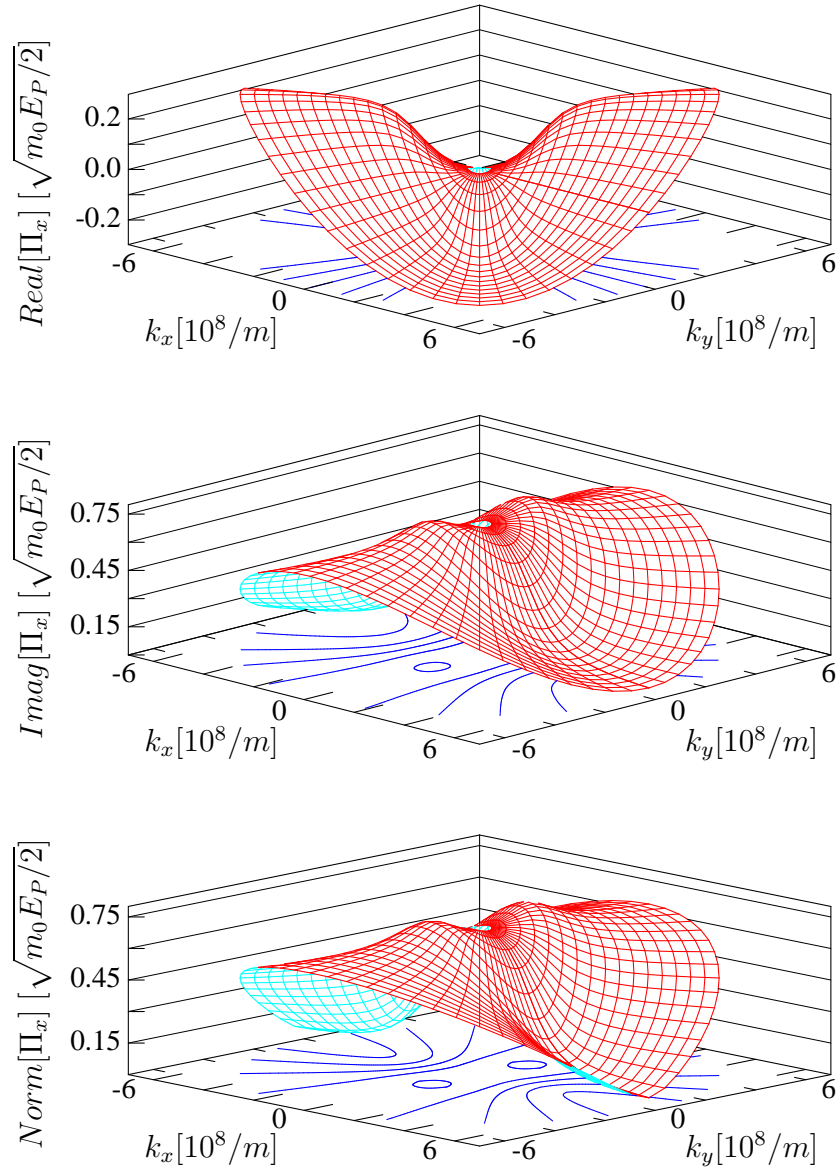
Interband-Matrixelement zwischen dem c_{1U} - und dem v_{1U} -Band:GaAs : $v_{1U} \rightarrow c_{1U}$ 

Abbildung 2.11: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{v_{1U}k}^{c_{1U}k}$ einer Interband-Anregung vom v_{1U} Valenzband in das c_{1U} Leitungsband. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken GaAs-Quantenfilm zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p(GaAs)}/2 \simeq 1.45 \cdot 10^{-24} kg m/s$.

Interband-Matrixelement zwischen dem c_{1U} - und dem v_{2U} -Band:

GaAs : $v_{2U} \rightarrow c_{1U}$

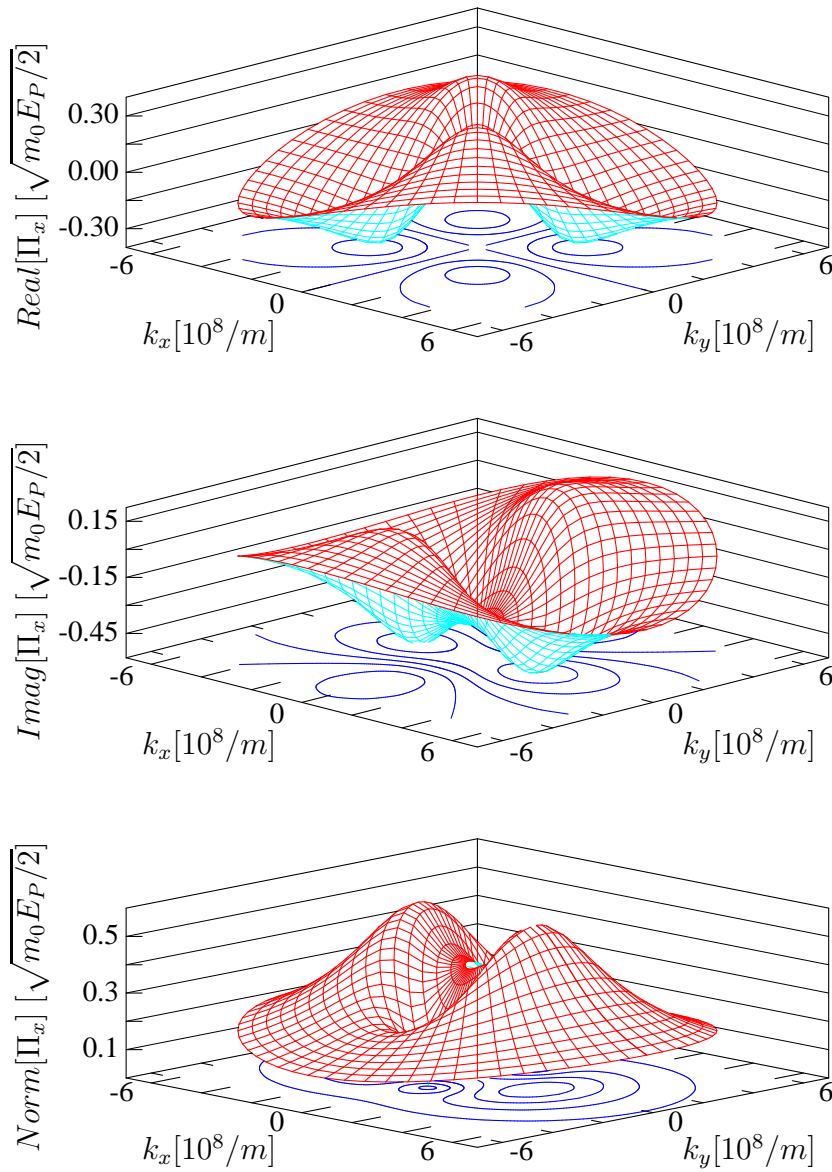


Abbildung 2.12: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{v_{2U}\mathbf{k}}^{c_{1U}\mathbf{k}}$ einer Interband-Anregung vom v_{2U} -Valenzband in das c_{1U} -Leitungsband. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken GaAs-Quantenfilm zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p}(GaAs)/2 \simeq 1.45 \cdot 10^{-24} kg m/s$.

Intervallenzband-Matrixelement zwischen dem v_{1U} - und dem v_{2U} -Band:

GaAs : $v_{2U} \rightarrow v_{1U}$

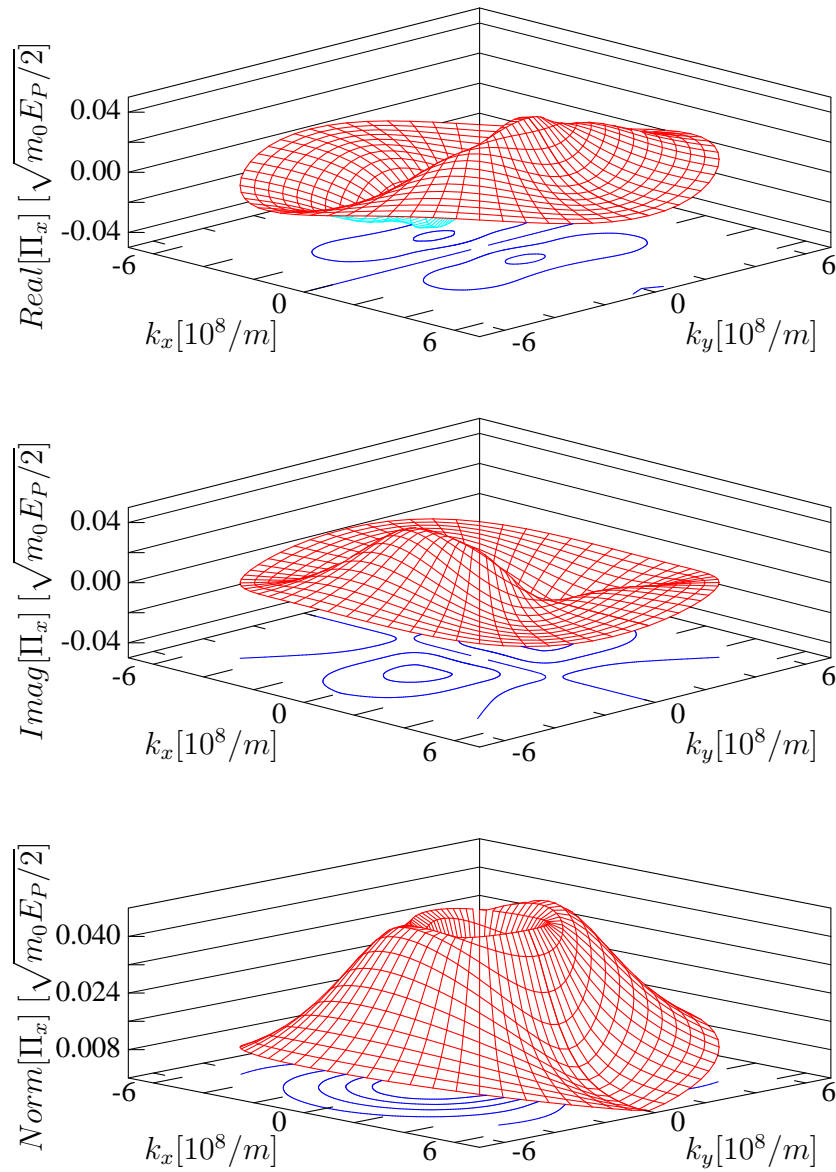


Abbildung 2.13: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{v_{2U}\mathbf{k}}^{v_{1U}\mathbf{k}}$ einer Intervallenzband-Anregung vom v_{2U} Band in das v_{1U} Band. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken GaAs-Quantenfilm zwischen $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p(GaAs)}/2 \simeq 1,45 \cdot 10^{-24} kg m/s$.

Optische Matrixelemente der $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Struktur:

Intraband-Matrixelemente des c_{1U} -, v_{1U} - und v_{2U} -Bandes:

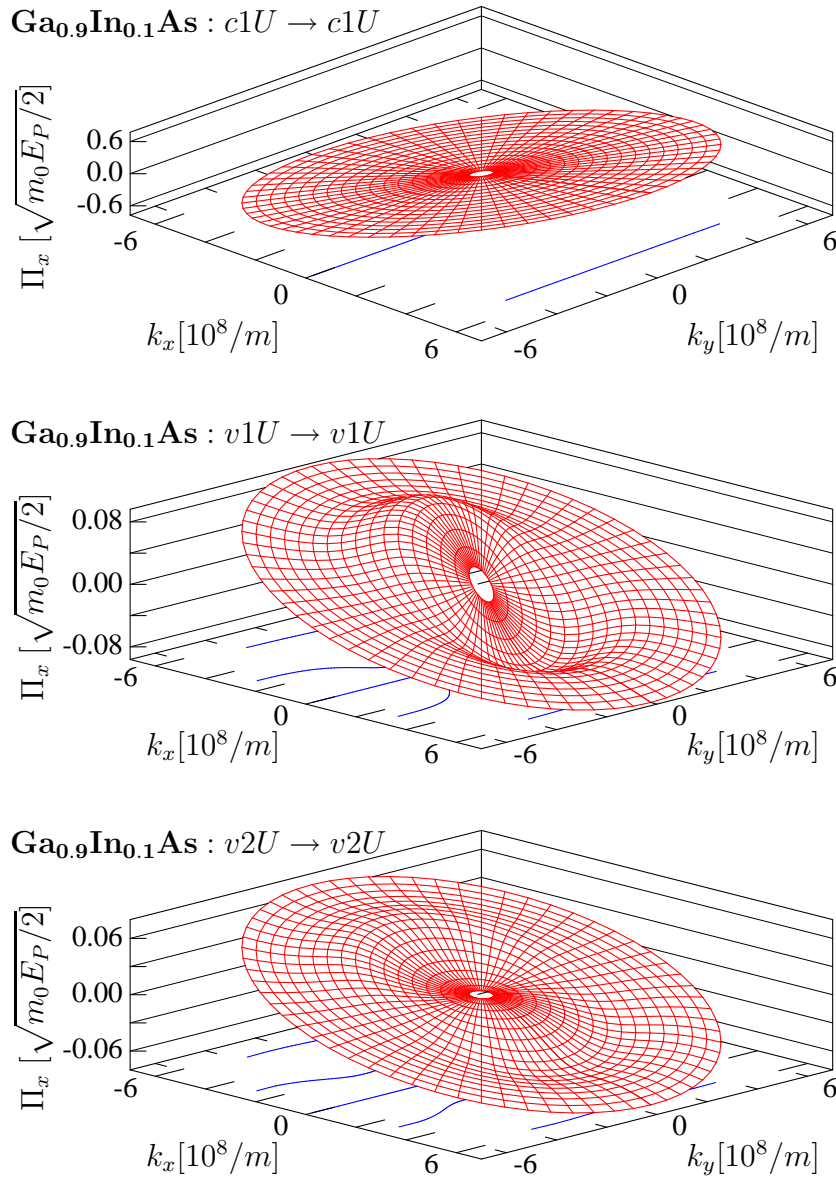


Abbildung 2.14: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{\lambda_U \mathbf{k}}^{\lambda_U \mathbf{k}}$ einer Intraband-Anregung innerhalb der v_{1U} und v_{2U} Valenzbänder sowie des c_{1U} Leitungsbands. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p(\text{GaAs})/2} \simeq 1.45 \cdot 10^{-24} \text{kg m/s}$.

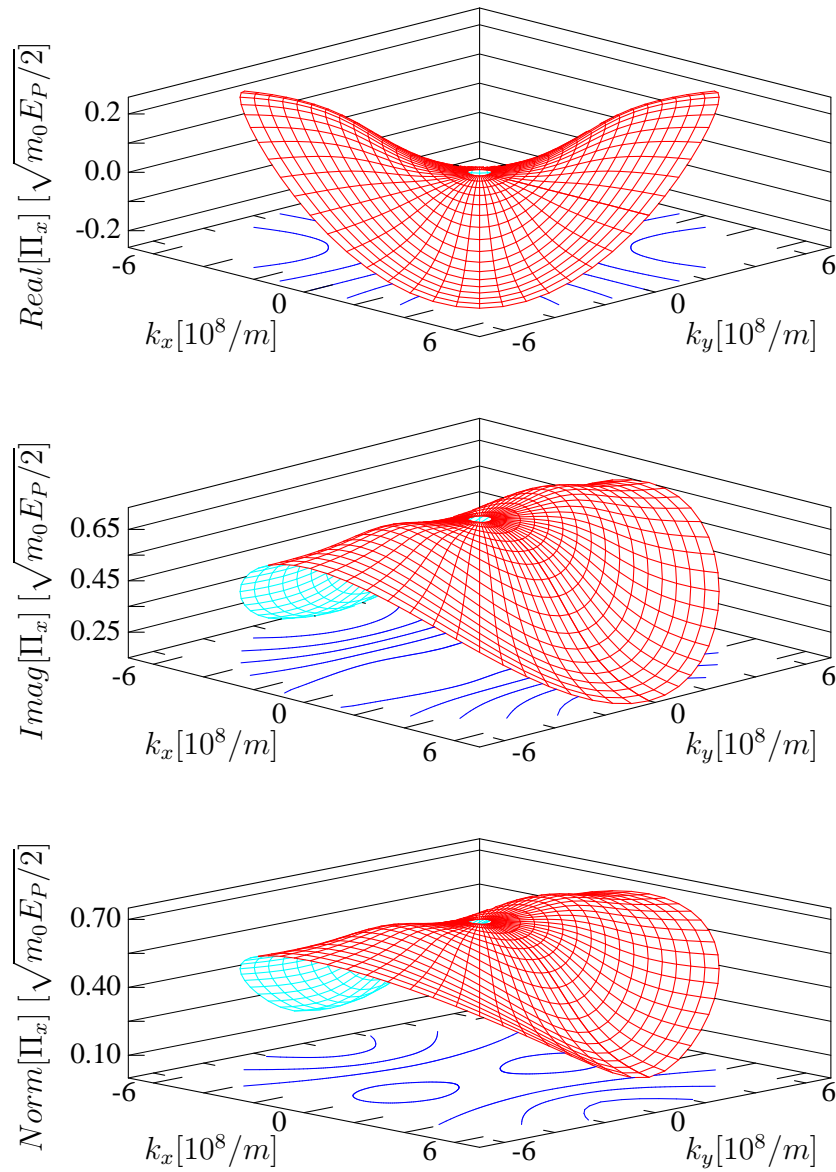
Interband-Matrixelement zwischen dem c_{1U} - und dem v_{1U} -Band: $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As} : v_{1U} \rightarrow c_{1U}$ 

Abbildung 2.15: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{v_{2U}\mathbf{k}}^{v_{1U}\mathbf{k}}$ einer Intervallband-Anregung vom v_{1U} Band in das c_{1U} Band. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p}(\text{GaAs})/2 \simeq 1,45 \cdot 10^{-24} \text{kg m/s}$.

Interband-Matrixelement zwischen dem c_{1U} - und dem v_{2U} -Band:

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As} : v_{2U} \rightarrow c_{1U}$

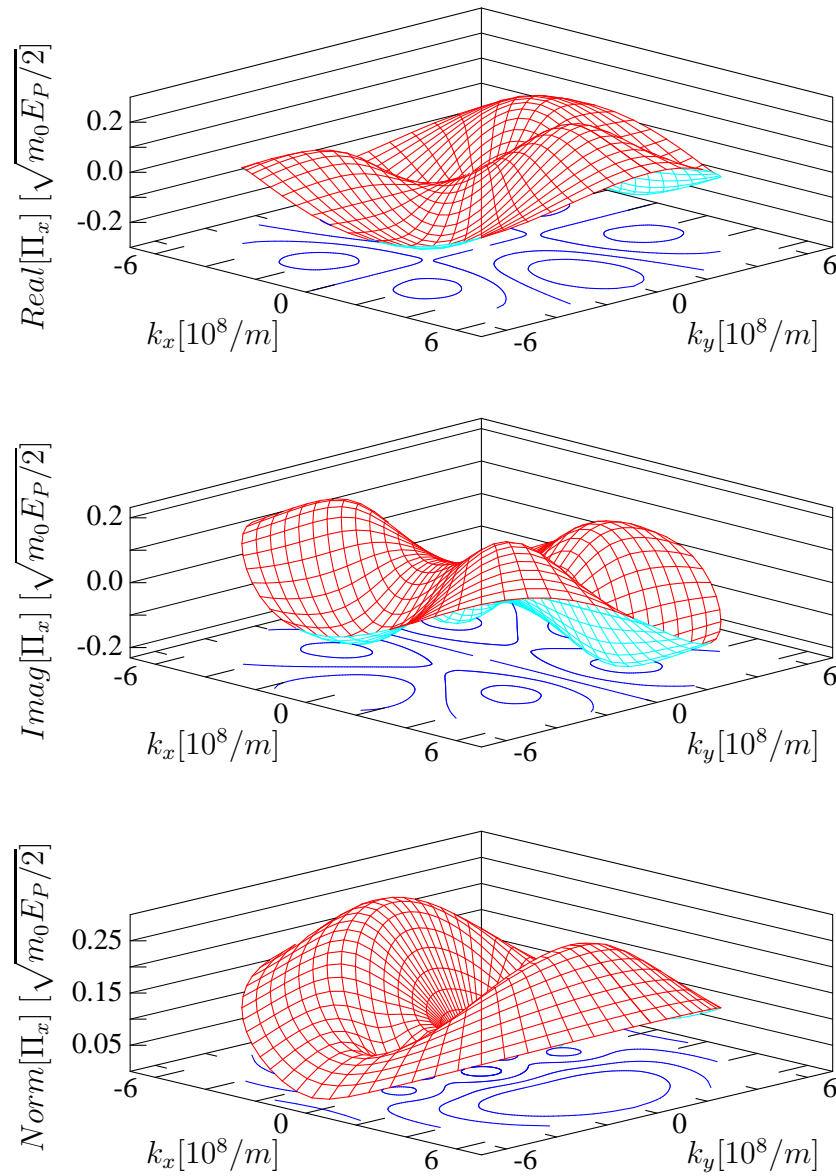


Abbildung 2.16: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{v_{2U}k}^{v_{1U}k}$ einer Intervallenzband-Anregung vom v_{2U} Band in das c_{1U} Band. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p}(\text{GaAs})/2 \simeq 1.45 \cdot 10^{-24} \text{kg m/s}$.

Intervallenzband-Matrixelement zwischen dem v_{1U} - und dem v_{2U} -Band:

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As} : v_{2U} \rightarrow v_{1U}$

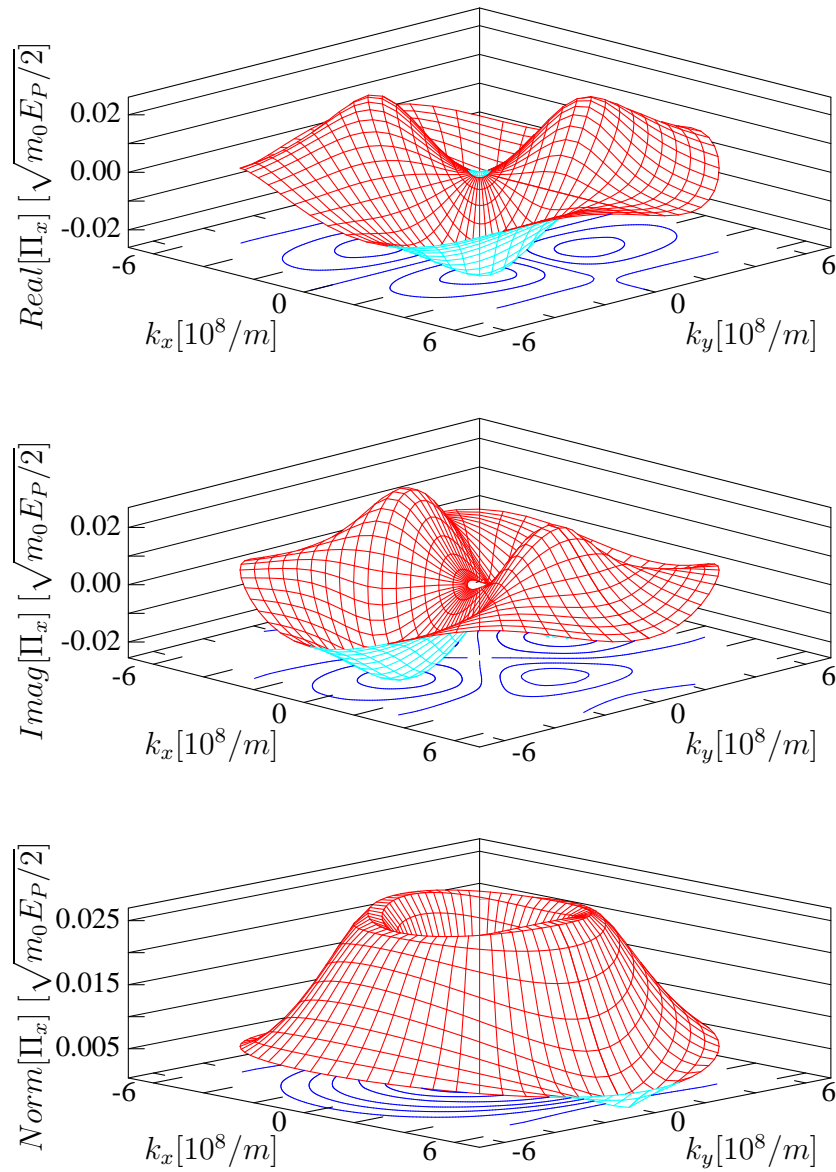


Abbildung 2.17: x -Komponente des Impuls-Matrixelements $\Pi_{v_{2U}\mathbf{k}}^{v_{1U}\mathbf{k}}$ einer Intervallenzband-Anregung vom v_{2U} Band in das v_{1U} Band. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren. Die Gesamtlänge der Struktur ist 50nm, wobei die Ränder mit periodischen Randbedingungen verbunden worden sind. Die verwendete Einheit entspricht $\sqrt{m_0 E_p(\text{GaAs})}/2 \simeq 1,45 \cdot 10^{-24} \text{kg m/s}$.

