

Universität  
Rostock



Traditio et Innovatio

Theoretische Beschreibung von Exzitonen in  
druckinduzierten Potentialfällen bei ultratiefen  
Temperaturen in Kupferoxydul

Dissertation

zur

Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität Rostock

vorgelegt von

Dipl.-Phys. Siegfried Sobkowiak

Rostock, den 19.12.2014

Gutachter:

1. Gutachter:  
Prof. Dr. Heinrich Stolz,  
Institut für Physik, Universität Rostock
2. Gutachter:  
Prof. Dr. Holger Fehske,  
Institut für Physik, Universität Greifswald
3. Gutachter:  
Prof. Dr. Frank Jahnke,  
Institut für theoretische Physik, Universität Bremen

Datum der Einreichung: 19.12.2014

Datum der Verteidigung: 23.06.2015

# Inhaltsverzeichnis

|                                                                      |           |
|----------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. Grundlagen</b>                                                 | <b>1</b>  |
| 1.1. Kupferoxydul . . . . .                                          | 3         |
| 1.2. Experiment . . . . .                                            | 6         |
| 1.2.1. Verspannung im Kristall . . . . .                             | 7         |
| 1.2.2. Erzeugung der Exzitonen . . . . .                             | 7         |
| 1.2.3. Auger-Zerfall . . . . .                                       | 8         |
| 1.3. Grundlagen der theoretischen Beschreibung . . . . .             | 9         |
| <b>2. Exzitonen im thermischen Gleichgewicht</b>                     | <b>13</b> |
| 2.1. Dichte der Exzitonen . . . . .                                  | 13        |
| 2.1.1. Das ideale Exzitonengas . . . . .                             | 16        |
| 2.1.2. Thomas-Fermi-Näherung . . . . .                               | 17        |
| 2.1.3. Popow-Näherung . . . . .                                      | 17        |
| 2.1.4. G1/G2-Näherung . . . . .                                      | 18        |
| 2.2. Spektrum der Exzitonen im thermischen Gleichgewicht . . . . .   | 18        |
| 2.3. Ergebnisse . . . . .                                            | 21        |
| 2.3.1. Signaturen . . . . .                                          | 21        |
| 2.3.2. Wechselwirkungsstärke . . . . .                               | 25        |
| 2.3.3. Näherungen . . . . .                                          | 29        |
| 2.3.4. Optische Abbildung und Verbreiterungen . . . . .              | 32        |
| 2.3.5. Leuchtendes Kondensat . . . . .                               | 35        |
| 2.4. <i>fit</i> -Algorithmus . . . . .                               | 38        |
| 2.5. Vergleich von Experiment und Theorie . . . . .                  | 41        |
| <b>3. Nichtgleichgewicht</b>                                         | <b>43</b> |
| 3.1. Hydrodynamische Darstellung . . . . .                           | 44        |
| 3.1.1. Kondensat . . . . .                                           | 44        |
| 3.1.2. Thermische Exzitonen . . . . .                                | 45        |
| 3.2. Homogener Fall . . . . .                                        | 53        |
| 3.2.1. Relaxation . . . . .                                          | 54        |
| 3.3. Lokales Gleichgewicht . . . . .                                 | 57        |
| 3.3.1. Kugelkoordinaten . . . . .                                    | 58        |
| 3.4. Stoßterme . . . . .                                             | 60        |
| 3.4.1. Exziton-Phonon-Stoßterm $C_{X-Ph}$ . . . . .                  | 60        |
| 3.4.2. Stoßterm Kondensat-Thermische Exzitonen $C_{X_c-X}$ . . . . . | 64        |
| 3.4.3. Erzeugung und Vernichtung von Exzitonen $C_{E-V}$ . . . . .   | 65        |
| 3.5. Ergebnisse . . . . .                                            | 68        |
| 3.5.1. Gepulste Anregung . . . . .                                   | 69        |
| 3.5.2. Dauerstrichanregung . . . . .                                 | 75        |
| 3.6. Vergleich von Experiment und Theorie . . . . .                  | 87        |