2.5.3 Erste Ergebnisse zu den Intraleitungsband-Strömen

In den bisherigen Abschnitten dieses Kapitels sind die theoretischen Grundlagen zusammengefasst, die notwendigen Definitionen eingeführt und die Modellsysteme mit $GaAs$ - oder $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -Quantenfilm detailliert beschrieben worden, die für die Untersuchung der Spin- und Ladungsströme verwendet werden sollen. Ab sofort wird sich der numerischen Auswertung der hergeleiteten Gleichungen und Zusammenhänge zugewandt. Dabei wird es vor allem um Effekte gehen, die auf die Berücksichtigung der realistischen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur und der optischen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrixelemente zurückzuführen sind. In einem Artikel von A. Najmaie [99] aus dem Jahr 2003 wurde im Zusammenhang mit dem Auftreten von Spinströmen für senkrecht zueinander linear polarisierte ω - und 2ω -Pulse beiläufig erwähnt, dass neben diesen Strömen, die der Polarisationsrichtung des ω -Pulses folgen, auch senkrecht dazu Ladungsströme in Richtung der Polarisation des 2ω -Pulses auftreten können. Die folgenden Untersuchungen werden die Herkunft dieser Ströme klären und numerisch nachweisen, dass auch umgekehrt in der Ladungsstrom-Konfiguration, d.h. mit zwei parallel linear polarisierten ω - und 2ω -Pulsen, schwache Spinströme senkrecht zu der Polarisationsrichtung beider Pulse auftreten können. Zur Demonstration dieser Effekte zeigen die Abbildungen 2.18–2.21 einige ausgewählte Intra-band-Ströme des c_{1U} -Bandes mit den zugehörigen Leitungsband-Besetzungen für eine optische Zwei-Puls-Anregung 150 meV oberhalb der Bandkante. Es soll nochmals darauf hingewiesen werden, dass alle Rechnungen bei $T = 300\text{ K}$ durchgeführt werden. Zur besseren Orientierung sind die Spinströme jeweils rot und alle Ladungsströme jeweils blau dargestellt. In den Simulationen wurden die Phase des 2ω -Pulses für die Ladungsstrom-Konfiguration so gewählt, dass nach Formel (2.115) ein maximaler ($\phi_{2\omega} = 0$) bzw. minimaler ($\phi_{2\omega} = \pi/2$) Strom auftritt. Analog wird für die Spinstrom-Konfiguration die Phase auf $\phi_{2\omega} = \pi/2$ ($\phi_{2\omega} = \pi$) gesetzt, um einen maximalen (minimalen) Spinstrom zu erzielen. Da der ω -Puls immer in x -Richtung polarisiert ist, verlaufen die "regulären" Ströme immer in x -Richtung, wobei als "gewöhnlich" oder "regulär" jeweils die Ströme bezeichnet werden, die der Konfiguration den Namen geben. Dies ist beispielsweise für die Ladungsstrom-Konfiguration der Ladungsstrom. Die "ungewöhnlichen" oder "irregulären" Ströme, damit ist für die Ladungsstrom-Konfiguration der Spinstrom sowie für die Spinstrom-Konfiguration der Ladungsstrom gemeint, gehen immer in die y -Richtung, d.h. senkrecht zur Polarisationsrichtung des ω -Pulses. Wie in der Einführung erwähnt wurde, wird ein Entartungsstrom/Spinstrom dadurch ausgezeichnet, dass die Ströme in jedem entarteten Band zu unterschiedlichen Entartungszahlen $n \neq m \in \{U, L\}$ nach der optischen Anregung in entgegengesetzte Richtungen verlaufen. Für Ladungsströme hingegen ist die Stromrichtung für beide Zustände eines entarteten Bandes gleich. Aufgrund dieses Zusammenhangs ist es ausreichend, jeweils nur die Ströme mit Entartungszahl U zu zeigen und als Ergänzung die Art des Stromes anzugeben. Die optisch durch die Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen angeregten Verteilungen sind nicht-rotationssymmetrische ringartige Strukturen, die in einer Raumrichtung teilweise stark erhöht und in entgegengesetzter Richtung erniedrigt sind.

Die Abbildungen 2.18 und 2.19 zeigen die Ströme des c_{1U} -Bandes, die für die Spin- und Ladungsstrom-Konfiguration im $GaAs$ -Quantenfilm angeregt werden. Die Spinstrom-Konfiguration in Abbildung 2.18 zeigt für $\phi_{2\omega} = \pi/2$ einen Spinstrom in negative x -Richtung und einen schwachen Ladungsstrom in y -Richtung. Für $\phi_{2\omega} = \pi$ sind die Rollen vertauscht. In diesem Fall erhält man einen starken Ladungsstrom in negative y -Richtung, während der Spinstrom in x -Richtung nahezu verschwindet. Die Stärke des Spinstroms zur Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$ ist vergleichbar mit der Stärke des Ladungsstroms zur Phase $\phi_{2\omega} = \pi$. Wie später explizit

GaAs:

Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} \in \{\pi/2, \pi\}$

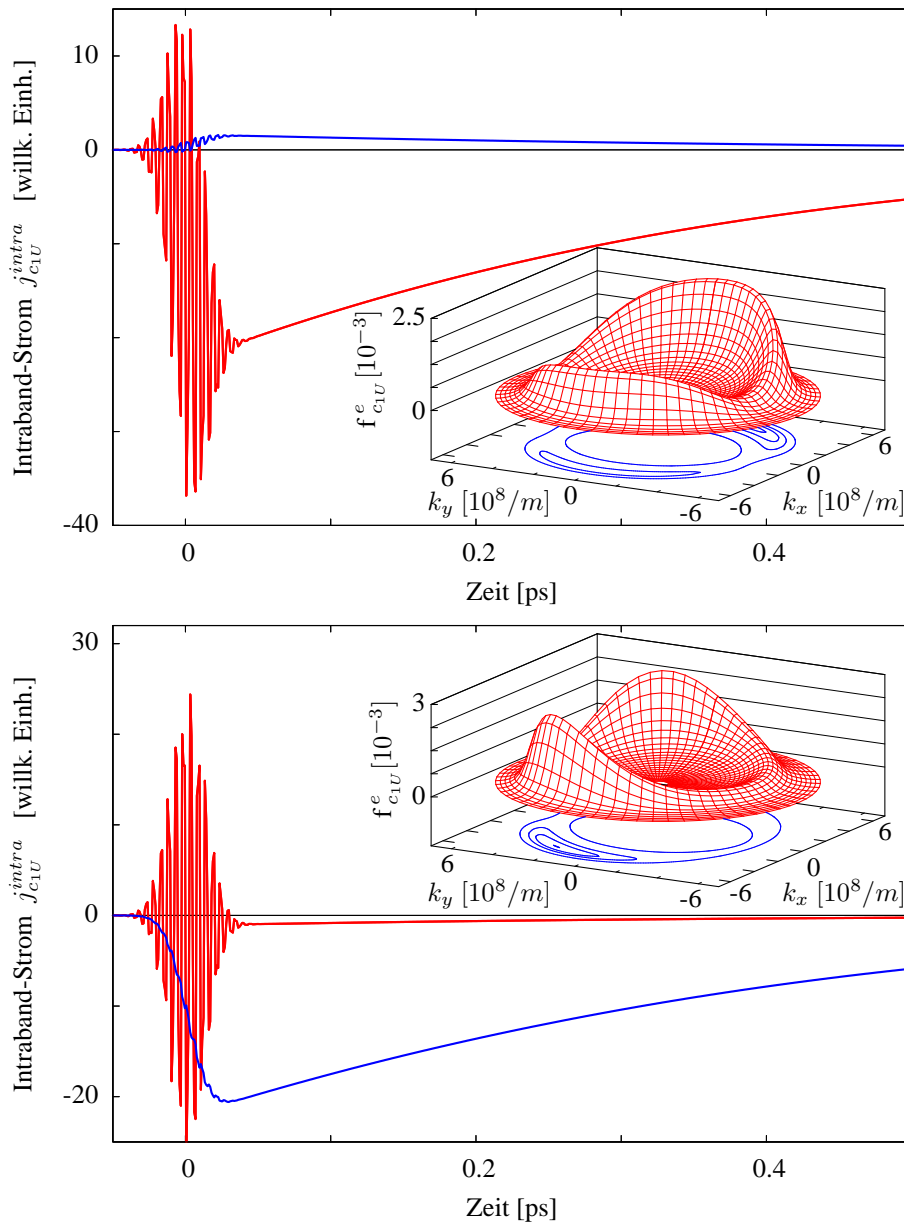


Abbildung 2.18: Ströme des c_{1U} -Leitungsbands: Spinstrom in x -Richtung (rot) und Ladungsstrom in y -Richtung (blau). Die eingeklinkten Bilder zeigen die zugehörigen Leitungsband-Besetzungen zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$. Die optische Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$, d.h. der ω -Laserpuls ist linear in x -Richtung und der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert. Die Phase $\phi_{2\omega}$ beträgt $\pi/2$ (oben) bzw. π (unten). Der Halbleiter ist ein 8nm dicker GaAs-Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren.

gezeigt wird, tritt der "irreguläre" Ladungsstrom nur unter Verwendung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Interband-Matrixelemente auf. Diese Ströme sind in einem Zwei-Band-Modell eines idealen Halbleiters mit k -unabhängigen rotationssymmetrischen Matrixelementen nicht zu beobachten. Ein solches vereinfachtes Modell bildet z.B. die Basis für die Untersuchungen in den Referenzen [30, 29]. Die zugehörigen Verteilungen unterscheiden sich nicht nur in der Vorzugsrichtung,

GaAs:

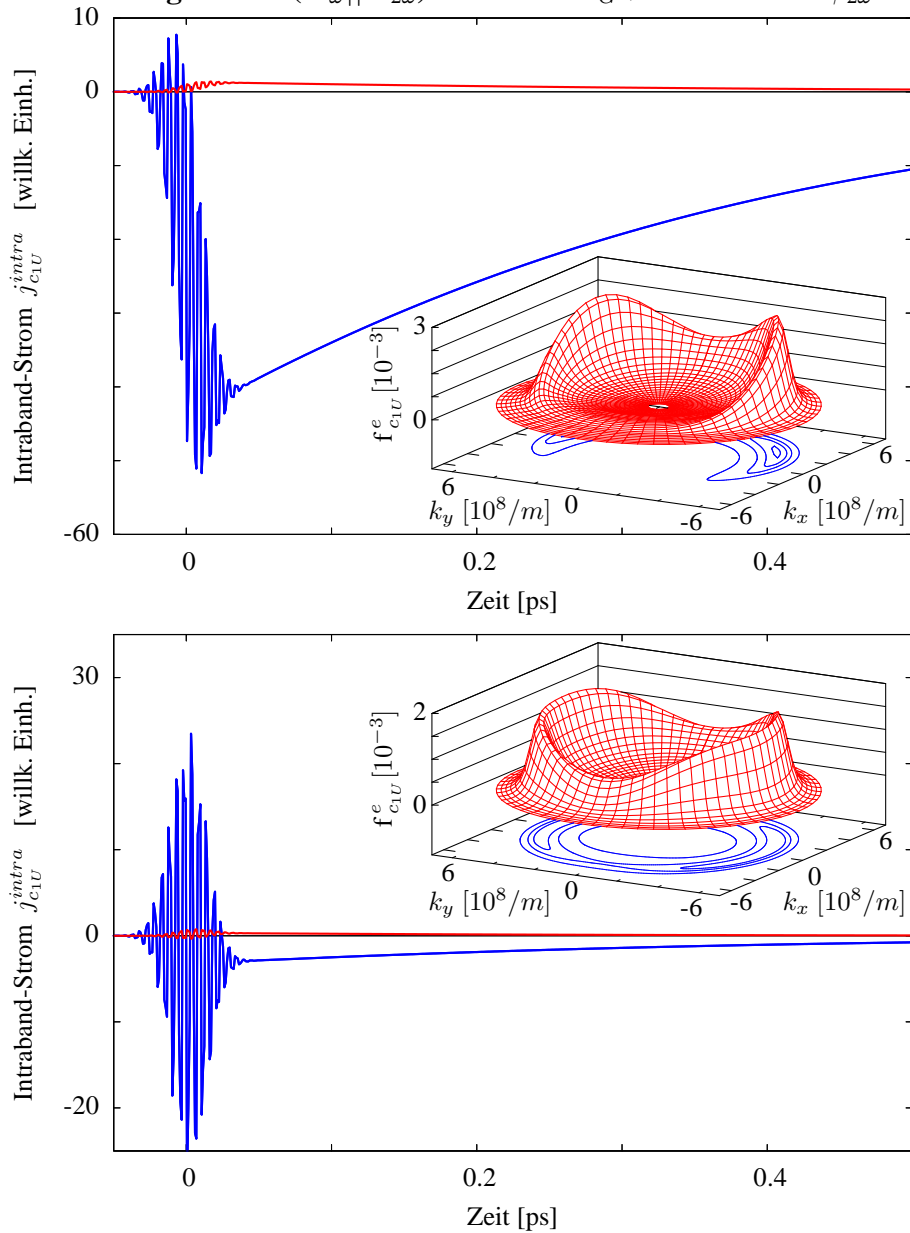
Ladungsstrom-Konfiguration ($A_\omega \parallel A_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} \in \{0, \pi/2\}$ 

Abbildung 2.19: Ströme des c_{1U} -Leitungsbands: Ladungsstrom in x -Richtung (blau) und Spinstrom in y -Richtung (rot). Die eingeklinkten Bilder zeigen die zugehörigen Leitungsband-Besetzungen zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$. Die optische Anregung erfolgt in Ladungsstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$, d.h. sowohl der ω - als auch der 2ω -Laserpuls sind linear in x -Richtung polarisiert. Die Phase $\phi_{2\omega}$ beträgt 0 (oben) bzw. $\pi/2$ (unten). Der Halbleiter ist ein 8nm dicker GaAs-Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren.

sondern auch in der Form. Während die zu starken Spinströmen gehörenden Verteilungen (vgl. z.B. Abbildung 2.18) jeweils ein Maximum in negative Stromrichtung aufweisen, werden die starken Ladungsströme (vgl. z.B. Abbildung 2.19) durch eine Verteilung mit Doppelmaximum gebildet. Senkrecht zur Richtung dieser starken Ströme sind die Verteilungen nahezu spiegelsymmetrisch. In der Abbildung 2.18 (oben) entspricht die Spiegelachse beispielsweise

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$:

Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} \in \{\pi/2, \pi\}$

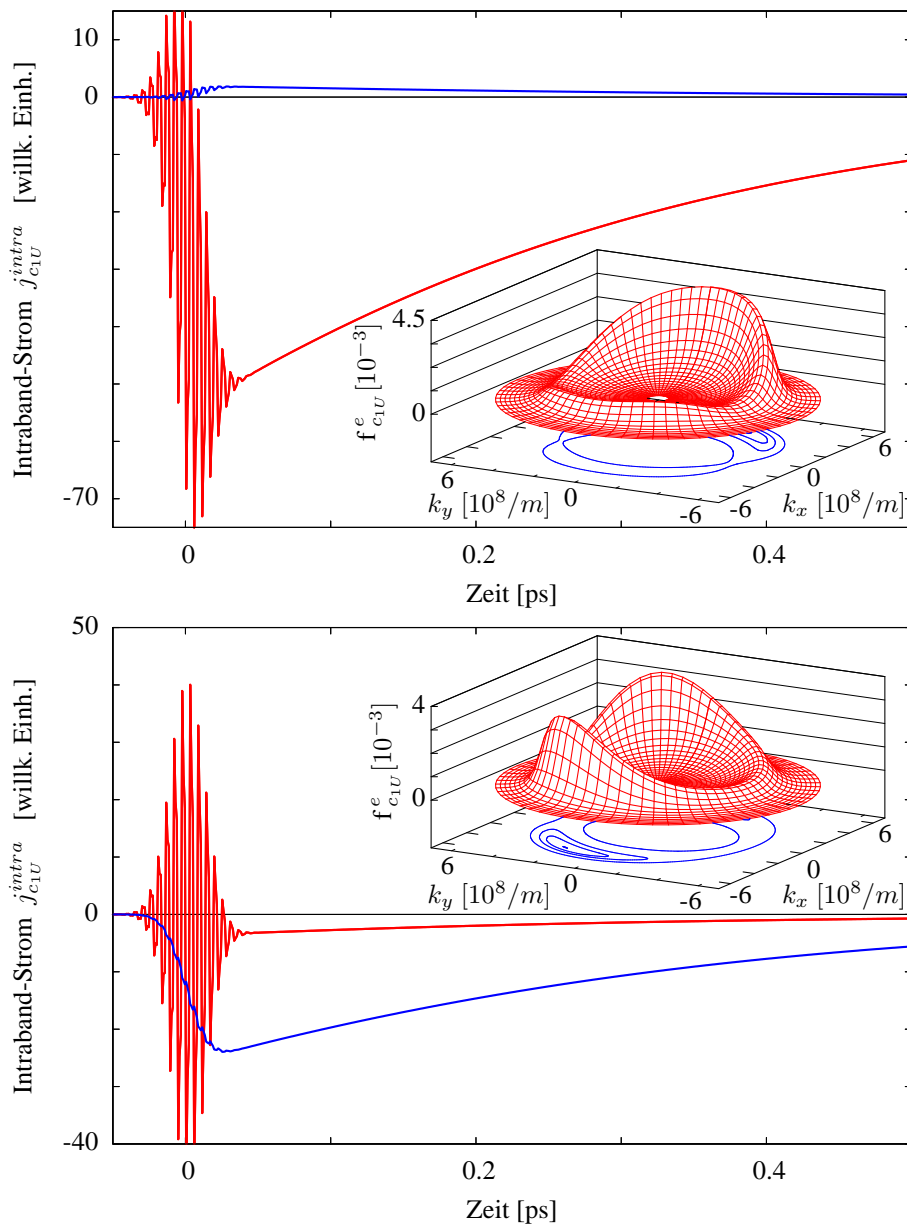


Abbildung 2.20: Ströme des c_{1U} -Leitungsbands: Spinstrom in x -Richtung (rot) und Ladungsstrom in y -Richtung (blau). Die eingeklinkten Bilder zeigen die zugehörigen Leitungsband-Besetzungen zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$. Die optische Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$, d.h. der ω -Laserpuls ist linear in x -Richtung und der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert. Die Phase $\phi_{2\omega}$ beträgt $\pi/2$ (oben) bzw. π (unten). Der Halbleiter ist ein 8nm dicker $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren.

der x -Achse. Die geringfügigen Abweichungen von der Spiegelsymmetrie sind hier durch die schwachen "irregulären" Ladungsströme der y -Richtung bedingt. Aufgrund der Proportionalität zur negativen Elektronladung (vgl. Stromdefinition (2.118)) verlaufen die Ströme immer entgegen der Vorzugsrichtung der Elektron-Verteilungen.

Für die Ladungsstrom-Konfiguration in Abbildung 2.19 erhält man für die Phase $\phi_{2\omega} = 0$

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$:

Ladungsstrom-Konfiguration ($A_\omega \parallel A_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} \in \{0, \pi/2\}$

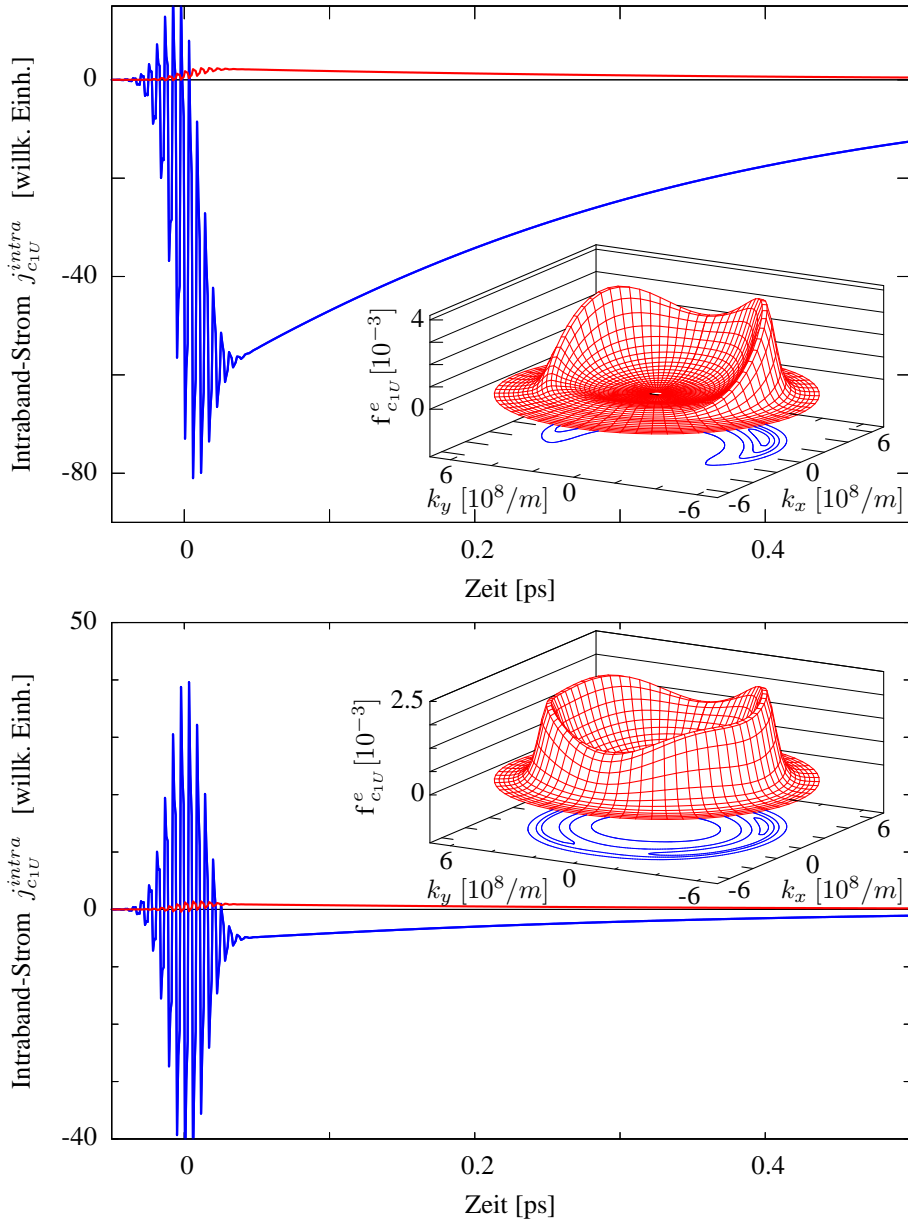


Abbildung 2.21: Ströme des c_{1U} -Leitungsbands: Ladungsstrom in x -Richtung (blau) und Spinstrom in y -Richtung (rot). Die eingeklinkten Bilder zeigen die zugehörigen Leitungsband-Besetzungen zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$. Die optische Anregung erfolgt in Ladungsstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$, d.h. sowohl der ω - als auch der 2ω -Laserpuls sind linear in x -Richtung polarisiert. Die Phase $\phi_{2\omega}$ beträgt 0 (oben) bzw. $\pi/2$ (unten). Der Halbleiter ist ein 8nm dicker $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ -Barrieren.

einen Ladungsstrom in negative x -Richtung, der von einem schwachen Spinstrom senkrecht dazu begleitet wird. Beide Ströme verschwinden für $\phi_{2\omega} = \pi/2$ nahezu vollständig. Das Maximum der Leitungsband-Besetzung zu $\phi_{2\omega} = 0$ hat wie die Elektron-Verteilung im unteren Teil von Abbildung 2.18 eine Doppelstruktur. Dies scheint demnach typisch für die zu Ladungsströmen gehörenden Verteilungen zu sein. Selbst bei verschwindenden Strömen, wie in

Abbildung 2.19 gezeigt, liegt keine Rotationssymmetrie vor. Nahezu rotationssymmetrisch werden die optisch erzeugten Verteilungen erst in der Nähe des Γ -Punktes. Dieser Effekt beruht auf Bandkopplungsphänomenen bei der Bestimmung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Eigenfunktionen, die sich im Auftreten von hh - und lh -artigen Anteilen in den optischen Matrixelementen äußern. Dies lässt sich durch eine Ein-Photon-Anregung mit ausschließlich dem 2ω -Puls, d.h. $A_\omega = 0$, leicht bestätigen.

Es ist anzumerken, dass die Erzeugung von Ladungsströmen wesentlich effektiver zu sein scheint. Der maximale Ladungsstrom in Abbildung 2.19 ist nahezu doppelt so groß wie der maximale Spinstrom in Abbildung 2.18, obwohl sich beide Konfigurationen im Wesentlichen nur in der Richtung des 2ω -Pulses unterscheiden.

Abbildung	Konfiguration	Material	$\phi_{2\omega}$	x-Richtung	y-Richtung
2.18	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_S = 363 \text{ fs}$	$\tau_L = 405 \text{ fs}$
2.18	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	π	$\tau_S = 351 \text{ fs}$	$\tau_L = 409 \text{ fs}$
2.19	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	0	$\tau_L = 372 \text{ fs}$	$\tau_S = 360 \text{ fs}$
2.19	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_L = 365 \text{ fs}$	$\tau_S = 268 \text{ fs}$
2.20	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_S = 328 \text{ fs}$	$\tau_L = 356 \text{ fs}$
2.20	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	π	$\tau_S = 316 \text{ fs}$	$\tau_L = 347 \text{ fs}$
2.21	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	0	$\tau_L = 325 \text{ fs}$	$\tau_S = 319 \text{ fs}$
2.21	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_L = 319 \text{ fs}$	$\tau_S = 316 \text{ fs}$

Abbildung	Konfiguration	Material	$\phi_{2\omega}$	x-Richtung	y-Richtung
2.18	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_S = 331 \text{ fs}$	$\tau_L = 343 \text{ fs}$
2.18	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	π	$\tau_S = 331 \text{ fs}$	$\tau_L = 341 \text{ fs}$
2.19	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	0	$\tau_L = 334 \text{ fs}$	$\tau_S = 333 \text{ fs}$
2.19	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_L = 328 \text{ fs}$	$\tau_S = 237 \text{ fs}$
2.20	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_S = 316 \text{ fs}$	$\tau_L = 312 \text{ fs}$
2.20	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	π	$\tau_S = 315 \text{ fs}$	$\tau_L = 317 \text{ fs}$
2.21	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	0	$\tau_L = 316 \text{ fs}$	$\tau_S = 307 \text{ fs}$
2.21	<i>Ga_{0.9}In_{0.1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	$\pi/2$	$\tau_L = 312 \text{ fs}$	$\tau_S = 297 \text{ fs}$

Tabelle 2.3: Zerfallszeiten der Spin- (τ_S) und der Ladungsströme (τ_L) des c_{1U} -Leitungsbands aus Abbildung 2.18–2.21 kurze Zeit [0.05 ps, 0.2 ps] (oben) und lange Zeit [0.4 ps, 1.0 ps] (unten) nach der Anregung. Zerfallszeiten zu starken Strömen sind fett markiert worden.

Die Situation für den *Ga_{0.9}In_{0.1}As*-Quantenfilm ähnelt qualitativ der für den *GaAs*-Quantenfilm. Der Hauptunterschied besteht in der Größe der berechneten Stromstärken. Für die Spinstrom-Konfiguration in Abbildung 2.20 ist der "reguläre" Strom nahezu doppelt so stark wie der vergleichbare in Abbildung 2.18. Wechselt man wiederum die Phase von $\phi_{2\omega} = \pi/2$ nach $\phi_{2\omega} = \pi$, verschwindet der "reguläre" Strom und der "irregulären" Ladungsstrom bildet sich aus. Erstaunlicher Weise ist die Stärke des "ungewöhnlichen" Ladungsstroms beim Vergleich zum *GaAs*-Quantenfilm 2.18 nahezu unverändert. Auch für die Ladungsstrom-Konfiguration 2.21 erhält man in Vergleich zum *GaAs*-Quantenfilm einen verstärkten Strom. Der Unterschied fällt jedoch mit einem ca. 20 Prozent größeren Strom geringer als bei den Spinströmen aus. Zudem sind die Umverteilungen der Besetzungen in Stromrichtung für den *Ga_{0.9}In_{0.1}As*-Quantenfilm stärker ausgeprägt.

Die Grundlage für die Unterschiede zwischen beiden Systemen liegt in einem komplizierten Zusammenspiel der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Einhüllenden bei der Berechnung der optischen Matrixelemente (vgl. dazu die Valenzband-Einhüllenden aus Abbildung 2.8 und 2.9), das sich wiederum auf die Halbleiter-Bloch-Gleichungen bei der optischen Anregung überträgt. Die optischen Matrixelemente haben Beiträge, die durch die Schwerloch-artige Wellenfunktionsanteile bestimmt werden, und solche, die durch die Leichtloch-artigen Wellenfunktionsanteile bestimmt werden. Reduziert man z.B. in einem $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Zwei-Band-Modell das Interband-Matrixelement zwischen dem v_{1U} -Valenz- und dem c_{1U} -Leitungsband auf den hh_1 -Anteil, so treten zum einen keine "irregulären" Ströme auf zum anderen werden die optisch durch einen Ein-Photon-Übergang erzeugten Verteilungen rotationssymmetrisch. Die Abweichungen vom idealen Zwei-Band-Fall mit parabolischen Bändern beruht also eindeutig auf dem Zusammenspiel von hh - und lh -artigen Anteilen der optischen Matrixelemente.

Die aus den Abbildungen 2.18–2.21 interpolierten Zerfallszeiten findet man in den Tabellen 2.3. Dabei ist tendenziell festzustellen, dass die Zerfallszeiten im $GaAs$ -Quantenfilm größer als die vergleichbaren Zeiten im $Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Quantenfilm sind. Zudem ist zu beachten, dass kurz nach der Anregung ($0.05 ps < t < 0.2 ps$) die Ströme langsamer abklingen als im Langzeitlimit ($0.4 ps < t < 1.0 ps$). Der Unterschied zwischen Kurzzeit- und Langzeitlimit könnte daran liegen, dass für kurze Zeiten die Anregung bzw. der Interferenzprozess noch nicht ganz abgeschlossen ist und zusätzlich noch merkliche Anteile der Interband-Polarisation zwischen den Leitungs- und Valenzbändern vorhanden sind, die Einfluss auf die Relaxationsdynamik haben könnten. Zudem zerfallen die "ungewöhnlichen" Ladungsströme geringfügig langsamer als die "gewöhnlichen". Typische Zerfallszeiten der "regulären" Ströme liegen für kurze Zeiten im $GaAs$ -Quantenfilm ($Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Quantenfilm) bei ca. $360 fs$ ($320 fs$) und für lange Zeiten bei ca. $330 fs$ ($315 fs$). Damit soll dieser Teil abgeschlossen werden und im folgenden Abschnitt die Phasenabhängigkeit der Ladungs- und Spinströme näher untersucht werden.

2.5.4 Phasenabhängigkeiten

Wie sich schon anhand der Abbildungen 2.18–2.21 vermuten lässt, sollten die darin gewählten Phasen nicht die optimale Wahl für maximale bzw. minimale Ströme in eine bestimmte Richtung darstellen. Für eine Bestimmung dieser Werte ist in Abbildung 2.22–2.23 die Phasenabhängigkeit der Ströme zum Zeitpunkt $t = 0.15 ps$ in x- und y-Richtung für drei verschiedene Anregungen oberhalb der Bandkante $2\hbar\omega = E_G + \{0, 50, 150\} meV$ dargestellt. Die Anregung erfolgt in Spin- und Ladungsstrom-Konfiguration.

Bei der Auswertung der zur Spinstrom-Konfiguration gehörenden Graphen 2.22 stellt man fest, dass die in y-Richtung verlaufenden "irregulären" Ladungsströme bis auf kleine Phasenverschiebungen dem Gesetz (2.115) folgen, d.h. Cosinus-artig mit der Phase $\phi_{2\omega}$ variieren. Für Anregungen weit oberhalb der Bandkante folgt auch der "reguläre" Spinstrom in x-Richtung Sinus-artig der Phase $\phi_{2\omega}$, wie in Formel (2.116) vorhergesagt wird. Je näher man jedoch an der Bandkante anregt, desto stärker tritt eine Phasenverschiebung gegenüber Formel (2.116) auf. Bei einer Anregung an der Bandkante liegt die Verschiebung bei ca. 0.135π . Die "regulären" Ladungsströme aus Abbildung 2.23 zeigen ein ähnliches Verhalten, wobei die maximale Phasenverschiebung bei ca. 0.15π liegt. Des Weiteren sind die Phasenverschiebungen für beide Materialsysteme vergleichbar groß. Die genauen Werte entnehme man Tabelle 2.4. Die relativ starken Ströme für Anregungen an der Bandkante sind ein Resultat der spektral relativ breiten Anregung mit einem $50 fs$ -Puls.

Spinstrom:

Abbildung	Material	Konfiguration	Richtung	150 meV	50 meV	0 meV
2.22	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>x</i>	0.015	0.059	0.136
2.23	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>y</i>	0.526	0.600	0.902
2.22	<i>Ga_{0,9}In_{0,1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>x</i>	0.021	0.065	0.135
2.23	<i>Ga_{0,9}In_{0,1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>y</i>	0.600	0.632	0.700

Ladungsstrom:

Abbildung	Material	Konfiguration	Richtung	150 meV	50 meV	0 meV
2.22	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>y</i>	0.024	0.037	0.084
2.23	<i>GaAs</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>x</i>	0.023	0.066	0.150
2.22	<i>Ga_{0,9}In_{0,1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>y</i>	0.024	0.029	0.048
2.23	<i>Ga_{0,9}In_{0,1}As</i>	$\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$	<i>x</i>	0.027	0.071	0.143

Tabelle 2.4: Phasenverschiebungen der Spin- (oben) und Ladungsströme (unten) gegenüber den Formeln (2.116) und (2.115), die ohne Coulomb-Effekte gültig sind. Die angegebenen Werte wurden aus den Abbildungen 2.22 und 2.23 bestimmt.

Durch künstliches Abschalten der Coulomb-Wechselwirkung kann man zeigen, dass diese Phasenverschiebungen auf Coulomb-Effekte zurückzuführen sind. Dabei sollte auch an exzitonische Einflüsse gedacht werden [12]. Schließlich weist das Spektrum unterhalb der Bandkante eine starke exzitonische Resonanz auf. Zudem lässt sich tendenziell feststellen, dass bei einer Reduzierung der Anregungsenergie die "ungewöhnlichen" Ströme schneller abnehmen als die "gewöhnlichen". Bezogen auf Abbildung 2.22 lässt dies erneut darauf schließen, dass die "irregulären" Ladungsströme der Spinstrom-Konfiguration hauptsächlich durch die Bandmischung, d.h. durch hh- und lh-artige Anteile der optischen Matrixelemente, hervorgerufen werden. Je näher man dem Γ -Punkt kommt, desto reiner werden die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen. Mit "rein" ist gemeint, dass die Wellenfunktion im Wesentlichen durch eine einzige Einhüllende bestimmt wird. Daher spielen Bandmischungseffekte mit abnehmender Anregungsenergie eine immer geringer werdende Rolle. Weiterhin ist auffallend, dass die in Abbildung 2.22 dargestellten "irregulären" Ladungsströme in beiden Systemen nahezu gleich groß sind, während die Spinströme im *Ga_{0,9}In_{0,1}As*-Quantenfilm ungefähr doppelt so stark ausfallen wie die im *GaAs*-Quantenfilm. Die Abnahme der Spinstromstärke mit kleiner werdender Anregungsenergie ist im *GaAs*-Quantenfilm gegenüber dem *Ga_{0,9}In_{0,1}As*-Quantenfilm verzögert. Die genaue Ursache dafür ist schwer festzustellen, da hier mehrere Faktoren wie die Bandstruktur, die $k_{||}$ -Abhängigkeit der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Einhüllenden, die hh- und lh-artigen Anteile der optischen Matrixelemente und das Zusammenspiel beider Valenzbänder eine Rolle spielen könnte. Zumindest ist zu erwarten, dass der Einfluss des zweiten Valenzbandes für den *GaAs*-Quantenfilm stärker ausfallen sollte, da zum einen der energetische Abstand zwischen beiden Bändern kleiner ist und zum anderen das v_{2U} -Valenzband in der *Ga_{0,9}In_{0,1}As*-Struktur am Γ -Punkt die "falsche" Symmetrie aufweist. Ein optischer Übergang vom v_{2U} -Valenzband in das c_{1U} -Leitungsband ist hier aus Paritätsgründen verboten. Schließlich ist die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Einhüllende

des v_{2U} -Bandes am Γ -Punkt laut Abbildung 2.9 hh_2 -artig und somit antisymmetrisch. In Abbildung 2.23 zeigen die "regulären" Ladungsströme den erwarteten Cosinus-artigen Verlauf. Die dabei beobachtbaren Phasenverschiebungen fallen vergleichbar stark wie bei der Spinstrom-Konfiguration in Abbildung 2.22 aus. Hingegen sind die schwachen Spinströme

Phasenabhängigkeit der Ströme für die Spinstrom-Konfiguration ($A_\omega \perp A_{2\omega}$):

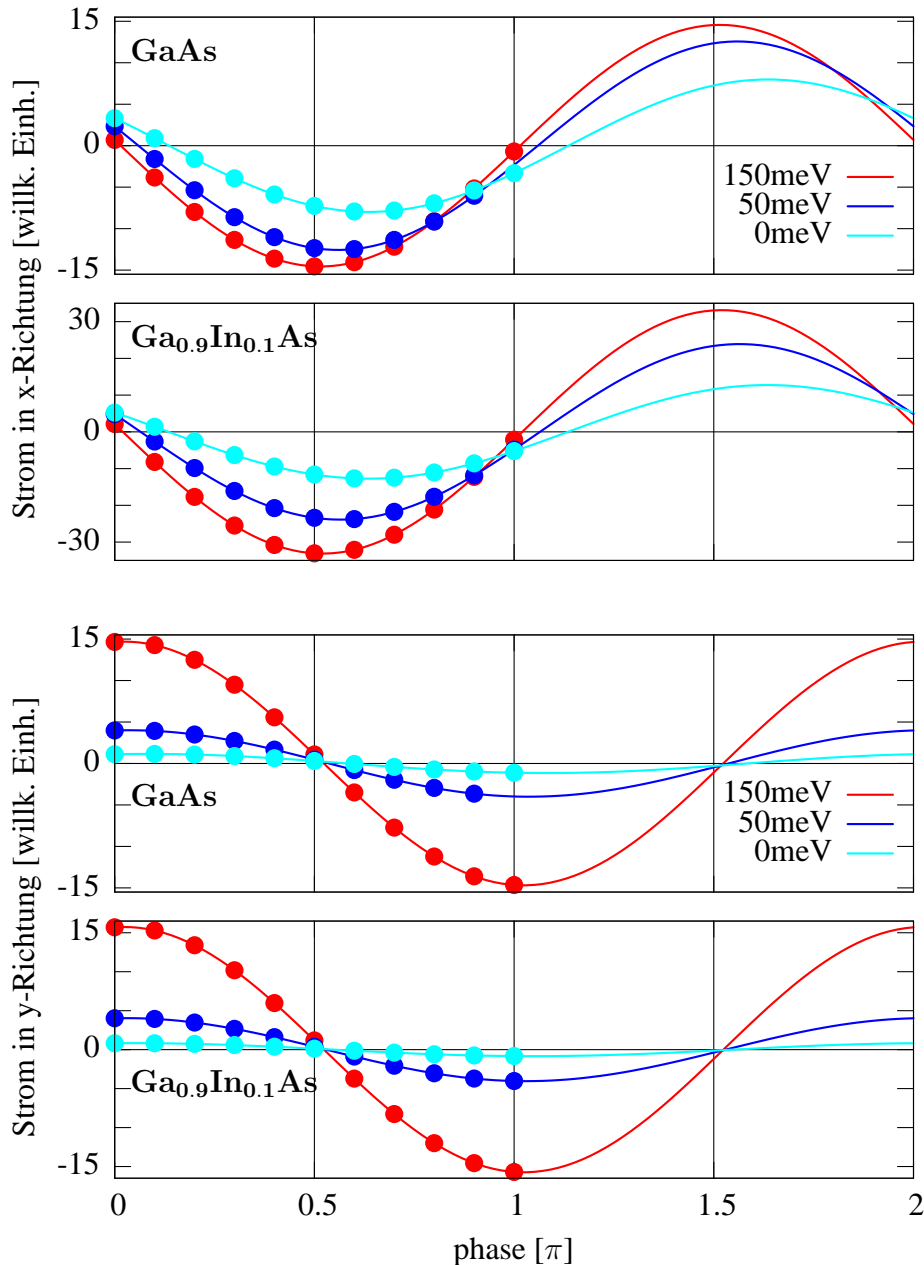


Abbildung 2.22: Phasen-Abhängigkeit des Stromes im c_{1U} -Band in x - (oben) und y -Richtung (unten) zum Zeitpunkt $t = 0.15ps$ für einen $GaAs$ - und einen $Ga_{90}In_{10}As$ -Quantenfilm. Der ω -Puls ist in x -Richtung, der 2ω -Puls in y -Richtung polarisiert, wobei 2ω der Energie $E_G + 150meV$ (rot), $E_G + 50meV$ (blau) und E_G (türkis) entspricht. Nach Abklingen der anregenden Pulse unterscheidet sich der c_{1U} - vom c_{1L} -Strom in x -Richtung nur im Vorzeichen, in y -Richtung sind beide Ströme identisch. Die Quantenfilmdicke ist $8nm$, die Barriere besteht aus $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$.

um mehr als $\pi/2$ gegenüber dem erwarteten Sinus-artigen Verlauf verschoben. Sowohl die geringe Stromstärke als auch die auffällig großen Verschiebungen lassen vermuten, dass diese "irregulären" Spinströme durch komplexere Zusammenhänge erzeugt werden. Es ist anzumerken, dass diese Ströme auch ohne Berücksichtigung von Coulomb-Effekten, in Zwei-

Phasenabhängigkeit der Ströme für die Ladungsstrom-Konfiguration ($A_\omega || A_{2\omega}$):

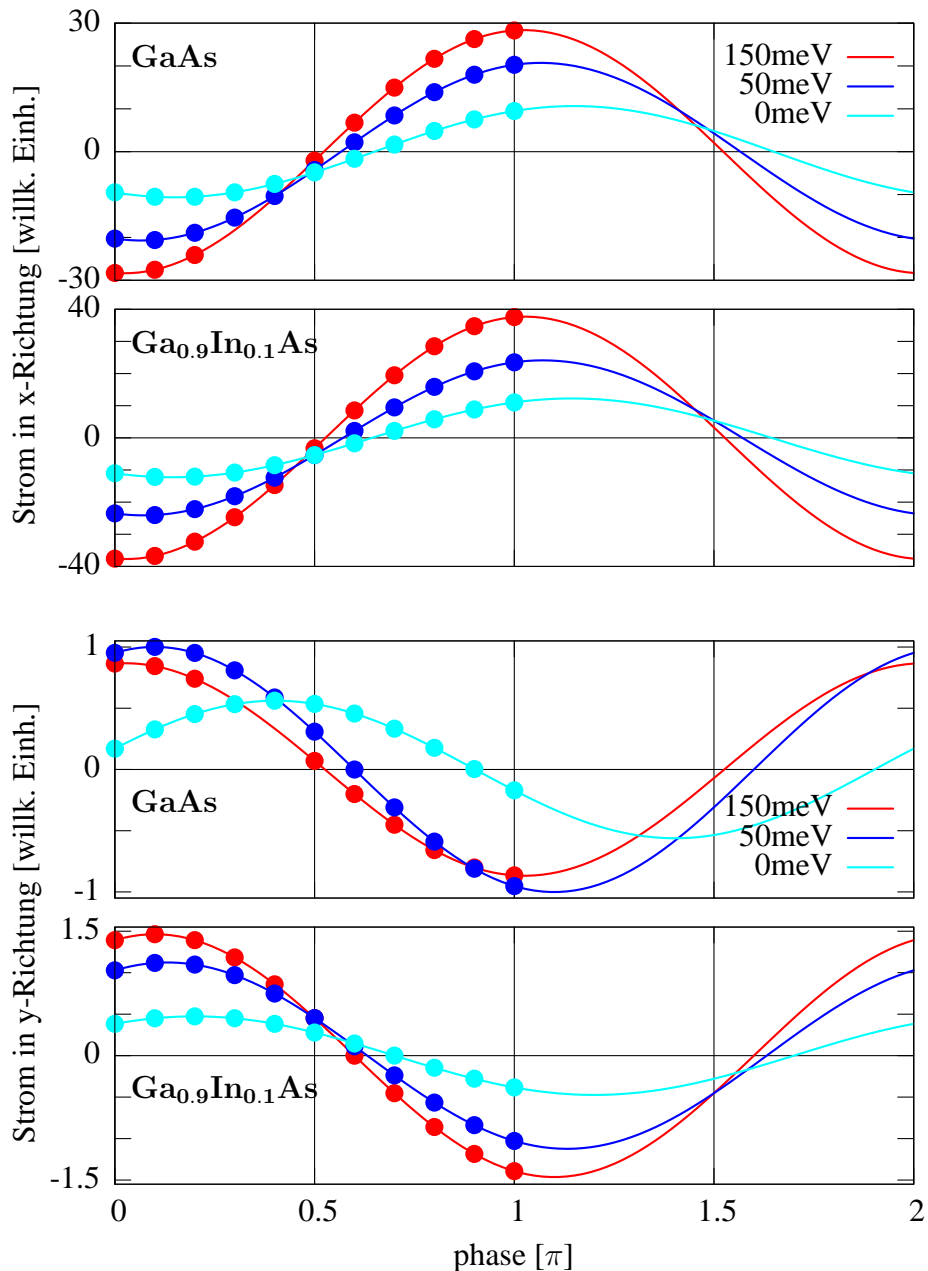


Abbildung 2.23: Phasen-Abhängigkeit des Stromes im c_{1U} -Band in x- (oben) und y-Richtung (unten) zum Zeitpunkt $t = 0.15ps$ für einen GaAs- und einen Ga₉₀In₁₀As-Quantenfilm. Der ω -Puls ist wie der 2ω -Puls in x-Richtung polarisiert, wobei 2ω der Energie $E_G + 150meV$ (rot), $E_G + 50meV$ (blau) und E_G (türkis) entspricht. Nach Abklingen der anregenden Pulse sind der c_{1U} - und der c_{1L} -Strom in x-Richtung identisch, in y-Richtung unterscheiden sich beide Ströme nur im Vorzeichen. Die Quantenfilmdicke ist 8nm, die Barriere besteht aus Ga_{0.8}Al_{0.2}As.

oder Drei-Band-Modelle sowie bei allen bisherigen Versuchen mit einer feineren k -Auflösung zu beobachten waren. Damit sollte es sich nach dem bisherigen Stand um echte physikalische Effekte handeln und nicht um numerischen Artefakte. Zudem stellen diese Ströme auch nichts wirklich Erstaunliches dar, was jeglicher Intuition widersprechen würde. Schließlich fließen ja senkrecht zur Polarisationsrichtung der ω - und 2ω -Pulse keine "echten" Ströme, sondern nur Ladungsströme, d.h. es ist kein makroskopischer Strom zu beobachten. Die Herkunft dieser "irregulären" Spinströme konnte in einem ersten Versuch mit der in dieser Arbeit vorgeschlagenen Analyseverfahren aus Abschnitt 2.5.5 im Gegensatz zur Herkunft der "irregulären" Ladungsströme nicht geklärt werden. Diese Methode beruht auf einer einfachen Entwicklung in der Ordnung des anregenden Feldes. Ein mögliches Problem könnte dabei sein, dass die schwachen "ungewöhnlichen" Spinströme der Ladungsstrom-Konfiguration bis auf das Vorzeichen nahezu dieselbe Phasenabhängigkeit wie die wesentlich stärkeren "regulären" Ladungsströme aufweisen. Daher lässt sich der Einfluss der Ladungsströme auch nicht durch eine geschickte Phasenwahl reduzieren, wie es bei der Spinstrom-Konfiguration möglich wäre. Eine theoretische wie auch experimentelle Separation beider Effekte sollte sich aufgrund der unterschiedlichen Größenordnungen schwierig gestalten.