|                                                                                                   |            |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>4. Zusammenfassung</b>                                                                         | <b>93</b>  |
| 4.1. Ausblick . . . . .                                                                           | 94         |
| <b>A. Publikationen</b>                                                                           | <b>97</b>  |
| A.1. Veröffentlichte Artikel . . . . .                                                            | 97         |
| A.2. Eingereichte Artikel . . . . .                                                               | 98         |
| A.3. Sonstiges . . . . .                                                                          | 98         |
| A.4. Konferenzbeiträge . . . . .                                                                  | 98         |
| <b>B.</b>                                                                                         | <b>101</b> |
| B.1. Abkürzungen . . . . .                                                                        | 101        |
| B.2. Berechnung der Exziton-Exziton-Stoßintegrale . . . . .                                       | 101        |
| B.2.1. $C_{X-X}$ -Stoßterm . . . . .                                                              | 103        |
| B.2.2. $C_{X_c-X}$ -Stoßterm . . . . .                                                            | 103        |
| B.2.3. Numerische Behandlung . . . . .                                                            | 104        |
| B.3. Berechnung der Exziton-Phonon-Stoßintegrale . . . . .                                        | 105        |
| B.3.1. Entwicklung . . . . .                                                                      | 106        |
| B.3.2. Numerische Behandlung . . . . .                                                            | 107        |
| B.4. Bestimmung von Temperatur und chemischem Potential aus den hydrodynamischen Größen . . . . . | 108        |
| B.4.1. Integrale . . . . .                                                                        | 110        |
| B.4.2. Startwerte . . . . .                                                                       | 110        |
| B.5. <i>fit</i> -Formel für das Spektrum . . . . .                                                | 111        |
| <b>Literaturverzeichnis</b>                                                                       | <b>115</b> |
| <b>Danksagung</b>                                                                                 | <b>125</b> |

# Kapitel 1.

## Grundlagen

Bereits 1925 wurde von Albert Einstein [1] einer der berühmtesten Quanteneffekte vorhergesagt, die nach ihm und Satyendranath Bose benannte Bose-Einstein-Kondensation. Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) können jeden beliebigen Quantenzustand mit beliebig vielen Teilchen besetzen. Dies bildet einen fundamentalen Unterschied zu Fermionen (Teilchen mit halbzahligem Spin), welche jeden Zustand mit maximal einem Teilchen besetzen können. Werden in einem bosonischen System gewisse kritische Werte für Temperatur  $T_{\text{krit}}$  und Dichte  $n_{\text{krit}}$  erreicht, so wird der Grundzustand makroskopisch besetzt. Dieser Effekt wird Bose-Einstein-Kondensation (BEK) genannt. Die Berechnung von kritischer Temperatur und Dichte für das ideale Bosegas findet sich in diversen Lehrbüchern der statistischen Physik (z.B. [2]) und ergibt

$$\begin{aligned} k_B T_{\text{krit}}(n) &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left( \frac{n}{(2S+1)g_{3/2}(1)} \right)^{2/3}, \\ n_{\text{krit}}(T) &= (2S+1) \left( \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(1), \end{aligned} \quad (1.1)$$

mit der Boltzmann-Konstante  $k_B$ , der Masse  $m$ , dem speziellen Bose-Integral  $g_{3/2}(1) \approx 2,612$ , dem reduzierten Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar$  und der Spinquantenzahl  $S$ . Zur experimentellen Umsetzung ist also eine hohe Dichte bei gleichzeitig niedriger Temperatur erforderlich. Zudem sollten Teilchen mit einer möglichst kleinen Masse benutzt werden, da dies die kritische Dichte absenkt bzw. die kritische Temperatur erhöht.