Im folgenden Abschnitt soll mit Hilfe der bereits erwähnten Analyseverfahren zumindest die Herkunft der "ungewöhnlichen" Ladungsströme geklärt werden.

2.5.5 Analyse der "irregulären" Ströme

In diesem Abschnitt soll der Ursprung der "ungewöhnlichen" Spin- und Ladungsströme untersucht sowie der Einfluss der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrixelemente bei der Stromentstehung geklärt werden. Das dabei verwendete Modellsystem sollte möglichst einfach gehalten werden, damit andere, in diesem Zusammenhang störende Effekte (Phasenverschiebungen, Multi-Band-Einflüsse) nicht auftreten können. Dafür werden die Bewegungsgleichungen auf das Niveau der optischen Bloch-Gleichungen einer TM-Anregung (2.93) reduziert und auf ein Zwei-Band-Modell beschränkt:

$$-i\hbar\partial_t x_{\rho_n \mathbf{k}}^{\lambda_n} = (E_{\lambda_n}^e - E_{\rho_n}^e) x_{\rho_n \mathbf{k}}^{\lambda_n} - \mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sum_{\tau} \left[\Pi_{\lambda_n \mathbf{k}}^{\tau_n} x_{\rho_n \mathbf{k}}^{\tau_n} - x_{\tau_n \mathbf{k}}^{\lambda_n} \Pi_{\tau_n \mathbf{k}}^{\rho_n} \right]$$

Die Bloch-Gleichungen sind in diesem Fall diagonal in der Entartungszahl. Zudem verläuft die Dynamik in beiden Entartungsgruppen $\{U, L\}$ unabhängig voneinander ab. Daher muss der Entartungsindex im Folgenden nicht explizit angegeben. Mit c und v sind grundsätzlich c_{1U} und v_{1U} für Gruppe U sowie c_{1L} und v_{1L} für Gruppe L gemeint.

Für die Untersuchung der "irregulären" Ströme wird das Interband-Matrixelement

$$\Pi_{ck}^{vk} = \Pi_{ck}^{vk}|_{hh} + \Pi_{ck}^{vk}|_{lh} \quad (2.124)$$

in seine hh - und lh -artigen Komponenten zerlegt, die Intra-Band-Matrixelemente bleiben unverändert. Danach werden die Bloch-Gleichungen bis zur dritten Ordnung im anregenden Feld entwickelt.

1. Ordnung: ($n \in \{hh, lh\}$)

$$-i\hbar\partial_t p_{v\mathbf{k}|n}^c|_n^{(1)} = (E_{c\mathbf{k}}^e - E_{v\mathbf{k}}^e) p_{v\mathbf{k}|n}^c|_n^{(1)} - \mathbf{A}_{\parallel} \cdot \Pi_{c\mathbf{k}|n}^{v\mathbf{k}} \quad (2.125)$$

2. Ordnung: ($m, n \in \{hh, lh\}$)

$$\begin{aligned}
-i\hbar\partial_t p_{vk}^c|_n^{(2)} &= (E_{ck}^e - E_{vk}^e) p_{vk}^c|_n^{(2)} - \mathbf{A}_{\parallel} \cdot [\mathbf{\Pi}_{ck}^{ck} - \mathbf{\Pi}_{vk}^{vk}] p_{vk}^c|_n^{(1)} \\
-i\hbar\partial_t f_{ck}^e|_{nm}^{(2)} &= -\mathbf{A}_{\parallel} \cdot [\mathbf{\Pi}_{ck}^{vk}|_m p_{ck}^v|_n^{(1)} - p_{vk}^c|_n^{(1)} \mathbf{\Pi}_{vk}^{ck}|_m] \\
-i\hbar\partial_t f_{vk}^e|_{nm}^{(2)} &= -\mathbf{A}_{\parallel} \cdot [\mathbf{\Pi}_{vk}^{ck}|_m p_{vk}^c|_n^{(1)} - p_{ck}^v|_n^{(1)} \mathbf{\Pi}_{ck}^{vk}|_m]
\end{aligned} \tag{2.126}$$

3. Ordnung: ($m, n \in \{hh, lh\}$)

$$\begin{aligned}
-i\hbar\partial_t p_{vk}^c|_{nm}^{(3)} &= [\dots] \text{ (nicht benötigt)} \\
-i\hbar\partial_t f_{ck}^e|_{nm}^{(3)} &= -\mathbf{A}_{\parallel} \cdot [\mathbf{\Pi}_{ck}^{vk}|_m p_{ck}^v|_n^{(2)} - p_{vk}^c|_n^{(2)} \mathbf{\Pi}_{vk}^{ck}|_m] \\
-i\hbar\partial_t f_{vk}^e|_{nm}^{(3)} &= -\mathbf{A}_{\parallel} \cdot [\mathbf{\Pi}_{vk}^{ck}|_m p_{vk}^c|_n^{(2)} - p_{ck}^v|_n^{(2)} \mathbf{\Pi}_{ck}^{vk}|_m]
\end{aligned} \tag{2.127}$$

In erster Ordnung werden nur hh - und lh -artige Polarisationen und keine Dichten erzeugt. Die Dichten zweiter Ordnung koppeln über das Interband-Matrixelement an die hh - und lh -artigen Polarisationen erster Ordnung. Dabei treten reine und gemischte Dichten

$$f_{\lambda k}^e|_{rein}^{(2)} = f_{\lambda k}^e|_{hh\ hh}^{(2)} + f_{\lambda k}^e|_{lh\ lh}^{(2)} \quad \text{und} \quad f_{\lambda k}^e|_{misch}^{(2)} = f_{\lambda k}^e|_{hh\ lh}^{(2)} + f_{\lambda k}^e|_{lh\ hh}^{(2)} \tag{2.128}$$

auf. Die Polarisationen zweiter Ordnung sind wieder entweder rein hh - oder rein lh -artig, da sie über die Intradband-Matrixelemente von den Polarisationen erster Ordnung erzeugt werden. In dritter Ordnung treten analog zur zweiten Ordnung reine und gemischte Dichten auf. Die Polarisationen der dritten Ordnung sollten für das Auftreten der "ungewöhnlichen" Ströme nicht von Bedeutung sein. Mit nachfolgender numerischer Analyse wird gezeigt werden, dass die Ströme nur durch die Dichten dritter Ordnung erzeugt werden. Dabei soll insbesondere die Rolle der reinen und gemischten Dichten untersucht werden.

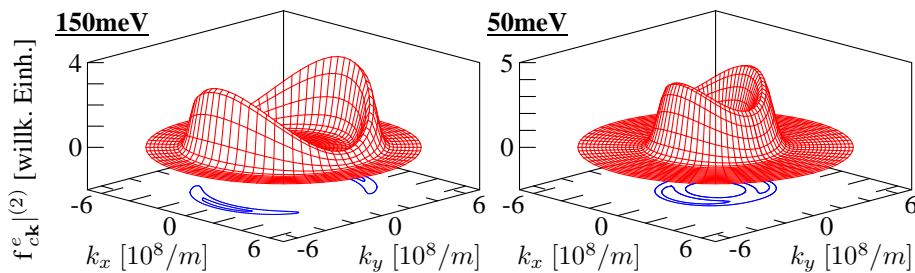


Abbildung 2.24: Leitungsband-Dichte $f_{ck}^e|^{(2)}$ der zweiten Ordnung. Der ω -Puls ist wie der 2ω -Puls in x -Richtung polarisiert, wobei 2ω der Energie $E_G + 150\text{meV}$ (links) bzw. $E_G + 50\text{meV}$ (rechts) entspricht. Die Abweichungen von der Rotationssymmetrie werden durch die gemischten Dichten erzeugt. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{90}\text{In}_{10}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{80}\text{Al}_{20}\text{As}$ -Barrieren.

Für die später gezeigten numerischen Ergebnisse wurden die Amplituden des ω - und 2ω -Pulses gleich groß gewählt. Schließlich wurden bei der Entwicklung nach den Ordnungen des anregenden Feldes dessen ω - und 2ω -Anteile nicht gesondert behandelt. Die Abbildungen werden die Dichten zu einem beliebigen Zeitpunkt nach Abklingen der anregenden Pulse zeigen. Der genaue Zeitpunkt ist unerheblich, da keine Relaxationsmechanismen berücksichtigt

wurden und damit wenige Halbwertsbreiten nach der optischen Anregung konstante Besetzungen vorliegen. Zudem beschränkt sich die Untersuchung auf das $Ga_{90}In_{10}As$ -System. Dies ist jedoch vollkommen ausreichend, um die grundsätzlichen Zusammenhänge bei der Entstehung der Ströme zu verstehen.

Betrachtet man die Besetzungen der zweiten Ordnung, stellt man fest, dass sich diese für eine Anregung mit senkrecht oder parallel zueinander linear polarisierten ω - und 2ω -Pulsen nur durch eine $\pi/2$ -Drehung im k -Raum unterscheiden. Zudem sind die optisch erzeugten Besetzungen unabhängig von der Entartungsgruppe. Die Erzeugung und Richtung dieser Verteilungen sind eindeutig auf die 2ω -Anregung zurückzuführen, was sich leicht mit einer Rechnung ohne ω -Puls ($A_\omega = 0$) bestätigen lässt. Abbildung 2.24 weist zudem keine Rotationssymmetrie auf. Eine Zerlegung in reine und gemischte Anteile zeigt, dass die gebrochene Symmetrie durch die gemischten Dichten erzeugt wird und dass die reinen Besetzungen Rotationssymmetrie aufweisen. Die Verteilungen der zweiten Ordnung bewirken keine Ströme, da sie zur x - und y -Achse spiegelsymmetrisch sind. Verringert man die Energie des 2ω -Pulses von $E_G + 150\text{meV}$ auf $E_G + 50\text{meV}$, so nimmt, wie man Abbildung 2.9 entnehmen kann, der lh -artige Anteil der Valenzband-Eigenfunktion ab. Mit zunehmend rein hh_1 -artig werden den Wellenfunktionen reduziert sich der Stärke der gemischten Dichten. Folglich werden die Abweichungen von der Rotationssymmetrie geringer. In der unmittelbaren Umgebung des Γ -Punktes sind die Besetzungen nahezu rotationssymmetrisch.

In dritter Ordnung stellt sich die Situation wesentlich komplizierter dar. Die Dichten dieser Ordnung weisen in eine Raumrichtung keine Spiegelsymmetrie mehr auf und führen daher zu Strömen. Für senkrecht zueinander polarisierte ω - und 2ω -Pulse erhält man in Richtung des ω -Pulses Spinströme. Eine Zerlegung zeigt, dass diese Ströme ausschließlich von den reinen Dichten getragen werden. Für halbzahlige Phasen $\phi_{2\omega}$ wird die Spinstrom-Stärke maximal, während gleichzeitig keine gemischten Besetzungen vorhanden sind. Der aus dem hh -Anteil der reinen Dichten resultierende Strom kann teilweise je nach Anregungsenergie dem Strom des reinen lh -Anteils entgegengesetzt sein.

Neben den "regulären" Spinströmen tritt im Entwicklungsmodell in dritter Ordnung auch ein Ladungsstrom in Richtung des 2ω -Pulses auf, der für $\pi_{2\omega} \in \{0, \pi\}$ maximal wird. Dieser wird ausschließlich von den gemischten Dichten getragen. Für maximale "irreguläre" Ladungsströme löscht sich der reine Besetzungsanteil vollkommen aus. Dies erklärt auch, warum in Abbildung 2.22 der Strom in y -Richtung mit abnehmender Anregungsenergie wesentlich schneller abfällt als der in x -Richtung. Zusätzlich zu der für beide Stromsorten relevanten Abnahme aufgrund der Proportionalität zum Intra-Band-Matrixelement (vgl. Abbildung 2.14), kommt für den "irregulären" Strom in y -Richtung die abnehmende Bandmischung zum Tragen.

Bei zueinander parallel polarisierten ω - und 2ω -Pulsen tritt in Polarisationsrichtung der ω - und 2ω -Pulse ein Ladungsstrom auf. Dieser wird sowohl von den gemischten als auch von den reinen Dichten erzeugt. Der hh - und lh -Anteil der reinen Ströme hat für die in Abbildung 2.26 gezeigten Rechnungen dieselbe Richtung und ist der Stromrichtung des gemischten Anteils entgegengesetzt. Das Einfach-Maximum der reinen Dichten in negativer Stromrichtung wird durch den gemischten Anteil zu einem Doppelmaximum. Maximale Ladungsströme erhält man für Phasen $\phi_{2\omega} \in \{0, \pi\}$. Hingegen verschwinden für $\phi_{2\omega} \in \{\pi/2, 3\pi/2\}$ sowohl die gemischten als auch die reinen Besetzungen der dritten Ordnung und damit auch der Strom vollständig. Ein "irregulärer" Ladungsstrom in y -Richtung war in keinem der untersuchten Fälle zu beobachten.

Das Entwicklungsmodell kann somit sowohl die Bedeutung der Bandmischung bei der Entstehung der "regulären" Spin- und Ladungsströme in Polarisationsrichtung des ω -Pulses als

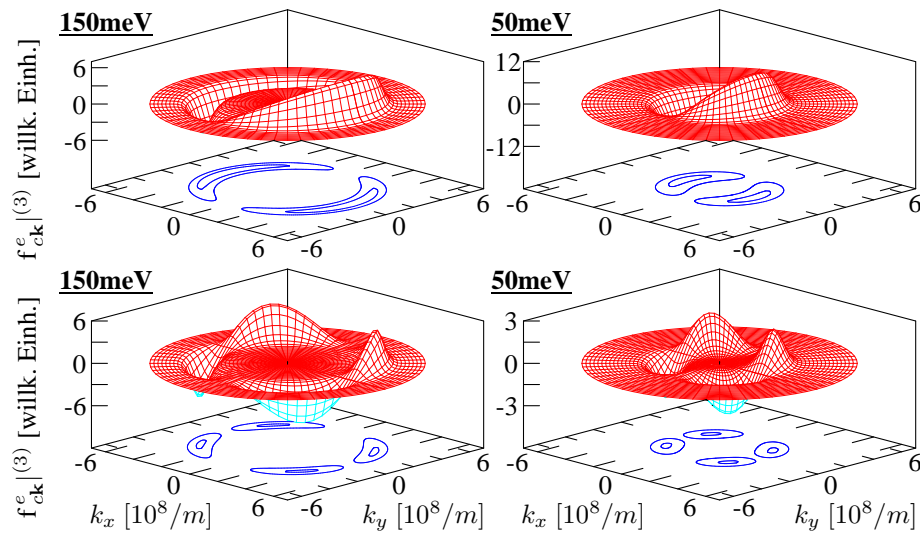


Abbildung 2.25: Leitungsband-Dichte $f_{ck}^{e(3)}$ des c_U -Bandes in dritter Ordnung im Feld. Der ω -Puls ist in x -Richtung, der 2ω -Puls in y -Richtung polarisiert, wobei 2ω der Energie $E_G + 150\text{meV}$ (links) bzw. $E_G + 50\text{meV}$ (rechts) entspricht. Die oberen beiden Abbildungen gehören zu Rechnungen mit der Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$ und zeigen somit Spinströme, die unteren beiden Abbildungen gehören zu Rechnungen mit der Phase $\phi_{2\omega} = \pi$ und zeigen somit Ladungsströme. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{90}\text{In}_{10}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{80}\text{Al}_{20}\text{As}$ -Barrieren.

auch die der "irregulären" Ladungsströme erklären. Zudem konnte die Abweichung von der Rotationssymmetrie systematisch analysiert und das Auftreten eines Doppelmaximum in den Ladungsstromverteilungen den gemischten Dichten zugeordnet werden. Dagegen bleibt die Ursache der "ungewöhnlichen" Spinströme im Dunkeln. Da diese jedoch um mehr als eine Größenordnung kleiner als die regulären Ladungsströme ausfallen, war zu erwarten, dass diese auf einem komplizierteren Zusammenhang beruhen, der sich mit dem hier verwendeten einfachen Modell nicht beschreiben lässt. Es könnte sein, dass die "irregulären" Spinströme nur dann merklich auftreten, wenn die Amplitude des nicht resonanten ω -Pulses wesentlich größer als die des resonanteren 2ω -Pulses ist ($A_\omega \gg A_{2\omega}$). Für einen solchen Fall ist die hier verwendete Entwicklung aber nicht gültig, da die Amplituden gleich groß gewählt worden sind. Dennoch kann das einfache Entwicklungsmodell zumindest für die anderen Zusammenhänge als geeignete Methode bei der Analyse der Stromentstehung angesehen werden. In den bisherigen Abschnitten wurden die Untersuchungen auf die Ströme der Leitungsänder beschränkt. Im folgenden Abschnitt soll das Blickfeld auf alle relevanten Ströme ausgedehnt werden.

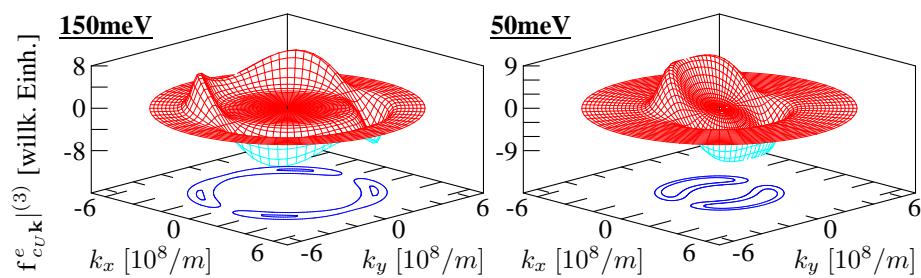


Abbildung 2.26: Leitungsband-Dichte $f_{c_U, \mathbf{k}}^e^{(3)}$ des c_U -Bandes in dritter Ordnung im Feld. Der ω -Puls ist wie der 2ω -Puls in x -Richtung polarisiert, wobei 2ω der Energie $E_G + 150\text{meV}$ (links) bzw. $E_G + 50\text{meV}$ (rechts) entspricht. Beiden Abbildungen gehören zu Rechnungen mit der Phase $\phi_{2\omega} = 0$ und zeigen somit Ladungsströme. Die Halbleiterstruktur besteht aus einem 8nm dicken $\text{Ga}_{90}\text{In}_{10}\text{As}$ -Quantenfilm zwischen $\text{Ga}_{80}\text{Al}_{20}\text{As}$ -Barrieren.

2.5.6 Relaxation der Intraband- und Intervallenzbandströme

In diesem Abschnitt soll die Relaxation der Intraband- und Intervallenzbandströme für die $GaAs$ - und $Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Quantenfilme näher untersucht werden.

Stromrelaxation für die Spinstrom-Konfiguration ($A_{\omega} \perp A_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150meV$

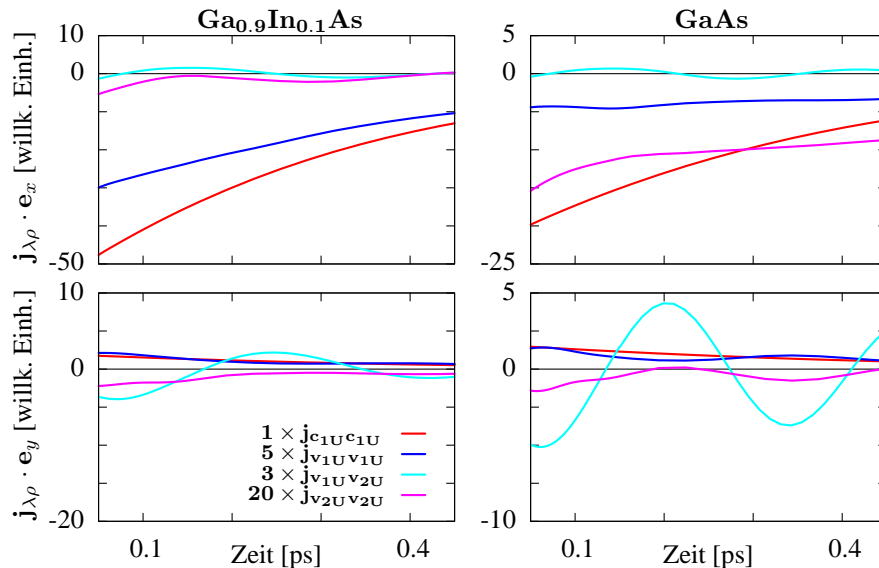


Abbildung 2.27: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen $GaAs$ - (rechts) und einen $Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Quantenfilm (links). Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150meV$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert. Die Ströme in x -Richtung (oben) sind Spin- bzw. Entartungsströme, die in y -Richtung (unten) entsprechen Ladungsströmen. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

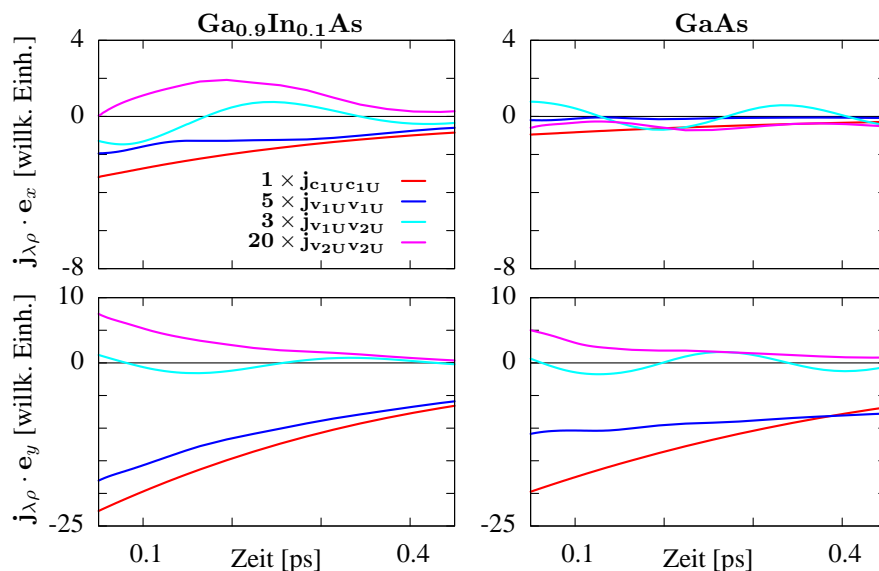


Abbildung 2.28: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen $GaAs$ - (rechts) und einen $Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Quantenfilm (links). Bis auf die Phase des 2ω -Pulses $\phi_{2\omega} = \pi$ entsprechen die Parameter und Zusammenhänge denen aus Abbildung 2.27. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

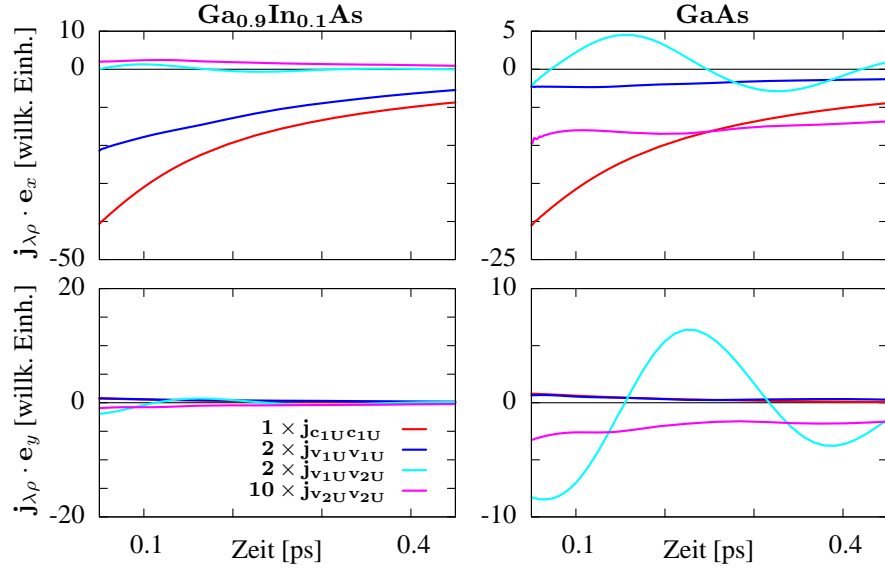
Stromrelaxation für die Spinstrom-Konfiguration ($A_\omega \perp A_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$


Abbildung 2.29: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen GaAs - (rechts) und einen $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm (links). Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert. Die Ströme in x -Richtung (oben) sind Spin- bzw. Entartungsströme, die in y -Richtung (unten) entsprechen Ladungsströmen. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

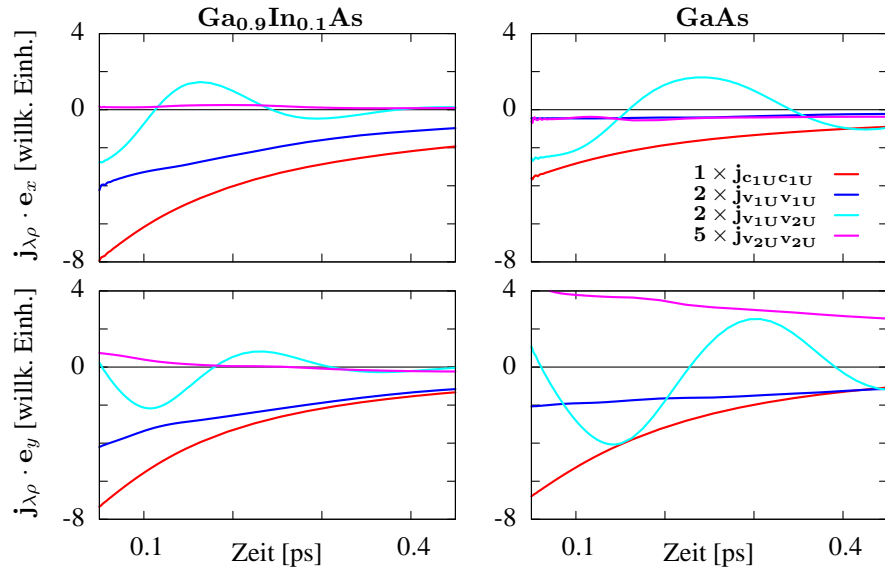


Abbildung 2.30: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen GaAs - (rechts) und einen $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm (links). Bis auf die Phase des 2ω -Pulses $\phi_{2\omega} = \pi$ entsprechen die Parameter und Zusammenhänge denen aus Abbildung 2.29. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

Dafür wurden Rechnungen für Ladungs- und Spinstrom-Konfigurationen durchgeführt bei einer optischen Anregung 150meV bzw. 50meV oberhalb der Bandkante. Die Untersuchungen werden unter anderem zeigen, dass die LO-Phonon-Streuung für die Leitungsbandströme

Stromrelaxation für die Ladungsstrom-Konfiguration ($A_\omega || A_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$

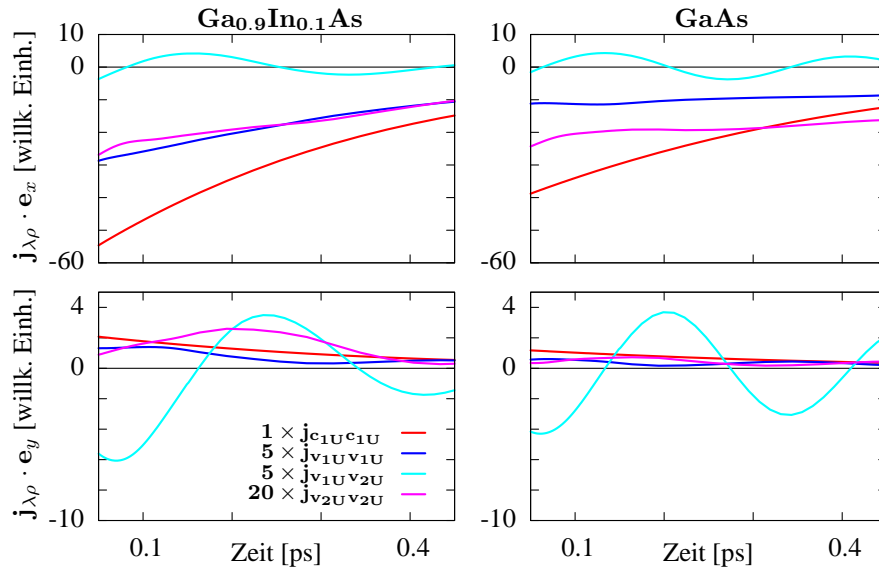


Abbildung 2.31: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen GaAs - (rechts) und einen $\text{Ga}_{0,9}\text{In}_{0,1}\text{As}$ -Quantenfilm (links). Die Anregung erfolgt in Ladungsstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = 0$. Der ω -Laserpuls ist somit wie der 2ω -Laserpuls in x -Richtung polarisiert. Die Ströme in x -Richtung (oben) sind Ladungsströme, die in y -Richtung (unten) entsprechen Spin- bzw. Entartungsströmen. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

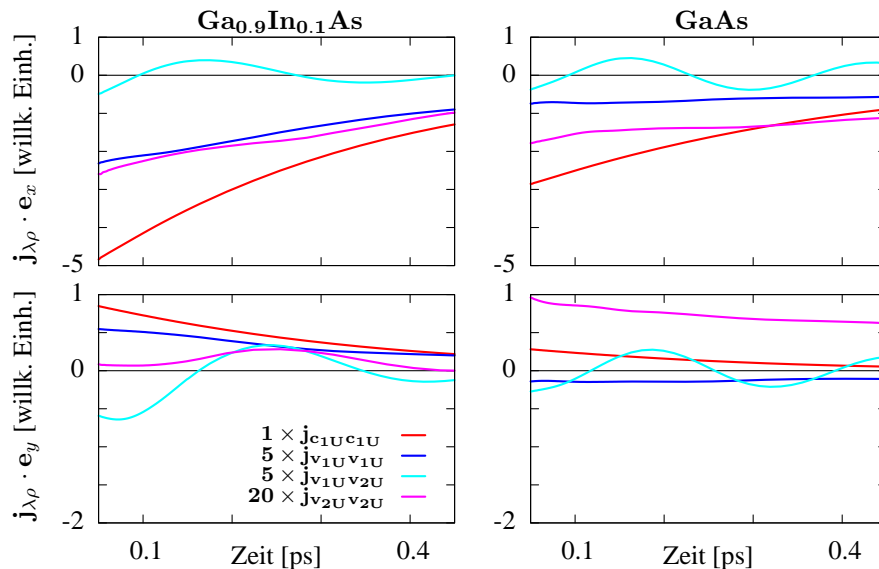


Abbildung 2.32: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen GaAs - (rechts) und einen $\text{Ga}_{0,9}\text{In}_{0,1}\text{As}$ -Quantenfilm (links). Bis auf die Phase des 2ω -Pulses $\phi_{2\omega} = \pi/2$ entsprechen die Parameter und Zusammenhänge denen aus [Abbildung 2.31](#). Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

beider Systeme sowie den v_1 -Valenzbandstroms im $\text{Ga}_{0,9}\text{In}_{0,1}\text{As}$ -Quantenfilm einen geeigneten Relaxationsmechanismus darstellt. Im GaAs -Quantenfilm findet eine solche Valenzband-Relaxation nur über sehr große Zeitskalen statt und sollte nicht dem dominanten Relaxations-

Stromrelaxation für die Ladungsstrom-Konfiguration ($A_\omega || A_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$

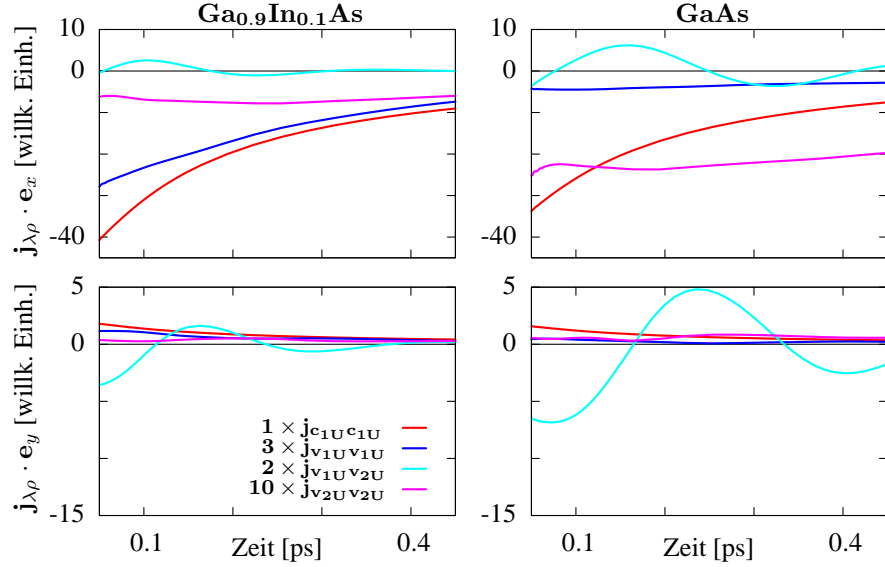


Abbildung 2.33: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen GaAs- (rechts) und einen $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm (links). Die Anregung erfolgt in Ladungsstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = 0$. Der ω -Laserpuls ist somit wie der 2ω -Laserpuls linear in x -Richtung polarisiert. Die Ströme in x -Richtung (oben) sind Ladungsströme, die in y -Richtung (unten) entsprechen Spin- bzw. Entartungsströmen. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

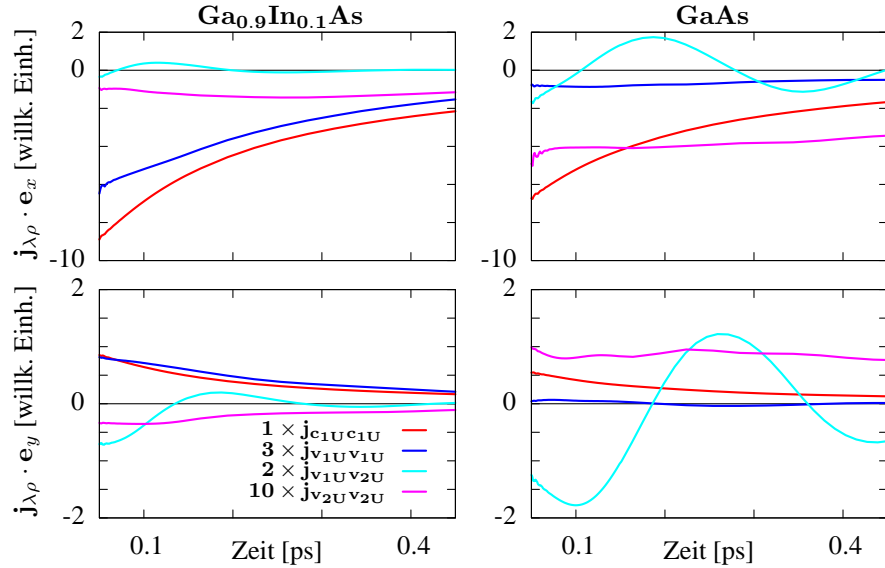


Abbildung 2.34: Intraband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie der Intervallenzband-Strom (türkis) für einen GaAs- (rechts) und einen $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm (links). Bis auf die Phase des 2ω -Pulses $\phi_{2\omega} = \pi/2$ entsprechen die Parameter und Zusammenhänge denen aus Abbildung 2.33. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

prozess entsprechen. Hauptursache dafür sollte sein, dass die energetische Differenz zwischen den unbesetzten Valenzband-Zuständen und dem jeweiligen Bandmaximum unterhalb einer LO-Phonon-Energie liegt. Bei der Streuung gilt jedoch die Energie-Erhaltung, so dass zwi-

schen dem elektronischen Anfangs- und Endzustand genau eine LO-Phonon-Energie liegen sollte.

Abbildung 2.27 zeigt die Strom-Relaxation für die Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) bei einer Anregung 150 meV oberhalb der Bandkante und einer Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Für diese Wahl sind maximale Spinströme/Entartungsströme zu erwarten. Der Intervallenzbandstrom sowie der Intrabandstrom des v_{2U} -Bandes spielen dabei nur eine untergeordnete Rolle. Zudem ist auffällig, dass die Entartungsströme (x-Richtung) im $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm ungefähr doppelt so stark wie im GaAs -Quantenfilm ausfallen. Die Stromrelaxation des v_{1U} -Bandes läuft im GaAs -System aus den schon erwähnten Gründen nur sehr langsam ab. Dies liegt an den flachen Valenzbändern dieser Struktur (vgl. Abbildung 2.6) sowie der im Vergleich dazu recht großen LO-Phonon-Energie ($\simeq 35 \text{ meV}$). Die Ladungsströme in y-Richtung sind vernachlässigbar schwach. Die Situation ändert sich grundlegend, wenn man, wie in Abbildung 2.28 dargestellt, die Phase auf $\phi_{2\omega} = \pi$ erhöht. Zum einen sind nun die Entartungsströme der x-Richtung relativ schwach, während die Ladungsströme in y-Richtung dominant werden, zum anderen sind die Ströme für beide Quantenfilm-Systeme vergleichbar stark. Erneut liefert der Intervallenzbandstrom sowie der Intrabandstrom des v_{2U} -Bandes nur geringe Beiträge zum Gesamtstrom.

Verringert man für beide Phasen die Anregungsenergie auf $2\hbar\omega = E_G + 50 \text{ meV}$, wie in Abbildung 2.29 und 2.30 dargestellt, werden die Entartungsströme nur unwesentlich schwächer, während die "ungewöhnlichen" Ladungsströme um nahezu zwei Drittel reduziert werden. Dies sollte mit den Analysen aus Abschnitt 2.5.5 verständlich sein. Betrachtet man z.B. den optischen Übergang vom v_{1U} - in das c_{1U} -Band, so wird der lh -artige Anteil am Interband-Matrixelement aufgrund der k_{\parallel} -Abhängigkeit der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Eigenfunktionen immer geringer, je näher man an der Bandkante anregt. Die "irregulären" Ladungsströme werden aber durch das Zusammenspiel der hh - und lh -artigen Matrixelement-Anteile bestimmt. Dies führt zu der gezeigten starken Reduzierung der Ladungsströme, wenn man Abbildungen 2.30 und 2.28 mit einander vergleicht.

Wiederholt man die Analyse für eine Anregung in Ladungsstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \parallel \mathbf{A}_{2\omega}$) für Anregungen 150 meV bzw. 50 meV oberhalb der Bandkante zu zwei unterschiedlichen Phasen $\phi_{2\omega} \in \{0, \pi/2\}$, stellt man fest, dass die "ungewöhnlichen" Spinströme in allen Darstellungen keine entscheidende Rolle spielen. Dies gilt ebenso für den Intervallenzbandstrom und den v_{2U} -Intrabandstrom. Zudem scheint die Relaxation über LO-Phonon-Streuung abermals für die Valenzbänder des GaAs -Quantenfilms nicht der dominante Relaxationsmechanismus zu sein. Hierfür müssten wohl Ladungsträger-Ladungsträger-Streuterme berücksichtigt werden. Für weitere Details sei auf Abbildung 2.31–2.34 verwiesen.

Tabelle 2.5 zeigt einige ausgewählte Zerfallszeiten der "regulären" Ströme aus Abbildung 2.27–2.34. Hierfür wurden die Ströme gesondert für Zeiten kurz nach der Anregung ($0.05 \text{ ps} < t < 0.2$) und für längere Zeiten ($0.4 \text{ ps} < t < 1.0$) untersucht. Den bestimmten Zerfallszeiten kann man entnehmen, dass die Relaxation in GaAs meist langsamer verläuft als in $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$. Ferner lässt sich die Tendenz ablesen, dass für Anregungen weit oberhalb der Bandkante die Relaxationszeiten bei Übergang vom Kurzzeit-Limes zum Langzeit-Limes abnehmen, während für die Anregung in der Nähe der Bandkante dieser Trend umgekehrt ist. Insbesondere für die Leitungsbänder erhöht sich die Relaxationszeit um mehr als das Doppelte. Im Langzeitlimes braucht die Relaxation bei einer Anregung in der Nähe der Bandkante längere Zeit als für eine Anregung weiter oben im Band. Dies sollte daran liegen, dass bei der Relaxation die Energie erhalten ist. Damit muss zwischen dem elektronischen Ausgangs- und Endzustand bei einer Streuung an einem LO-Phonon ungefähr eine LO-Phonon-Energie

Anregung 150 meV oberhalb der Bandkante:

Abbildung	Material	Phase	Richtung	Band	[0.05 ps, 0.2 ps]	[0.4 ps, 1.0 ps]
2.27	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	$\pi/2$	x	c_{1U}	$\tau_S = 328 fs$	$\tau_S = 316 fs$
2.31	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	0	x	c_{1U}	$\tau_L = 325 fs$	$\tau_L = 316 fs$
2.27	$GaAs$	$\pi/2$	x	c_{1U}	$\tau_S = 363 fs$	$\tau_S = 331 fs$
2.31	$GaAs$	0	x	c_{1U}	$\tau_L = 372 fs$	$\tau_L = 334 fs$
2.27	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	$\pi/2$	x	v_{1U}	$\tau_S = 428 fs$	$\tau_S = 386 fs$
2.31	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	0	x	v_{1U}	$\tau_L = 467 fs$	$\tau_L = 400 fs$
2.27	$GaAs$	$\pi/2$	x	v_{1U}	—	$\tau_S = 1201 fs$
2.31	$GaAs$	0	x	v_{1U}	—	$\tau_L = 1377 fs$

Anregung 50 meV oberhalb der Bandkante:

Abbildung	Material	Phase	Richtung	Band	[0.05 ps, 0.2 ps]	[0.4 ps, 1.0 ps]
2.29	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	$\pi/2$	x	c_{1U}	$\tau_S = 191 fs$	$\tau_S = 465 fs$
2.33	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	0	x	c_{1U}	$\tau_L = 192 fs$	$\tau_L = 471 fs$
2.29	$GaAs$	$\pi/2$	x	c_{1U}	$\tau_S = 197 fs$	$\tau_S = 458 fs$
2.33	$GaAs$	0	x	c_{1U}	$\tau_L = 200 fs$	$\tau_L = 462 fs$
2.29	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	$\pi/2$	x	v_{1U}	$\tau_S = 307 fs$	$\tau_S = 325 fs$
2.33	$Ga_{0.9}In_{0.1}As$	0	x	v_{1U}	$\tau_L = 315 fs$	$\tau_L = 352 fs$
2.29	$GaAs$	$\pi/2$	x	v_{1U}	—	$\tau_S = 699 fs$
2.33	$GaAs$	0	x	v_{1U}	—	$\tau_L = 1003 fs$

Tabelle 2.5: Ausgewählte Relaxationszeiten der Entartungs- und Ladungsströme aus Abbildung 2.27–2.34 für kurze ($0.05 ps < t < 0.2$) und längere Zeiten ($0.4 ps < t < 1.0$) nach der optischen Anregung. Der obere (untere) Teil entspricht einer Anregungen 150 meV (50 meV) oberhalb der Bandkante.

liegen. Diese Bedingung ist weit oben im Band leichter zu erfüllen als in der Nähe der Bandkante.

Um die Probleme mit der LO-Phonon-Relaxation im $GaAs$ -System zu verdeutlichen, sind in Abbildung 2.35 die Valenz- und Leitungsband-Verteilungen zum Zeitpunkt $t_1 = 0.1 ps$ und $t_2 = 0.45 ps$ dargestellt. Anstelle der besetzten Zustände sind für die Valenzbänder jeweils die unbesetzten Zustände dargestellt. Diese Verteilungen gehören zu einer Anregung in Spinstrom-Konfiguration 150 meV oberhalb der Bandlücke bei einer Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Die dargestellten in x-Richtung asymmetrischen Verteilungen führen zu Entartungsströmen. Während die Relaxation im c_{1U} -Band zu einer Konzentrierung der anfänglichen Ringverteilung um $k_{||} = 0$ führt, bleibt die Struktur der Valenzband-Verteilungen weitgehend erhalten, da der energetische Abstand der Ringstrukturen zum jeweiligen Valenzband-Maximum unterhalb einer LO-Phonon-Energie liegt. Im Vergleich dazu zeigt Abbildung 2.36, die zu einer Rechnung mit identischen Anregungsparametern im $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -System gehört, eine eindeutige Relaxation der v_{1U} -Verteilung. Diese bildet mit zunehmender Zeit wie die Leitungsband-Verteilung ein Maximum um $k_{||} = 0$ aus, was einer Relaxation um eine LO-Phonon-Energie entsprechen sollte. Die Relaxation der c_{1U} -Verteilungen verläuft in ähnlicher Weise wie im $GaAs$ -System. Zudem lässt sich Abbildung 2.36 auch eine schwache Relaxation des v_{2U} -Bandes entnehmen. Abbildung 2.37 zeigt die Relaxation des c_{1U} - und des v_{1U} -Bandes für den $Ga_{0.9}In_{0.1}As$ -

Quantenfilm zu drei verschiedenen Zeiten ($t \in \{0.1 \text{ ps}, 0.45 \text{ ps}, 0.95 \text{ ps}\}$). Dabei erfolgt die Anregung in Spinstrom-Konfiguration 50 meV oberhalb der Bandkante bei einer Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Die Relaxation über die LO-Phononen scheint in Richtung einer Fermi-Dirac-artigen Gleichgewichtsverteilung zu gehen. Diese Verteilungen sind aufgrund der hohen Temperatur $T = 300 \text{ K}$ (thermische Energie $k_B T \simeq 26 \text{ meV}$) relativ breit, wobei die Leitungsband-Verteilung aufgrund der größeren Bandkrümmung schmaler ausfällt als die des Valenzbands. Man sieht auch sehr gut, wie mit zunehmender Relaxation die Asymmetrie der Verteilungen abnimmt und die Verteilungen immer rotationssymmetrischer werden.

Insgesamt haben die Analysen dieses Abschnitts gezeigt, dass die Streuung an LO-Phononen ein geeigneter Relaxationsmechanismus für die Leitungsbandströme ist. Für die Valenzbänder wird die Relaxation weitgehend unterdrückt, wenn die Bandkrümmung zu flach ist, d.h. wenn die optisch erzeugten unbesetzten Valenzbandzustände energetisch weniger als eine LO-Phonon-Energie vom Band-Maximum entfernt liegen. Dies ist insbesondere für den *GaAs*-Quantenfilm der Fall. Für den *Ga_{0,8}In_{0,1}As*-Quantenfilm stellt die LO-Phonon-Streuung sowohl für die Leitungs- als auch für die Valenzbänder einen geeigneten Relaxationsmechanismus dar. Im Langzeit-Limes konvergieren die Besetzungen gegen Gleichgewichtsverteilungen. Ferner konnte gezeigt werden, dass je nachdem, ob man nah an der Bandkante oder höher im Band anregt, unterschiedliche Relaxationszeiten auftreten.