Die experimentelle Realisierung einer solchen BEK erwies sich jedoch als so schwierig, dass erst 70 Jahre nach der Vorhersage der Nachweis gelang. Hierzu war es nötig, Atome mittels Laser- und Evaporationskühlung bis in den nK-Bereich abzukühlen [3]. Für die experimentelle Umsetzung der BEK mit Rubidium- [3] bzw. Natriumatomen [4] im Jahre 1995 erhielten Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle und Carl E. Wieman 2001 den Nobelpreis für Physik. Mittlerweile gibt es auch experimentelle Nachweise der BEK für Moleküle [5] und Magnonen [6].

Lange Zeit galten Exzitonen (gebundene Elektron-Loch-Paare in angeregten Halbleitern) als die besten Kandidaten für eine experimentelle Realisierung der BEK. Bereits in den 1960er Jahren wurden diese für Versuche vorgeschlagen und diskutiert [7, 8]. Dies geschah vor allem

aufgrund ihrer äußerst geringen Masse, in der Größenordnung der freien Elektronenmasse  $m_0$ . Exzitonen besitzen, verglichen mit den von Anderson *et al.* [3] verwendeten  $^{87}\text{Ru}$ -Atomen, eine um fünf Größenordnungen niedriger Masse ( $m_{Ru} \approx 1,6 \times 10^5 m_0$ ). Bei der gleichen Dichte würden sie demnach bei Temperaturen kondensieren, die fünf Größenordnungen höher liegen. So beträgt die kritische Temperatur für einen Halbleiter aus Indiumphosphid (InP) bei einer Exzitonendichte von  $1,3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  ungefähr 2 K [9]. Diese Temperaturen können mittels eines Kryostaten auf Basis von flüssigem Helium erreicht werden.

Es ist an dieser Stelle wichtig zu bemerken, dass es hier nicht um die Kondensation von Exziton-Polaritonen gehen soll. Diese bosonischen Quasiteilchen setzen sich aus Exzitonen gekoppelt an das Photonfeld einer Mikrokavität zusammen und besitzen eine noch kleinere Masse als Exzitonen an sich. Experimente zur Kondensation von Exziton-Polaritonen haben in den letzten Jahren einige Aufmerksamkeit erhalten (für eine Übersicht siehe z.B. [10]), unterscheiden sich aber grundsätzlich zu den hier betrachteten Experimenten zu Exzitonen im Volumenmaterial.

Die ersten experimentellen Arbeiten zur Suche nach einem exzitonischen Kondensat in Halbleitern wurden an CdSe und CuCl durchgeführt [11, 12, 13, 14] und liegen mittlerweile 40 Jahre zurück. Aufgrund verschiedener Probleme war es allerdings nicht möglich, die BEK von Exzitonen an diesen Halbleitern zu demonstrieren. Ein in der Folge viel verwendetes Material ist Kupferoxydul ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ). Die lange Lebensdauer der Paraexzitonen von  $\tau = 13 \mu\text{s}$  [15] und andere Eigenschaften (siehe Abschnitt 1.1) machen  $\text{Cu}_2\text{O}$  zu einem idealen Material für die Realisierung einer exzitonischen BEK. Erste Erfolgsmeldungen mit Exzitonen im Volumenmaterial konnten jedoch später auf sogenannte „Phononwinde“ [16] und Schwierigkeiten mit der Abbildung [17] zurückgeführt werden. Zur Umgehung dieser Probleme, werden druckinduzierte Potentialfallen genutzt. Unter Verwendung dieser Technik wurde eine Reihe von Experimenten durchgeführt [18, 19, 20, 21, 22, 23], von denen aber keines in der Lage war, eine BEK von Exzitonen im Sinne der von Snoke in [24] aufgestellten Kriterien zweifelsfrei nachzuweisen. Für ein System aus Exzitonen muss demnach ein Schwellverhalten (kritische Temperatur/Dichte), das Aufbrechen in kondensierte und nichtkondensierte Phase sowie die spontane Kohärenz des Kondensates nachgewiesen werden. Auch die Experimente mit Exzitonen in  $\text{Cu}_2\text{O}$  bei ultratiefen Temperaturen ( $T \ll 1 \text{ K}$ ), welche in der Arbeitsgruppe Halbleiteroptik von H. Stolz durchgeführt wurden [25, 26] und deutliche Signaturen eines BEK zeigten, konnten bisher nicht alle diese Kriterien erfüllen. Gerade der Nachweis der Kohärenz gestaltet sich schwieriger als oft angenommen [27].