Im folgenden Abschnitt sollen abschließend noch einige Bemerkungen zur Markov-Näherung gemacht werden.

GaAs

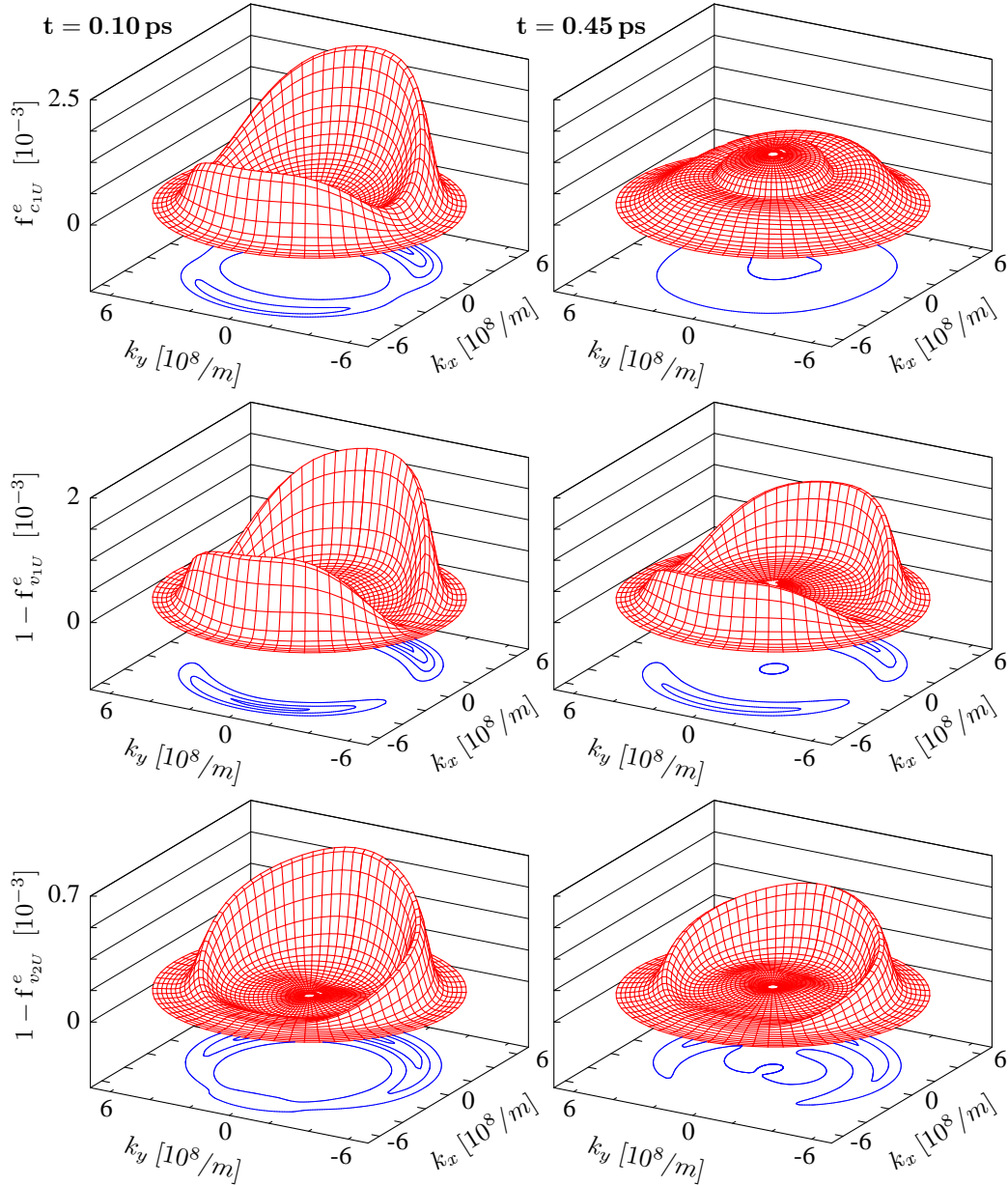
Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$ 

Abbildung 2.35: Besetzungen des c_{1U} - (oben), v_{1U} - (Mitte) und v_{2U} -Bandes (unten) zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$ (links) und $t = 0.45\text{ps}$ (rechts) für den GaAs-Quantenfilm. Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert.

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$:

Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$

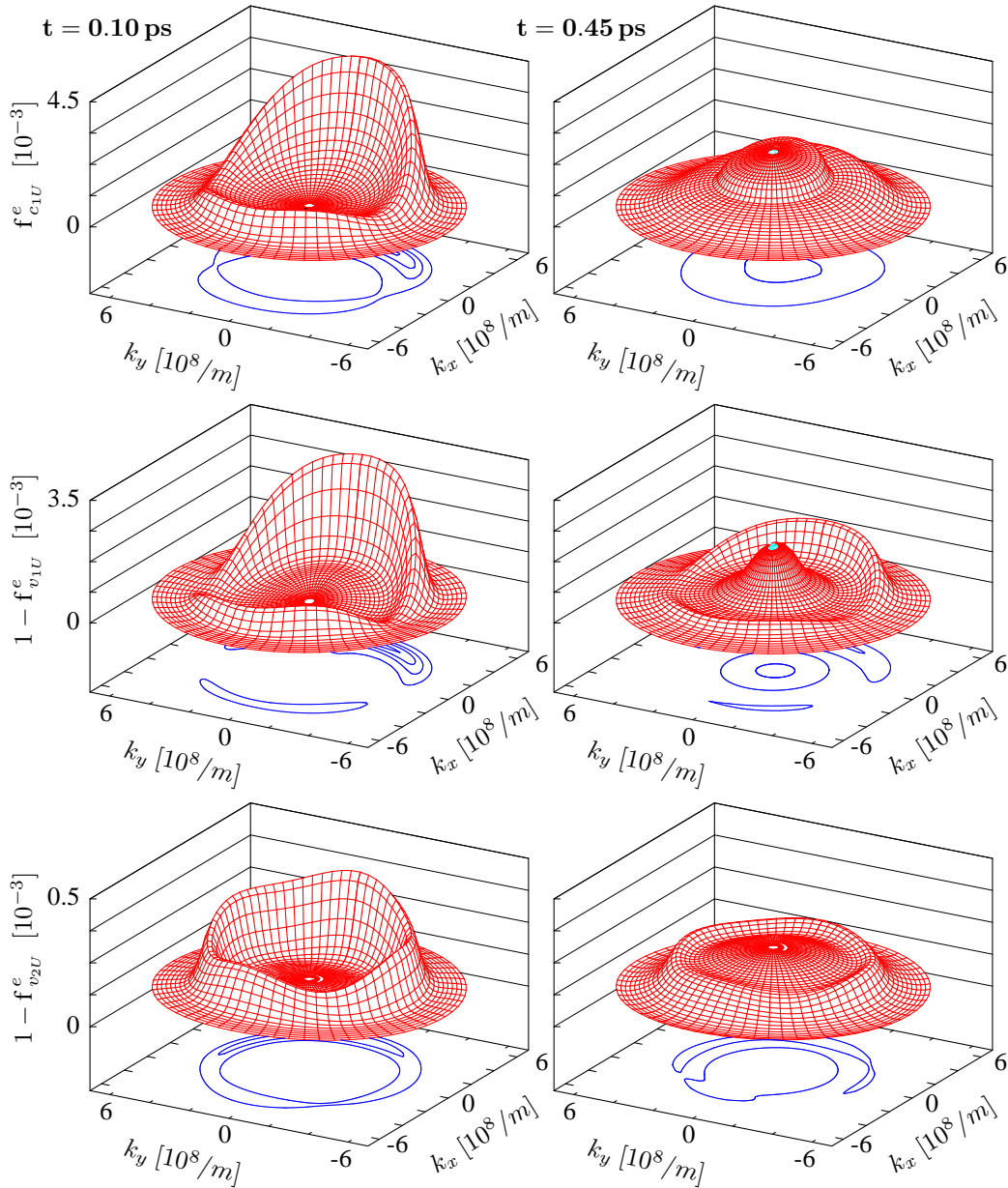


Abbildung 2.36: Besetzungen des c_{1U} - (oben), v_{1U} - (Mitte) und v_{2U} -Bandes (unten) zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ ps}$ (links) und $t = 0.45\text{ ps}$ (rechts) für den $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm. Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert.

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$:

Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$

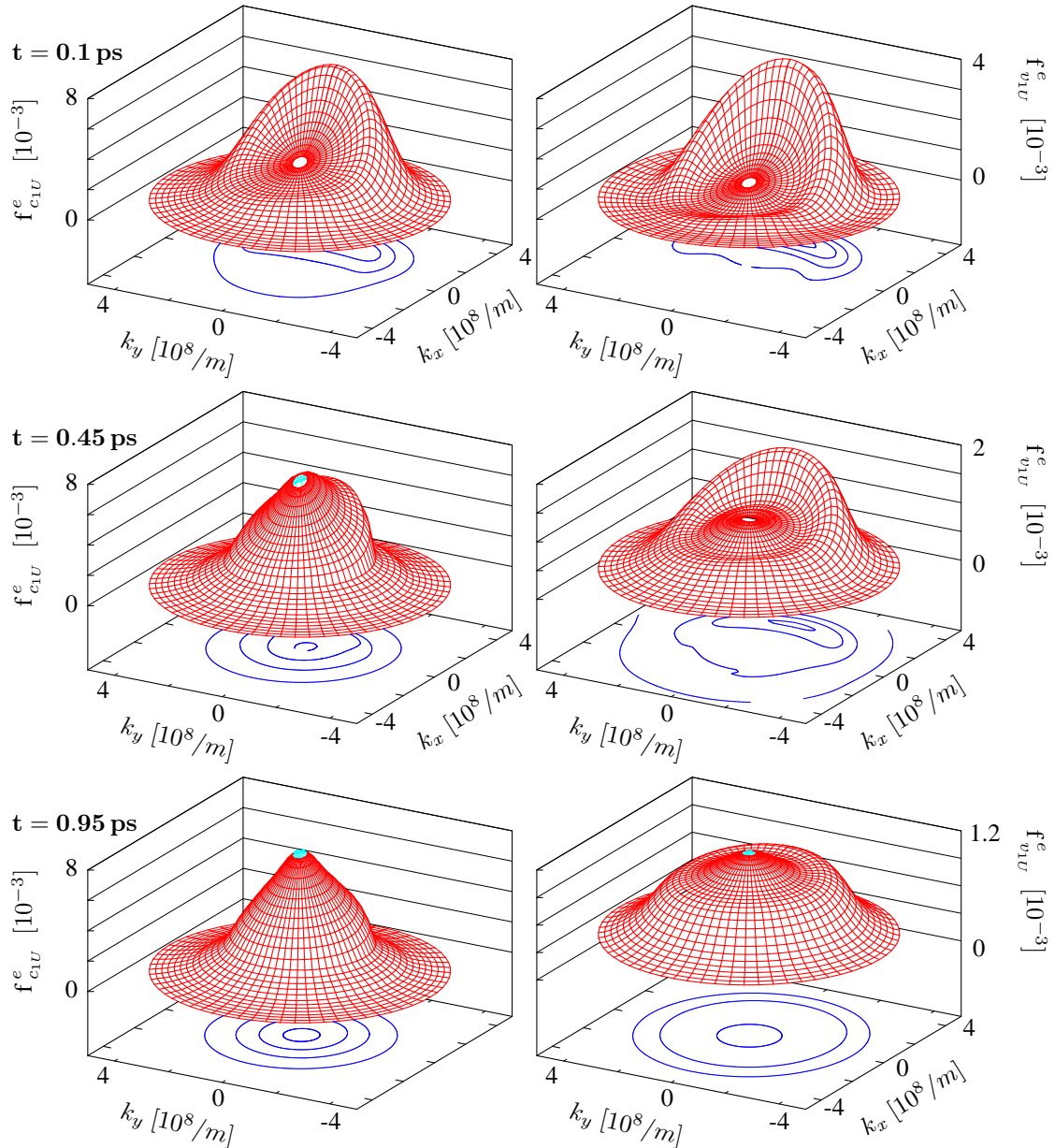


Abbildung 2.37: Besetzungen des c_{1U} - (links) und v_{1U} -Bandes (rechts) zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ ps}$ (oben), $t = 0.45\text{ ps}$ (Mitte) und $t = 0.95\text{ ps}$ (unten) für den $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm. Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert.

2.5.7 Numerische Ergebnisse in Markov-Näherung

$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ mit Markov-Näherung:

Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$

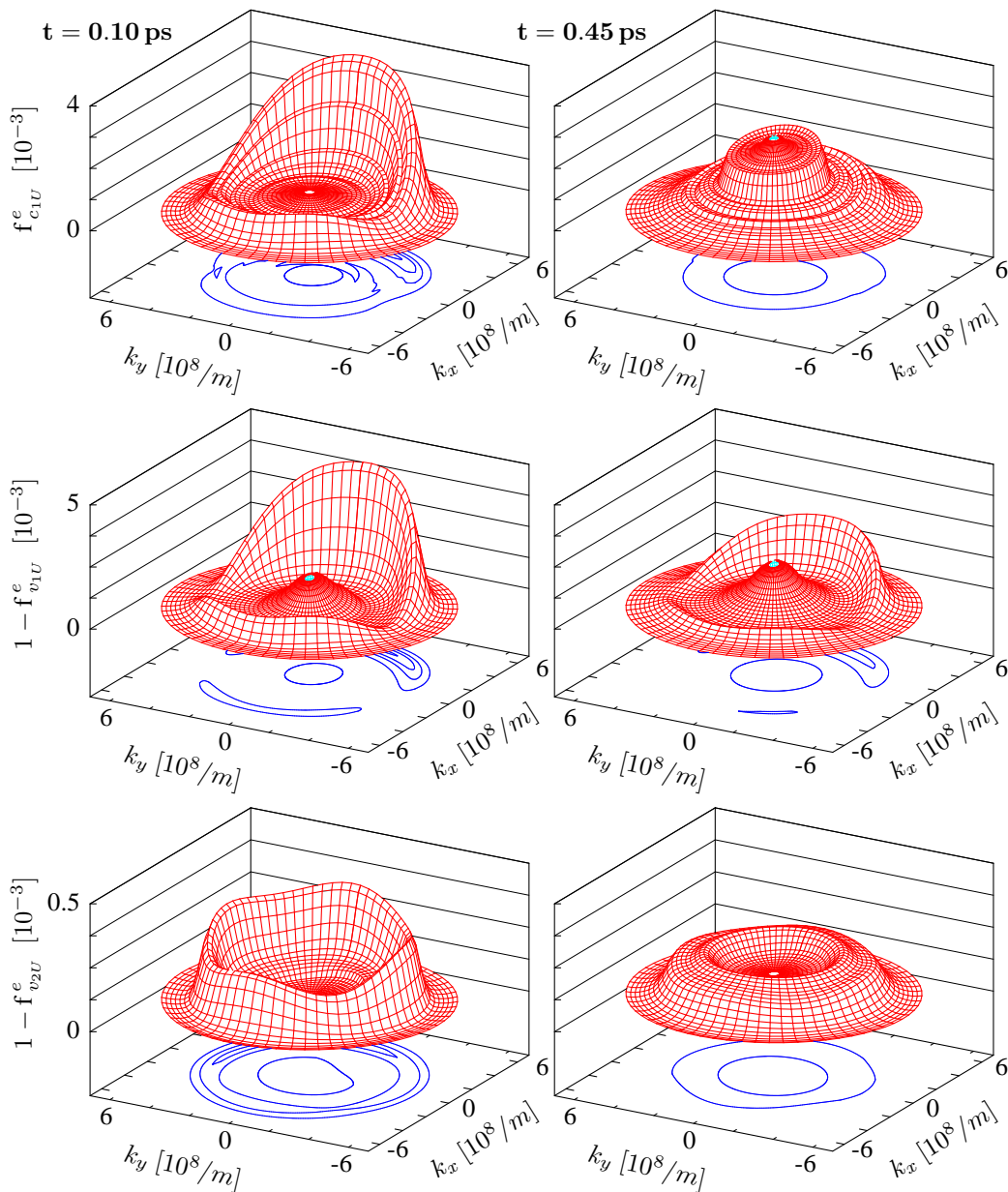


Abbildung 2.38: Interband-Kohärenzen der c_{1U} - (oben), v_{1U} - (Mitte) und v_{2U} -Bandes (unten) zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$ (links) und $t = 0.45\text{ps}$ (rechts) für den $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ -Quantenfilm. Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ und $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert. Die Parameter entsprechen denen aus Abbildung 2.36, wobei bei der Simulation die Markov-Näherung verwendet worden ist.

Die bisher gezeigten numerischen Ergebnisse beinhalten Gedächtniseffekte, da der Integral-Operator \hat{I}_{Ω}^{η} aus Definition (2.104)

$$x(t) = i \hat{I}_{\Omega}^{\eta} y(t) := i \int_{-\infty}^t dx e^{i(\Omega-\eta)(t-x)} y(x) \quad (2.129)$$

bei der Berechnung der Elektron-Phonon-Streuterme explizit für jeden Zeitpunkt gelöst wird. Hierbei steht $x(t)$ für eine beliebige Elektron-Phonon-Kohärenz aus Abschnitt 2.4.3 und $y(t)$ ist eine Funktion, die von den Interband-Polarisationen sowie Besetzungen der Valenz- und Leitungsband-Elektronen abhängt. Die Elektron-Phonon-Kohärenzen wiederum führen zur Relaxation der Besetzungen und zur Dephasierung der Polarisationen. Aufgrund von Gedächtniseffekten werden diese Prozesse nicht nur durch die aktuellen Polarisationen und Besetzungen bestimmt, sondern auch durch alle zu früheren Zeitpunkten vorhandenen. Durch das Dephasieren η der Elektron-Phonon-Kohärenzen nimmt jedoch der Einfluss der "alten" Kohärenzen mit der Zeit exponentiell ab. Je größer η gewählt wird, desto kleiner wird das Zeitintervall, in dem die Kohärenzen merklich zur aktuellen Dynamik beitragen.

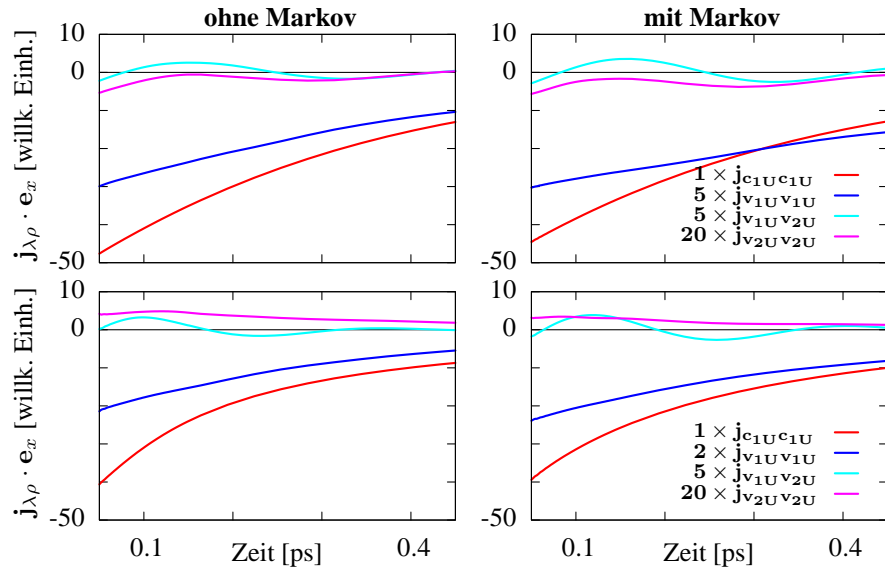


Abbildung 2.39: x -Komponente der Intradband-Ströme des c_{1U} - (rot), v_{1U} - (blau) und v_{2U} -Bandes (lila) sowie des Intervallenzband-Stroms (türkis) für einen $Ga_{90}In_{10}As$ -Quantenfilm. Die Bilder auf der linken Seite enthalten Gedächtniseffekte, die auf der rechten Seite wurden in Markov-Näherung berechnet. Die Anregung erfolgt in Spinstrom-Konfiguration mit $2\hbar\omega = E_G + 150\text{meV}$ (oben) bzw. $2\hbar\omega = E_G + 50\text{meV}$ (unten) bei einer Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der ω -Laserpuls ist damit linear in x -Richtung, der 2ω -Laserpuls ist senkrecht dazu linear in y -Richtung polarisiert. Die Ströme entsprechen Spin- bzw. Entartungsströme. Die Skalierung der Ströme sollte beachtet werden..

Wählt man hingegen die Markov-Näherung wird die Dynamik nur von den aktuellen Inter- und Intradband-Kohärenzen bestimmt:

$$x(t) = i \int_{-\infty}^t dx e^{i(\Omega-\eta)(t-x)} y(x) \simeq \frac{-y(t)}{\Omega + i\eta} + O((i\Omega - \eta)^{-2}) \quad (2.130)$$

Die Streudynamik wird dadurch instantan. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie sich die Verwendung der Markov-Näherung auf die berechneten Verteilungen auswirkt. Dafür werden exemplarisch Simulationsergebnisse zu dem Parametersatz gezeigt, der schon in Abbildung 2.36 verwendet worden ist. Dies entspricht einer Anregung in Spinstrom-Konfiguration ($\mathbf{A}_\omega \perp \mathbf{A}_{2\omega}$) 150meV oberhalb der Bandlücke mit Phase $\phi_{2\omega} = \pi/2$. Der einzige Unterschied besteht in der Verwendung der Markov-Näherung. Vergleicht man die Markov-Ergebnisse aus Abbildung 2.38 mit den Rechnungen aus Abbildung 2.36, zeigt sich, dass die zu einander gehörenden Verteilungen eine vergleichbare Form haben. Im Detail gibt es dennoch einige Unterschiede. Zum Zeitpunkt $t = 0.1\text{ps}$ ist der Maximalwert der Markov- c_{1U} -Verteilung kleiner und der Maximalwert der Markov- v_{1U} -Verteilung größer als der Wert in der Rechnung mit Gedächtniseffekten. Zudem setzt die Relaxation in der Markov-Näherung wesentlich schneller ein. Dies beobachtet man insbesondere in der v_{1U} -Verteilung, die in Markov-Näherung schon bei $t = 0.1\text{ps}$ in der Mitte ein deutliches Maximum aufweist, das durch die Relaxation der optisch angeregten Elektronen um eine LO-Phonon-Energie aufgebaut wird. Der Streuprozess muss also schon während der optischen Anregung begonnen haben. Die Rechnung mit Gedächtniseffekten weist hingegen erst nach der optischen Anregung eine deutliche Relaxationsdynamik auf, d.h. die für die Streuung relevanten Größen müssen sich erst aufbauen. Zudem sind die mit der Markov-Näherung berechneten Verteilungen wesentlich kantiger. Für glattere Verteilungen müsste wohl die $k_{||}$ -Auflösung verfeinert und/oder die Dephasierung η vergrößert werden.