In dieser Arbeit werden typische experimentelle Situationen im allgemeinen und speziell die in [25] und [26] geschilderten Experimente theoretisch untersucht. Insbesondere geht es darum, Vorhersagen zu treffen bzw. die Interpretation von Messergebnissen zu ermöglichen und zu einem allgemeinen Verständnis der Experimente beizutragen. Die theoretische Beschreibung der Exzitonen in druckinduzierten Potentialfallen ist ein komplexes Problem. Ein umfassendes Modell muss neben der endlichen Lebensdauer, dem Auger-Zerfall und

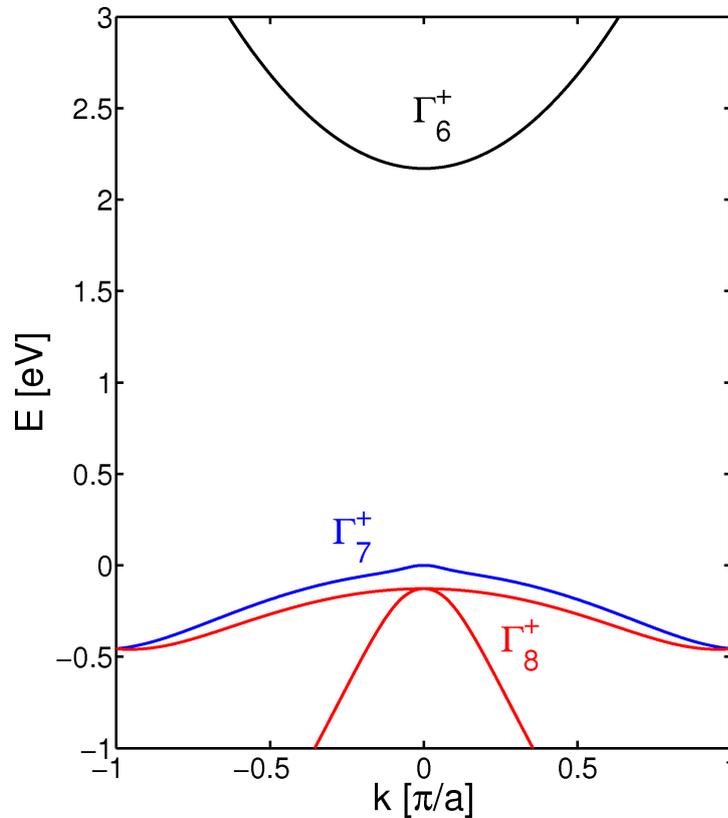
Exziton-Exziton-Stößen auch Exziton-Phonon-Stöße (Thermalisierung mit dem Kristallgitter), den Pumplaser und weitere Besonderheiten enthalten. Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines solchen Modells, welches alle wesentlichen Prozesse berücksichtigt. Hierzu wurde die Arbeit in drei Teilabschnitte gegliedert. In den folgenden Passagen dieser Einleitung werden grundlegende Eigenschaften von Kupferoxydul, der Aufbau des Experiments sowie die Grundzüge der theoretischen Beschreibung dargelegt. Im zweiten Kapitel wird ein vereinfachtes Modell unter der Annahme thermodynamischen Gleichgewichts genutzt, um erste Resultate abzuleiten. Im dritten und letzten Kapitel werden anschließend die Exzitonen als dynamisches System im Nichtgleichgewicht behandelt.