Vergleicht man die Intervallenzband- und Intraband-Ströme für Rechnungen mit und ohne Gedächtniseffekt aus Abbildung 2.39, bekommt man auf den ersten Blick in beiden Situationen qualitativ ähnliche Ergebnisse. Jedoch gibt es auch hier wiederum Unterschiede im Detail. Dies äußert sich insbesondere in den für das c_{1U} - und v_{1U} -Band bestimmten Zerfallszeiten. Hierbei liefert die Markov-Näherung insbesondere für das v_{1U} -Valenzband stark abweichende Werte. Die für die Leitungsbandströme bestimmten Werte sind hingegen recht akzeptabel. Es könnte sein, dass sich die Abweichungen durch eine Verfeinerung der $k_{||}$ -Auflösung reduzieren lassen. Hier könnte die Verwendung des Polargitters im Vergleich zu einem kartesischen Gitter für die Markov-Näherung Nachteile bringen. Das Polargitter passt zwar aufgrund der Phasen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen hervorragend zu den Matrixelementen, jedoch treten, wenn $k_{||}$ mit N_k Punkten diskretisiert wird, nur N_k verschiedene Energien pro Band auf, da die Bandstruktur in paraxialer Näherung rotationssymmetrisch ist. Für ein zu kleines η und eine zu schlechte Auflösung sollte der Energienenner der Markov-Näherung 2.130 Probleme bereiten. Dies könnte auch eine Ursache für die kantigen Verteilungen in Abbildung 2.38 sein. Damit sollte klar geworden sein, dass die Markov-Näherung zwar jeglichen phänomenologischen Relaxationsmodellen überlegen ist, die hier gezeigte Anwendung verdeutlicht jedoch, dass eine Berücksichtigung von Gedächtniseffekten für die Streuterme der zweiten Born'schen Näherung insbesondere für die Valenzbänder qualitativ bessere Ergebnisse liefert. Gerade für kurze Zeiten nach der Anregung vernachlässigt die Markov-Näherung, dass sich die Streuung nach der optischen Erzeugung der Nicht-Gleichgewichtskohärenzen erst aufbauen muss. Zudem beinhaltet die Markov-Näherung immer eine gewisse Unsicherheit bei off-resonanter Anregung, da bei der Herleitung explizit langsam veränderliche Kohärenzen vorausgesetzt worden sind. Dies sollte jedoch für die zur optischen Erzeugung von kohärenten Strömen verwendeten Anregungsbedingungen ($\omega \simeq E_G/2!$) zumindest während der Anregung nicht gewährleistet sein. Wie schon mehrmals erwähnt wurde, beruht der Mechanismus auf der Interferenz von Ein- und Zwei-Photon-Übergängen. Damit sind selbst die Besetzungen während der optischen Anregung alles andere als langsam veränderlich, was sich z.B. in anfangs

Zerfallszeiten mit und ohne Markov-Näherung:

Band	Markov	$2\hbar\omega - E_G$	τ_S in $[0.05 ps, 0.2 ps]$	τ_S in $[0.4 ps, 1.0 ps]$
c_{1U}	ohne	$150 meV$	$328 fs$	$316 fs$
c_{1U}	mit	$150 meV$	$333 fs$	$331 fs$
c_{1U}	ohne	$50 meV$	$191 fs$	$465 fs$
c_{1U}	mit	$50 meV$	$239 fs$	$406 fs$
v_{1U}	ohne	$150 meV$	$428 fs$	$386 fs$
v_{1U}	mit	$150 meV$	$685 fs$	$617 fs$
v_{1U}	ohne	$50 meV$	$307 fs$	$325 fs$
v_{1U}	mit	$50 meV$	$361 fs$	$450 fs$

Tabelle 2.6: Zerfallszeiten der Intrabandströme des c_{1U} - und des v_{1U} -Bandes aus Abbildung 2.39.

stark oszillierenden Leitungsbandströmen äußert (vgl. Abbildung 2.18–2.21). Da auch der numerische Zusatzaufwand für die Berücksichtigung von Gedächtniseffekten gegenüber der Markov-Näherung mit einem Faktor von ca. 1.5 relativ gering ausfällt, spricht nur wenig für eine Verwendung dieser Approximation.

2.6 Kurzes Resümee

Abschließend sollen noch kurz die Ergebnisse dieses Kapitels zusammengefasst und mögliche zukünftige Ziele und Anwendungen diskutiert werden. Zunächst wurde in Abschnitt 2.2 die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie eingeführt, mit deren Hilfe eine realistische Bandstruktur und realistische Matrixelemente berechnet werden können. Auf den ersten Blick scheint dies nichts Neues zu sein. Solche Bandstruktur-Rechnungen werden für Halbleiter schließlich schon seit einigen Jahren durchgeführt [24, 20]. Das Entscheidende an der hier gezeigten Auswertung ist jedoch, dass die Symmetrie-Eigenschaften des Hamilton-Operators ausführlich diskutiert, dabei das konkrete Aussehen von geeigneten, symmetrisierten Lösungsfunktionen bestimmt und klare Lösungsstrategien aufgezeigt werden. Dabei ist zu beachten, dass nur die hier entwickelten, symmetrisierten Wellenfunktionen ein Aufstellen von Auswahlregeln für die Matrixelemente ermöglichen. Bei willkürlich gewählten Lösungen würde sich der numerische Aufwand um einiges erhöhen. Zudem wird bei vielen Anwendungen die Winkelabhängigkeit der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen häufig ignoriert. Die hier entwickelten Lösungsfunktionen beinhalten die volle Phaseninformation, die unbedingt für das hier zu lösende Problem benötigt werden. Schließlich sollen Interferenzphänomene untersucht werden. Zudem wird ausführlich diskutiert, wie sich die für die Heisenberg-Gleichungen benötigten Licht-Materie-, Coulomb- und Elektron-Phonon-Matrixelemente im Rahmen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie berechnen lassen. Hierbei wurde wiederum Wert darauf gelegt, dass alle Matrixelemente die vollen Informationen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Wellenfunktionen beinhalten und nicht, wie z.B. in Referenz [44] bei der Auswertung der Coulomb-Wechselwirkung verwendet, durch effektive Wellenfunktionen ersetzt werden. Die berechneten Matrixelemente und hergeleiteten Heisenberg-Gleichungen sollten also der im Rahmen der hier verwendeten $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie bestmöglichen Genauigkeit entsprechen, sofern die Basisfunktionen des Volumenhalbleiters nicht explizit bekannt sind.

Bei der Herleitung der Heisenberg-Gleichungen wurde durch Berücksichtigung der Wechselwirkung mit LO-Phononen ein Relaxationsmechanismus eingeführt, der das Abklingen der Ströme auf einer mikroskopischen Basis beschreiben kann. In der gesamten theoretischen Herleitung wird bis auf das Dephasieren η der Elektron-Phonon-Kohärenzen kein phänomenologischer Parameter verwendet. Alle anderen verwendeten Konstanten stammen aus Messungen [144, 86]. Zum Dephasieren η ist noch zu bemerken, dass dadurch Streu- und Dephasierungsprozesse jenseits der zweiten Born'schen Näherung berücksichtigt werden. Der Einfluss dieser Konstante ist bei Weitem nicht so stark, wie der einer phänomenologischen T_2 -Zeit, die häufig für eine einfache Beschreibung der Dephasierung von Interband-Polarisationen verwendet wird. Die gezeigten Ergebnisse sollten somit charakteristisch für das Material und experimentell reproduzierbar sein, sofern die Streuung an LO-Phononen der dominante Relaxationsmechanismus ist.

Die verwendete Theorie verbessert einige der bisher verwendeten theoretischen Modelle. Zum einen wird eine vollständig mikroskopische Theorie verwendet, die zudem auch alle dynamischen Prozesse beinhaltet und nicht nur auf der Auswertung von Übergangsmatrixelementen nach Fermi's Goldener Regel beruht (vgl. z.B. [2, 99]). Da kein störungstheoretischer Ansatz für die Licht-Materie-Wechselwirkung verwendet worden ist, beschränkt sich die Untersuchung nicht nur auf die Beiträge niedrigster Ordnung. Zudem wird anstelle eines idealen ein- oder zweidimensionalen Halbleiter-Modells, wie es in den Referenzen [30, 29] verwendet wird, ein realistisches Halbleiter-Modell auf Basis der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie gewählt. Dabei wurde mit der Streuung an LO-Phononen ein mikroskopischer Relaxationsmechanismus und keine phänomenologischen Modelle wie z.B. in Referenz [88] verwendet. Der einzige Wermutstropfen

besteht darin, dass bisher noch keine Ladungsträger-Ladungsträger-Streuung berücksichtigt worden ist. Dies sollte aber in Zukunft durch eine Verwendung von Monte-Carlo-Techniken ermöglicht werden.

Erste numerische Ergebnisse demonstrieren, dass sich das verwendete Modell für systematische Parameterstudien bezüglich der Materialzusammensetzung eignet. Dies wurde exemplarisch an den beiden Modellsystemen mit $GaAs$ - und $Ga_{0,9}In_{0,1}As$ -Quantenfilm veranschaulicht. Dabei konnte gezeigt werden, dass eine Verwendung von rotationssymmetrischen optischen Matrixelementen anstelle der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrixelemente für die Spinstrom-Konfiguration wichtige Beiträge, nämlich die "ungewöhnlichen" Ladungsströme, vollkommen ignorieren würde. Zudem konnte mit Hilfe des einfachen Entwicklungsmodells aus Abschnitt 2.5.5 die Herkunft dieser Ströme geklärt und einzelne Details in der Form der angeregten Elektron-Verteilungen reproduziert werden. Ferner lässt sich mit dem verwendeten Modell die Stärke der verschiedenen Inter- und Intra-Band-Ströme vorhersagen und die LO-Phonon-Relaxationszeiten bestimmen. Durch die Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung konnten auch die in Referenz [12] für Volumenhalbleiter vorhergesagten Phasenverschiebungen der Ströme beobachtet werden, die bei Anregung an der Bandkante besonders stark ausfallen. Insgesamt zeigen die zusammengestellten Beispiele einige vielversprechende Einsatzmöglichkeiten, aber nur einen kleinen Ausschnitt aller Möglichkeiten repräsentieren können. Die vorliegende Arbeit liefert dabei den Einstieg in viele weitere Anwendungsbereiche. Dies könnten sowohl Untersuchungen in anderen Materialsystemen sein, aber auch grundsätzliche Untersuchungen zu beispielsweise exzitonischen Effekten. Die entwickelte Theorie sollte sich leicht auch auf Systeme erweitern lassen, in denen nicht nur ein Leitungsband sondern zwei oder mehr Leitungsbänder relevant sind. Dabei würde sich eine Untersuchung von $GaAs_xSb_{1-x}/GaAs$ -Quantenfilmen anbieten, die für die Leitungsbänder ein breiteres Confinement-Potential als für die Valenzbänder aufweisen können. Dies beruht auf der Tatsache, dass in diesen Strukturen der Band-Offset gegenüber dem Barrierenmaterial in der $GaAs_xSb_{1-x}$ -Schicht je nach Materialzusammensetzung komplett auf die Valenzbänder übergehen kann [68]. Mit der Potentialbreite lassen sich die energetischen Abstände der Leitungsbänder beliebig reduzieren. Eine Studie zu Spinströmen in solchen Strukturen wäre sicherlich hoch interessant. Zudem könnte auch an eine Untersuchung der exzitonischen Einflüsse auf die Ströme gedacht oder Anregungen mit zirkular polarisierten Laserpulsen durchgeführt werden. Des Weiteren sollten die hier gewonnenen Erfahrungen auch den Einstieg in komplexere Situationen wie die Untersuchung von Oberflächenströmen erleichtern.

Mit der in dieser Arbeit beschriebenen Theorie steht die Tür zu weitgehenden Untersuchungen für verschiedenste Materialsysteme offen. Dies könnte insbesondere bei der Erklärung und Auswertung von experimentellen Ergebnissen interessant werden. Die nächsten Monate und Jahre werden sicherlich noch einige interessante Entwicklungen liefern.

Literaturverzeichnis

- [1] *Special issue of JOSAB on Nonlinear optics of photonic crystals*, 19(9):2046–2296, 2002. 56
- [2] ATANASOV R, HACHÉ A, HUGHES JLP, SIPE JE und VAN DRIEL HM: *Coherent Control of Photocurrent Generation in Bulk Semiconductors*. Phys. Rev. Letters, 76:1703, 1996. 4, 79, 80, 113, 161
- [3] ATKINSON KE: *A survey of numerical methods for the solution of Fredholm integral equations of the second kind*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1976. 16
- [4] BALSLEV I und STAHL A: *Electrodynamics of the Semiconductor Band Edge*, Band 110 der Reihe *Springer Tracts in Modern Physics*. Springer Verlag, 1987. 28
- [5] BANYAI L, GALBRAITH I, ELL C und HAUG H: *Excitons and biexcitons in semiconductor quantum wires*. Physical Review B, 36:6099, 1987. 39, 51
- [6] BANYAI L und KOCH SW: *Semiconductor Quantum Dots*. World Scientific, Singapore, 1993. 14
- [7] BAYINDIR M, OZBAY E, TEMELKURAN B, SIGALAS MM, SOUKOULIS CM, BISWAS R und HO KM: *Guiding, bending, and splitting of electromagnetic waves in highly confined photonic crystal waveguides*. Physical Review B, 63:081107, 2001. 3, 7
- [8] BENDICKSON JM, DOWLING JP und SCALORA M: *Analytic expressions for the electromagnetic mode density in finite, one-dimensional, photonic band-gap structures*. Physical Review E, 53:4107–4121, 1996. 56
- [9] BERENGER JP: *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*. Journal of Computational Physics, 114:185–200, 1994. 19
- [10] BERENGER JP: *Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*. Journal of Computational Physics, 127:363–379, 1996. 19
- [11] BHAT RDR und SIPE JE: *Optically Injected Spin Currents in Semiconductors*. Phys. Rev. Letters, 85:5432, 2000. 4, 79, 113
- [12] BHAT RDR und SIPE JE: *Excitonic effects on the two-color coherent control of interband transitions in bulk semiconductors*. Physical Review B, 72:075205, 2005. 80, 139, 162
- [13] BLOUNT EI: *Formalism of band theory*. Solid State Physics-Advances in Research and Applications, 13:305, 1962. 98

- [14] BORODITSKY M, KRAUSS TF, COCCIOLI R, VRIJEN R, BHAT R und YABLONOVITCH E: *Light extraction from optically pumped light-emitting diode by thin-slab photonic crystals*. Applied Physics Letters, 75:1036–1038, 1999. 35, 49, 56
- [15] BRABEC T und KRAUSZ F. Reviews of Modern Physics, 72:545, 2000. 79, 113
- [16] BRINKMANN D: *Kohärente Dynamik wechselwirkender Teilchen in ungeordneten Halbleitern - Eine Modell-Studie*. Doktorarbeit, Philipps Universität Marburg, 1998. 32
- [17] BROIDO DA und SHAM LJ: *Effective Masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions*. Physical Review B, 31(2):888–892, 1985. 91
- [18] BROWN ER, PARKER CD und YABLONOVITCH E: *Radiation Properties of a planar antenna on a photonic crystal substrate*. Journal of the Optical Society of America B, 10:404–407, 1993. 3, 7
- [19] BRUMER P und SHAPIRO M. Chem. Phys. Lett., 126:541, 1986. 79, 113
- [20] BURT MG: *The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures*. J. Phys. Cond. Matter, 4:6651–6690, 2001. 82, 84, 85, 98, 161
- [21] BUSCH K, LÖLKES S, WEHRSPHORN RB und FÖLL H (Herausgeber): *Photonic Crystals - Advances in Design, Fabrication, and Characterization*. Wiley-VCH, Berlin, 2004. 7, 35, 56
- [22] CENTINI M, SIBILIA C, SCALORA M, D'AGUANNO G, BERTOLOTTI M, BLOEMER MJ, BOWDEN CM und NEFEDOV I: *Dispersive properties of finite, one-dimensional photonic band gap structures: Applications to nonlinear quadratic interactions*. Physical Review E, 60:4891–4898, 1999. 56
- [23] CHELNOKOV A, WANG K, ROWSON S, GAROCHE P und LOURTIOZ JM: *Near-infrared yablonovite-like photonic crystal by focused-ion-beam etching of macroporous silicon*. Applied Physics Letters, 77:2943–2945, 2000. 7
- [24] CHOW WW und KOCH SW: *Semiconductor-Laser-Fundamentals*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1999. 26, 56, 89, 90, 91, 115, 120, 161
- [25] COHEN-TANNOUJDI C, DUPONT-ROC J und GRYNBERG G: *Photons and Atoms*. Wiley, New York, 3. Auflage, 1989. 10, 11
- [26] DE DOOD MJA, GRALAK B, POLMAN A und FLEMING JG: *Superstructure and finite-size effects in a Si photonic woodpile crystal*. Physical Review B, 67:035322, 2003. 7
- [27] DICKE RH: *Coherence in Spontaneous Radiation Processes*. Physical Review, 93:99, 1996. 35
- [28] DOWLING JP, SCALORA M, BLOEMER MJ und BOWDEN CM: *The photonic band edge laser: A new approach to gain enhancement*. J. App. Phys, 75:1896–1899, 1994. 56

- [29] DUC HT, VU QT, MEIER T, HAUG H und KOCH SW: *Temporal decay of coherently optically injected charge and spin currents due to carrier LO-phonon and carrier-carrier scattering*. wird zur Veröffentlichung in Physical Review B eingereicht. 4, 80, 81, 98, 112, 133, 161
- [30] DUC HT, MEIER T und KOCH SW: *Microscopic Analysis of the Coherent Optical Generation and the Decay of Charge and Spin Currents in Semiconductor Heterostructures*. Phys. Rev. Letters, 94:027401, 2005. 4, 80, 81, 98, 112, 133, 161
- [31] DUMEIGE Y, SAGNES I, MONNIER P, VIDAKOVIC P, ABRAM I, MERIADEC C und LEVENSON A: *Phase-Matched Frequency Doubling at Photonic Band Edges: Efficiency Scaling as the Fifth Power of the Length*. Phys. Rev. Letters, 89:043901–1–4, 2002. 56
- [32] DUPONT E, CORKUM PB, LIU HC, BUCHANAN M und WASILEWSKI ZR: *Phase-Controlled Currents in Semiconductors*. Phys. Rev. Letters, 74:3596, 1995. 79
- [33] EICHMANN R: *Lineare Eigenschaften dielektrisch strukturierter Halbleiter*. Doktorarbeit, Philipps Universität Marburg, 2002. 14
- [34] EICHMANN R, PASENOW B, MEIER T, STROUCKEN T, THOMAS P und KOCH SW: *Semiconductor absorption in photonic crystals*. Applied Physics Letters, 82(3):355–357, 2003. 3, 7, 35, 49
- [35] EICHMANN R, PASENOW B, MEIER T, STROUCKEN T, THOMAS P und KOCH SW: *Semiconductor excitons in photonic crystals*. Physica Status Solidi B, 238(3):439–442, 2003. 3, 7, 35, 49, 51
- [36] ELL C, BLANK R, BENNER S und HAUG H: *Simplified calculations of the optical spectra of two- and three-dimensional laser-excited semiconductors*. Journal of the Optical Society of America B, 6:2006–2012, 1989. Bei der Berechnung der abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung verwenden wir $C = 4$. 58
- [37] ENGQUIST B und MADJA A: *Absorbing boundary condition for the numerical simulation of waves*. Mathematics of Computation, 31:629–651, 1977. 19
- [38] ERCHAK AA, RIPIN DJ, FAN S, RAKICH P, JOANNOPOULOS JD, IPPEN EP, PETRICH GS und KOLODZIEJSKI LA: *Enhanced coupling to vertical radiation using a two-dimensional photonic crystal in a semiconductor light-emitting diode*. Applied Physics Letters, 78:563–565, 2001. 35, 49, 56
- [39] FELDMANN J, MEIER T, VON PLESSSEN G, KOCH M, GÖBEL EO, THOMAS P, BACHER G, HARTMANN C, SCHWEIZER H, SCHÄFER W und NICKEL H: *Coherent dynamics of excitonic wave packets*. Phys. Rev. Letters, 70:3027, 1993. 36
- [40] FOREMAN BA: *Strong linear- k valence band mixing at semiconductor heterojunctions*. Phys. Rev. Letters, 80:2641, 2001. 86
- [41] FORTIER TM, ROSS PA, JONES DJ, CUNDIFF ST, BHAT RDR und SIPE JE: *Carrier-Envelope Phase-Controlled Quantum Interference of Injected Photocurrents in Semiconductors*. Phys. Rev. Letters, 92:147403, 2004. 79, 80

- [42] FRICKE J: *Transport equations including many-particle correlations for an arbitrary quantum system: A general formalism*. Annals of Physics, 252:479–498, 1996. 28
- [43] GAILLOT DD, YAMASHITA T und SUMMERS CJ: *Photonic band gaps in highly conformal inverse-opal based photonic crystals*. Physical Review B, 72:205109, 2005. 7
- [44] GIRNDT A, JAHNKE F, KNORR A und KOCH SW: *Multi-Band Bloch Equations and Gain Spectra of Highly Excited II-VI Semiconductor Quantum Wells*. Physica Status Solidi B, 202:725, 1997. 102, 115, 161
- [45] GÖBEL EO, LEO K, DAMEN TC, SHAH J, SCHMITT-RINK S, SCHÄFER W, MÜLLER JF und KÖHLER K: *Quantum beats of excitons in quantum wells*. Phys. Rev. Letters, 64:1801, 1990. 36
- [46] GORDON RJ und RICE SA. Ann. Rev. Phys. Chem., 48:601, 1997. 79, 113
- [47] GOURLEY PL, WENDT JR, VAWTER GA, BRENNAN TM und HAMMONS BE: *Optical properties of two-dimensional photonic lattice fabricated as honeycomb nanostructures in compound semiconductors*. Applied Physics Letters, 64:687–689, 1993. 7
- [48] GROSSMANN S: *Funktionalanalysis*. Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt a.M., 1970. 12
- [49] GRÜNING U, LEHMANN V, OTTOW S und BUSCH K: *Macroporous silicon with a complete two-dimensional photonic band gap centered at 5 μm* . Applied Physics Letters, 68:747–749, 1996. 7
- [50] HACHÉ A, KOSTOULAS Y, ATANASOV R, HUGHES JLP, SIPE JE und VAN DRIEL HM: *Observation of Coherently Controlled Photocurrent in Unbiased, Bulk GaAs*. Phys. Rev. Letters, 78:306, 1997. 4, 79, 113, 117
- [51] HADER J, KOCH SW und MOLONEY JV: *Microscopic Theory of Gain and Spontaneous Emission in GaInNAs Laser Material*. Solid State Electron., 47:513 – 521, 2003. 28
- [52] HADLEY MA, WILSON GC, LAU KY und SMITH JS: *High single-transverse-mode output from external-cavity surface-emitting laser diodes*. Applied Physics Letters, 63:1607, 1993. 75
- [53] HAKEN H: *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*. Teubner Verlag, Stuttgart, 1973. 103
- [54] HAUG H und JAUHO AP: *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Springer, Berlin, 1998. 80
- [55] HAUG H und KOCH SW: *Semiconductor laser theory with many-body effects*. Physical Review A, 39:1887–1898, 1989. 58
- [56] HAUG H und KOCH SW: *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors*. World Scientific, Singapore, 3. Auflage, 2001. 10, 25, 28, 32, 46, 56, 58, 80, 81, 104, 111, 112, 115, 118

- [57] HEREK JL, WOHLLEBEN W, COGDELL RJ, ZEIDLER D und MOTZKUS M. *Nature*, 417:533, 2002. 79, 113
- [58] HO KM, CHAN CT und SOUKOULIS CM: *Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures*. *Phys. Rev. Letters*, 65:3152–3155, 1990. 7
- [59] HOYER W, KIRA M und KOCH SW: *Cluster Expansion in Semiconductor Quantum Optics*. In: K, MORAWETZ (Herausgeber): *Nonequilibrium Physics at Short Time Scales*, Seiten 309–335. Springer Verlag, Berlin, 2004. 28
- [60] HÜBNER J, RÜHLE WW, KLUDE M, HOMMEL D, BHAT RDR, SIPE JE und VAN DRIEL HM: *Direct Observation of Optically Injected Spin-Polarized Currents in Semiconductors*. *Phys. Rev. Letters*, 90:216601, 2003. 4, 79, 80, 114
- [61] HWANG JK, RYU HY, SONG DS, HAN IY, SONG HW, PARK HG, LEE YH und JANG DH: *Room-temperature triangular-lattice two-dimensional photonic band gap lasers operating at 1.54 μm* . *Applied Physics Letters*, 76:2982–2984, 2000. 3, 7, 35, 49, 56
- [62] IMADA M, NODA S, CHUTINAN A, TOKUDA T, MURATA M und SADAHI G: *Coherent two-dimensional lasing action in surface-emitting laser with triangular-lattice photonic crystal structure*. *Applied Physics Letters*, 75:316–318, 1999. 3, 7, 35, 49, 56
- [63] JACKSON JD: *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons, 1998. 7, 9, 14
- [64] JOANNOPOULOS JD, MEADE RD und WINN JN: *Photonic Crystals: Molding the flow of light*. Princeton University Press, Princeton, 1995. 35, 56
- [65] JOHN S: *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*. *Phys. Rev. Letters*, 58:2486–2489, 1987. 3, 6, 35, 56
- [66] JOHN S und WANG J: *Quantum electrodynamics near a photonic band gap: Photon bound states and dressed atoms*. *Phys. Rev. Letters*, 64:2418, 1990. 35
- [67] JOHN S und QUANG T: *Spontaneous emission near the edge of a photonic band gap*. *Physical Review A*, 50:1764, 1994. 35
- [68] JOHNSON SR, GUO CZ, CHAPARRO S, SADOFYEV YG, WANG J, CAO Y, SAMAL N, XU J, YU SQ, DING D und ZHANG YH: *GaAsSb/GaAs band alignment evaluation for long-wave photonic applications*. *Journal of Crystal Growth*, 251:521–525, 2003. 162
- [69] KAINZ J, RÖSSLER U und WINKLER R: *Temperature dependence of Dyakonov-Perel spin relaxation in zinc-blende semiconductor quantum structures*. *Physical Review B*, 70:195322, 2004. 80
- [70] KIRA M, HOYER W, STROUCKEN T und KOCH SW: *Exciton Formation in Semiconductors and the Influence of a Photonic Environment*. *Phys. Rev. Letters*, 87:176401, 2001. 35
- [71] KNIGHT JC, BIRKS TA, RUSSELL PS und ATKIN DM: *All-silica single mode optical fiber with photonic crystal cladding*. *Optics Lett.*, 21:1547–1549, 1996. 3, 7

- [72] KOCH SW, MEIER T, JAHNKE F und THOMAS P: *Microscopic theory of optical dephasing in semiconductors*. Appl. Phys. A, 71:511, 2000. 45, 46
- [73] KOPP VI, FAN B, VITHANA HKM und GENACK AZ: *Low-threshold lasing at the edge of a photonic stop band in cholesteric liquid crystals*. Opt. Lett., 23:1707–1709, 1998. 56
- [74] KRÁL P und SIPE JE: *Quantum kinetic theory of two-beam current injection in bulk semiconductors*. Physical Review B, 61:5381, 2000. 80
- [75] KULIK LV, KULAKOVSKII VD, BAYER M, FORCHEL A, GIPPIUS NA und TIKHODEEV SG: *Dielectric enhancement of excitons in near-surface quantum wells*. Physical Review B, 54:2335–2338, 1996. 27, 35, 39
- [76] KWON SH, RYU HY, KIM GH, LEE YH und KIM SB: *Photonic bandedge lasers in two-dimensional square-lattice photonic crystal slabs*. Applied Physics Letters, 83:3870–3872, 2003. 49, 56
- [77] LABILLOY D, BENISTY H, WEISBUCH C, KRAUSS TF, DE LA RUE RM, BARDINAL V, HOUDRÉ R, OESTERLE U, CASSAGNE D und JOUANIN C: *Quantitative Measurement of Transmission, Reflection, and Diffraction of Two-Dimensional Photonic Band Gap Structures at Near-Infrared Wavelengths*. Phys. Rev. Letters, 79:4147–4150, 1997. 35, 49, 56
- [78] LEO K, SHAH J, GÖBEL EO, DAMEN TC, SCHMITT-RINK S, SCHÄFER W und KÖHLER K: *Coherent oscillations of a wave packet in a semiconductor double-quantum-well structure*. Phys. Rev. Letters, 66:201, 1990. 36
- [79] LIN SY und FLEMING JG: *A three-dimensional optical photonic crystal*. IEEE J. Lightwave Tech., 17:1944–1947, 1999. 7
- [80] LIN SY, FLEMING JG, HETHERINGTON DL, SMITH BK, BISWAS R, HO KM, SIGALAS MM, ZUBRZYCKI W, KURTZ SR und BU J: *A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths*. Nature, 394:251–253, 1998. 7
- [81] LINDBERG M und KOCH SW: *Effective Bloch equations for semiconductors*. Physical Review B, 38:3342–3350, 1988. 28, 80
- [82] LONČAR M, YOSHIE T, SCHERER A, GOGNA P und QUI Y: *Low-threshold photonic crystal laser*. Applied Physics Letters, 81:2680–2682, 2002. 49, 56
- [83] LOUDON R: *One-Dimensional Hydrogen Atom*. American Journal of Physics, 27:649, 1959. 39
- [84] LUTGEN S, ALBRECHT T, BRICK P, REILL W, LUFT J und SPÄTH W: *8-W high-efficiency continuous-wave semiconductor disk laser at 1000 nm*. Applied Physics Letters, 82:3620, 2003. 75
- [85] LUTTINGER JM und KOHN W: *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*. Physical Review, 97:869–883, 1955. 87

- [86] MADELUNG O: *Semiconductors. Basic Data*. Springer Verlag, Berlin, 2. Auflage, 2001. 118, 119, 161
- [87] MARTI DH: *Dynamics of multi-photon processes in semiconductor heterostuctures*. Doktorarbeit, Ecole Politechnique Federale de Lausanne, 2003. 81, 85, 87, 96, 115, 117
- [88] MARTI DH, DUPERTUIS MA und DEVEAUD B: *Dynamics of optical injection of charge and spin currents in quantum wells*. Physical Review B, 69:035335, 2004. 80, 81, 114, 115, 161
- [89] MARTI DH, DUPERTUIS MA und DEVEAUD B: *Optical injection of charge current in quantum wires: Oscillations induced by excitonic effects*. Physical Review B, 72:075357, 2005. 80
- [90] MEIER T, SIEH C, KOCH SW, LEE YS, NORRIS TB, JAHNKE F, KHITROVA G und GIBBS HM: *Nonlinear optical properties of semiconductor quantum wells inside microcavities*. In: K, VAHALA (Herausgeber): *Optical Microcavities*. World Scientific, Singapore, 2004. 80
- [91] MEIER T, DUC HT, VU QT, PASENOW B, HÜBNER J, CHATTERJEE S, RÜHLE WW, HAUG H und KOCH SW: *Ultrafast Dynamics of Optically-Induced Charge and Spin Currents in Semiconductors*. In: *Advances in Solid State Physics Vol. 46*. Springer Verlag, Berlin, 2006. Das Buch ist bisher noch nicht erschienen. 80, 98, 112
- [92] MEIER T und THOMAS P: *Echos in Festkörpern*. Physik Journal, Seiten 53–59, März 2003. 79
- [93] MEIER T, THOMAS P und KOCH SW: *Coherent Semiconductor Optics. From Basic Concepts to Nanostructure Applications*. Springer Verlag, Berlin, 2006. 26
- [94] MEIER T und KOCH SW: *Ultrafast Physical Processes in Semiconductors*. In: *special issue of Series "Semiconductors and Semimetals" Vol. 67*, Seiten 231–313. Academic Press, 2001. 28
- [95] MEIER T und KOCH SW: *Semiconductor Optics in Photonic Crystal Structures*. In: *Photonic Crystals - Advances in Design, Fabrication, and Characterization*, Kapitel 3, Seiten 43–62. Wiley-VCH, Berlin, 2004. 14, 27, 32, 35, 47
- [96] MEISEL DC, WEGENER M und BUSCH K: *Three-dimensional photonic crystals by holographic lithography using the umbrella configuration: Symmetries and complete photonic band gaps*. Physical Review B, 70:165104, 2004. 7
- [97] MEKIS A, CHEN JC, KURLAND I, FAN S, VILLENEUVE PR und JOANNOPOULOS JD: *High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides*. Phys. Rev. Letters, 77:3787–3790, 1996. 3, 7
- [98] MUR G: *Absorbing boundary condition for the finite difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations*. IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility, 23:377–382, 1981. 19

- [99] NAJMAIE A, BHAT RDR und SIPE JE: *All-optical injection and control of spin and electrical currents in quantum wells*. Physical Review B, 68:165348, 2003. 80, 132, 161
- [100] NODA S, CHUTINAN A und IMADA M: *Trapping and emission of photons by a single defect in a photonic bandgap structure*. Nature, 407(608), 2000. 35
- [101] NODA S, YOKOYAMA M, IMADA M, CHUTINAN A und MOCHIZUKI M: *Polarization mode control of two-dimensional photonic crystal laser by unit cell structure design*. Science, 293:1123–1125, 2001. 35, 49, 56
- [102] NOLTING W: *Grundkurs theoretische Physik. Band 5/2 : Quantenmechanik*. Springer Verlag, Berlin, 5. Auflage, 2003. 80
- [103] OVERHOF H und THOMAS P: *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors*, Band 114 der Reihe Springer Tracts in Modern Physics. Springer Verlag, Berlin, 1989. 26
- [104] PAINTER O, HUSAIN A, SCHERER A, O'BRIAN JD, KIM I und DAPKUS DP: *Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser*. Journal of Lightwave Technology, 17:2082, 1999. 49
- [105] PAINTER O, LEE RK, SCHERER A, YARIV A, O'BRIAN JD, DAPKUS DP und KIM I: *Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser*. Science, 284:1819–1821, 1999. 35, 49, 56
- [106] PASENOW B: *Mikroskopische Theorie exzitonischer Anregungen in photonischen Kristallstrukturen*. Diplomarbeit, Philipps Universität Marburg, 2003. 7, 14, 16, 26, 28, 29, 32, 38, 49
- [107] PASENOW B, REICHELT M, STROUCKEN T, MEIER T und KOCH SW: *Excitonic wave packet dynamics in semiconductor photonic-crystal structures*. Physical Review B, 71(195321), 2005. 3, 35, 51, 75
- [108] PASENOW B, REICHELT M, STROUCKEN T, MEIER T, KOCH SW, ZAKHARIAN AR und MOLONEY JV: *Enhanced light-matter interaction in semiconductor heterostructures embedded in one-dimensional photonic crystals*. Journal of the Optical Society of America B, 22(9):2039–2048, 2005. 4, 56, 75
- [109] PFALZ S, WINKLER R, NOWITZKI T, REUTER D, WIECK AD, HÄGELE D und OESTREICH M: *Optical orientation of electron spins in GaAs quantum wells*. Physical Review B, 71:165305, 2005. 80
- [110] PRESS WH, TEUKOLSKY SA, VETTERLING WT und FLANNERY BP: *Numerical Recipes in C++*. Cambridge University Press, 2002. 8, 16, 22
- [111] QUANG T, WOLDEYOHANNES M, JOHN S und AGARWAL GS: *Coherent Control of Spontaneous Emission near a Photonic Band Edge: A Single-Atom Optical Memory Device*. Phys. Rev. Letters, 79:5238, 1997. 35

- [112] REICHELT M: *Linear and nonlinear optical excitations in spatially-inhomogeneous semiconductor systems*. Doktorarbeit, Philipps Universität Marburg, 2005. 19
- [113] REICHELT M, PASENOW B, MEIER T, STROUCKEN T und KOCH SW: *Spatially inhomogeneous optical gain in semiconductor photonic-crystal structures*. *Physical Review B*, 71(035346), 2005. 3, 32, 47, 49
- [114] ROSS PA, LI X, PIPIS JA, FORTIER TM, CUNDIFF ST, BHAT RDR und SIPE JE: *Characterization of carrier-envelope phase-sensitive photocurrent injection in a semiconductor*. *Journal of the Optical Society of America B*, 22:362, 2005. 79, 80
- [115] RUMYANTSEV I, NAJMAIE A, BHAT RDR und SIPE JE: *Quantum kinetics of pure spin and charge currents*. In: *International Quantum Electronics Conference 2004, (IEEE, Piscataway, NJ, 2004)*, Seiten 486 – 487. 2004. 80
- [116] RUMYANTSEV I und SIPE JE: *Optical injection of ac spin currents in a semiconductor via a quantum interference between exciton states of different spatial symmetry*. *Physical Review B*, 73:201302, 2006. 80
- [117] RUSSELL P: *Photonic Crystal Fibers*. *Science*, 299:358–362, 2003. 3, 7
- [118] RYU HY, HWANG JK, SONG DS, HAN IY und LEE YH: *Effect of nonradiative recombination on light emitting properties of two-dimensional photonic crystal slab structures*. *Applied Physics Letters*, 78:1174–1176, 2001. 35, 49, 56
- [119] RYU HY, KIM SH, PARK HG und LEE YH: *Characteristics of single defect laser modes in a two-dimensional square lattice photonic crystal slab*. *Journal of Applied Physics*, 93:831, 2003. 49
- [120] SAKODA K: *Optical Properties of Photonic Crystals*, Band 80 der Reihe *Springer Series in Optical Sciences*. Springer Verlag, 2001. 56
- [121] SCALORA M, BLOEMER MJ, MANKA AS, DOWLING JP, BOWDEN CM, VISWANATHAN R und HAUS JW: *Pulsed second-harmonic generation in nonlinear, one-dimensional, periodic structures*. *Physical Review A*, 56:3166–3174, 1997. 56
- [122] SCHÄFER W. *Journal of the Optical Society of America B*, 13:1291, 1996. 80
- [123] SCHÄFER W und WEGENER M: *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*. Springer, Berlin, 2002. 28, 56, 80
- [124] SCHLICHENMAIER C: *Modeling of Optical Properties of Semiconductor Heterostructures*. Doktorarbeit, Philipps Universität Marburg, 2005. 26
- [125] SCHLICHENMAIER C, VARGA I, MEIER T, THOMAS P und KOCH SW: *Optically induced coherent intraband dynamics in disordered semiconductors*. *Physical Review B*, 65:085306, 2002. 79, 80
- [126] SCHMITT-RINK S, ELL C und HAUG H: *Many-body effects in the absorption, gain and luminescence spectra of semiconductor quantum-well structures*. *Physical Review B*, 33:1183–1189, 1986. 58

- [127] SHAPIRO M und BRUMER P. Rep. Prog. Phys., 66:859, 2003. 79, 113
- [128] SONG DS, KIM SH, PARK HG, KIM CK und LEE YH: *Single-fundamental-mode photonic-crystal vertical-cavity surface-emitting lasers*. Applied Physics Letters, 80:3901–3903, 2001. 3, 7, 35, 49, 56
- [129] SOUKOULIS C (Herausgeber): *Photonic crystals and light localization in the 21st century*. Kluwer Academic Publishers, Boston, 2001. 35, 56
- [130] STEVENS MJ, NAJMAIE A, BHAT RDR, SIPE JE und VAN DRIEL HM: *Optical injection and coherent control of a ballistic charge current in GaAs/AlGaAs quantum wells*. Journal of Applied Physics, 94:4999, 2003. 4, 79, 114
- [131] STEVENS MJ, SMIRL AL, BHAT RDR, NAJMAIE A, SIPE JE und VAN DRIEL HM: *Quantum Interference Control of Ballistic Pure Spin Currents in Semiconductors*. Phys. Rev. Letters, 90:136603, 2003. 4, 79, 80, 114
- [132] STIPPLER J, SCHLICHENMAIER C, KNORR A, MEIER T, LINDBERG M, THOMAS P und KOCH SW: *Current Echoes Induced by Coherent Control*. Physica Status Solidi B, 221:379, 2000. 79, 80
- [133] STROUCKEN T, KNORR A, THOMAS P und KOCH SW: *Coherent dynamics of radiatively coupled quantum-well excitons*. Physical Review B, 53:2026, 1996. 35
- [134] STROUCKEN T, EICHMANN R, BANYAI L und KOCH SW: *Excitons in photonic crystals*. Journal of the Optical Society of America B, 19(9):2292–2296, 2002. 3, 7, 27, 35, 39, 51
- [135] STROUCKEN T, EICHMANN R, BANYAI L und KOCH SW: *Excitons in photonic crystals*. Journal of the Optical Society of America B, 19:2292, 2002. 14, 49
- [136] TAFLOVE A und HAGNESS SC: *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House, Boston,London, 2. Auflage, 2000. 17, 18, 19, 20, 25, 39
- [137] TIP A. Physical Review A, 56:5022, 1997. 8, 10
- [138] TOCCI MD, SCALORA M, BLOEMER MJ, DOWLING JP und BOWDEN CM: *Measurement of spontaneous-emission enhancement near the one-dimensional photonic band edge of semiconductor heterostructures*. Physical Review A, 53:2799–2803, 1996. 56
- [139] TRAN THOAI DB, ZIMMERMANN R, GRUNDMANN M und BIMBERG D: *Image charges in semiconductor quantum wells: Effects on exciton binding energy*. Physical Review B, 42:5906–5909, 1990. 27, 35
- [140] VARGA I, THOMAS P, MEIER T und KOCH SW: *Dynamics of short-time-scale energy relaxation of optical excitations due to electron-electron scattering in the presence of arbitrary disorder*. Physical Review B, 68:113104, 2003. 46
- [141] VICTOR K, AXT VM und STAHL A: *Hierarchy of density matrices in coherent semiconductor optics*. Physical Review B, 51:14164–14175, 1995. 32

- [142] VILLENEUVE PR, FAN S und JOANNOPOULOS JD: *Microcavities in photonic crystals: Mode symmetry, tunability, and coupling efficiency*. Physical Review B, 54:7837, 1996. 35
- [143] VOGEL W und WELSCH DG: *Quantum Optics*. Akademie Verlag, Berlin, 1994. 8, 10, 11
- [144] VURGAFTMAN I, MEYER JR und RAM-MOHAN LR: *Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*. Journal of Applied Physics Review, 89(11):5815–5875, 2001. 87, 118, 119, 161
- [145] WARREN WS, RABITZ H und DAHLEM M. Science, 259:1581, 1993. 79, 113
- [146] WEGENER M: *Extreme Nonlinear Optics*. Springer Verlag, Berlin, 2004. 76
- [147] WENDT JR, VAWTER GA, GOURLEY PL, BRENNAN TM und HAMMONS BE: *Nanofabrication of photonic lattice structures in GaAs/AlGaAs*. J. Vac. Sci. Technol. B, 11:2637–2640, 1993. 7
- [148] WOLF SW, AWSCHALOM DD, BUHRMAN RA, DAUGHTON JM, VON MOLNAR S, ROUKES ML, CHTCHELKANOVA AY und TREGER DM. Science, 294:1488, 2001. 4, 79
- [149] WU MW und NIN CZ. Physica Status Solidi B, 222:523, 2000. 80
- [150] YABLONOVITCH E: *Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics*. Phys. Rev. Letters, 58:2059–2062, 1987. 3, 6, 35, 56
- [151] YEE KS: *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*. IEEE Trans. Antennas and Propagation, 14:302–307, 1966. 18
- [152] ZIMMERMANN K: *Zur Theorie der elektromagnetischen Kopplung in periodischen Quantenpunkt-Strukturen*. Diplomarbeit, TU Berlin, 2003. 25
- [153] ŽUTIĆ I, FABIAN J und DAS SARMA S: *Spintronics: Fundamentals and applications*. Rev. Mod. Phys., 76:323, 2004. 4, 79

Publikationen und Vorträge zu den hier gezeigten Ergebnissen

Artikel in Zeitschriften

- T. Meier, H.T. Duc, Q.T. Vu, B. Pasenow, H. Haug und S.W. Koch, "*Ultrafast Dynamics of Photoexcited Charge and Spin Currents in Semiconductor Nanostructures*", wird veröffentlicht in den Proceedings zur SPIE-conference "Photonics West 2007", Januar 2007, San Jose, CA, USA
- T. Meier, Quang Tuyen Vu, B. Pasenow, S. W. Koch, Huynh Thanh Duc und H. Haug "*Microscopic Many-Body Analysis of Ultrafast Photocurrents in Semiconductor Nanostructures*", wird veröffentlicht in den Proceedings zur OSA-conference "Ultrafast Phenomena 2006", July/August 2006, Pacific Grove, CA, USA
- T. Meier, H.T. Duc, Q.T. Vu, B. Pasenow, J. Hübner, S. Chatterjee, W.W. Rühle, H. Haug, und S.W. Koch, "*Ultrafast Dynamics of Optically-Induced Charge and Spin Currents in Semiconductors*", wird veröffentlicht in "Advances in Solid State Physics" Vol. 46, Springer Verlag, (Proceedings der DPG-EPS-Tagung 2006 in Dresden)
- T. Meier, Huynh Thanh Duc, M. Reichelt, B. Pasenow, T. Stroucken und S.W. Koch, "*Computational Optoelectronics of Semiconductor Nanostructures including Many-Body Effects*", <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume32/volume32.html>, John von Neumann Institute for Computing, Forschungszentrum Jülich, Deutschland, in NIC Series, 32:219-226, 2006.
- B. Pasenow, M. Reichelt, T. Stroucken, T. Meier, S.W. Koch, A.R. Zakharian und J.V. Moloney, "*Enhanced light-matter interaction in semiconductor heterostructures embedded in one-dimensional photonic crystals*", Journal of the Optical Society of America B, 22:2039-2048, 2005
- B. Pasenow, M. Reichelt, T. Stroucken, T. Meier und S.W. Koch, "*Excitonic wave packet dynamics in semiconductor photonic-crystal structures*", Physical Review B, 71:195321, 2005
- M. Reichelt, B. Pasenow, T. Meier, T. Stroucken und S.W. Koch, "*Spatially inhomogeneous optical gain in semiconductor photonic-crystal structures*", Physical Review B, 71:035346, 2005
- T. Meier, B. Pasenow, P. Thomas und S.W. Koch, "*Many-body Coulomb effects in the optical properties of semiconductor heterostructures*", <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume20/volume20.html>, John von Neumann Institute for Computing, Forschungszentrum Jülich, Deutschland, in NIC Series, 20:261-270, 2004.

- R. Eichmann, B. Pasenow, T. Meier, T. Stroucken, P. Thomas und S.W. Koch, "*Semiconductor excitons in photonic crystals*", *Physica Status Solidi B*, 238:439-442, 2003
- R. Eichmann, B. Pasenow, T. Meier, T. Stroucken, P. Thomas und S.W. Koch, "*Semiconductor absorption in photonic crystals*", *Applied Physics Letters*, 82:355-357, 2003

Vorträge und Poster

- T. Meier, B. Pasenow, M. Reichelt, T. Stroucken, A.R. Zakharian, J.V. Moloney und S.W. Koch, "*Microscopic self-consistent analysis of the light-matter coupling in semiconductor photonic crystal structures*", Poster Q 35.7 auf der DPG-Frühjahrstagung, Frankfurt, März 2006
- B. Pasenow, M. Reichelt, T. Stroucken, T. Meier, S.W. Koch, A.R. Zakharian und J.V. Moloney, "*Enhanced light-matter interaction in semiconductor quantum wells embedded in one-dimensional photonic crystals*", Vortrag HL 37.1 auf der DPG-Frühjahrstagung, Berlin, März 2005
- B. Pasenow, M. Reichelt, T. Meier, T. Stroucken, P.Thomas, S.W. Koch, "*Space-dependent optical and electronic properties of semiconductor photonic-crystal structures*", Vortrag HL 6.1 auf der DPG-Frühjahrstagung, Regensburg, März 2004

Wissenschaftlicher Werdegang

- **16. Juni 1998:**
Abitur an der Stiftsschule St. Johann Amöneburg

- **April 1999 - Juli 2003:**
Von SS 1999 bis SS 2003 Studium der Physik an Philipps-Universität Marburg

- **22. März 2001:**
Vordiplom für Physik

- **28. Juli 2003:**
Abschluss des Studiums nach 9. Semestern mit der Diplomprüfung. Thema der Diplomarbeit: *Mikroskopische Theorie exzitonischer Anregungen in photonischen Kristallstrukturen*

- **seit August 2003:**
Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe Theoretische Halbleiterphysik, Fachbereich Physik, Philipps Universität Marburg

- **05. August 2003:**
Beginn der Promotion in der Arbeitsgruppe Theoretische Halbleiterphysik, Fachbereich Physik, Philipps Universität Marburg