## 1.1. Kupferoxydul

Kupferoxydul ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ) ist ein natürlich vorkommender direkter Halbleiter, welcher bei der Oxidation von Kupfer entsteht. Es kommt daher vornehmlich in Form des Minerals Cuprit in Kupferadern vor, kann aber auch künstlich gezüchtet werden. Weitere Bezeichnungen für Kupferoxydul sind unter anderem Kupfer(I)-oxid, Dikupferoxid oder Cuprum oxydulatum. Ursprünglich zum Bau von Gleichrichtern verwendet, wurde  $\text{Cu}_2\text{O}$  in diesem Bereich durch Selen, Germanium und Silizium verdrängt. Aufgrund seiner besonderen Eigenschaften findet es jedoch immer noch Verwendung in der Grundlagenforschung.

Die Einheitszelle von Kupferoxydul enthält 2 Sauerstoff- und 4 Kupferatome, welche in der seltenen Cupritstruktur angeordnet sind [28]. Die Gitterkonstante beträgt  $a_G = 0,43$  nm [29]. Das oberste Valenz- und das unterste Leitungsband sind bei Kupferoxydul das  $\Gamma_7^+$ - bzw. das  $\Gamma_6^+$ -Band. Die Energielücke zwischen diesen beiden Bänder beträgt  $E_G = 2,17$  eV [30]. Das  $\Gamma_8^+$ -Band liegt 130 meV unterhalb des  $\Gamma_7^+$ -Bandes aufgrund der Spin-Orbit-Wechselwirkung [30]. Ein Ausschnitt der Bandstruktur von Kupferoxydul ist schematisch in Abbildung 1.1 dargestellt. Werden Exzitonen aus Elektronen des  $\Gamma_6^+$ - und Löchern des  $\Gamma_7^+$ -Bandes gebildet, so werden diese der sogenannten gelben Serie zugerechnet. Befindet sich das Elektron im  $\Gamma_6^+$ - und das Loch im  $\Gamma_8^+$ -Band, so ordnet man das entstandene Exziton der sogenannten grünen Serie zu. Die Namen stammen von der Wellenlänge des bei der jeweiligen Rekombination emittierten Photons.

Die für das Experiment maßgeblichen  $1s$ -Exzitonen der gelben Serie werden also mittels des zweifach entarteten  $\Gamma_6^+$ -Bandes und des zweifach entarteten  $\Gamma_7^+$ -Bandes gebildet. Demzufolge gibt es ein nichtentartetes Paraexziton mit  $J = 0$  und das dreifach entartete Orthoexziton (Ortho(+)-Exziton, Ortho(0)-Exziton und Ortho(-)-Exziton) mit  $J = 1$ . Da das Paraexziton aus reinen Spintriplett-Zuständen besteht, wird es nicht durch die Austauschwechselwirkung betroffen. Dies führt zur Ortho-Para-Aufspaltung von  $E_{O-P} = 12,12$  meV [32] mit dem Paraexziton als niedrigstem Zustand. Das Paraexziton ist für alle elektronischen Übergänge in beliebiger Ordnung optisch verboten, da  $J = 0$  ist [33]. Dies führt zu einer sehr langen Lebensdauer



**Abbildung 1.1.:** Ausschnitt der Bandstruktur von Kupferoxydul gemäß [31] in [100]-Richtung. Dargestellt ist das unterste Leitungsband ( $\Gamma_6^+$ -Band) sowie das oberste Valenzband ( $\Gamma_7^+$ -Band) und das darunter liegende  $\Gamma_8^+$ -Band. Die Bandlücke beträgt  $E_G = 2,17$  eV. Der Abstand zwischen dem  $\Gamma_7^+$ -Band und dem  $\Gamma_8^+$ -Band beträgt aufgrund der Spin-Orbit-Wechselwirkung  $E_{SO} = 0,13$  eV.

in der Größenordnung von mehreren  $\mu\text{s}$ . Im Gegensatz dazu sind Zerfälle von Orthoexzitonen schwach quadrupolerlaubt (Oszillatorstärke von  $3 \times 10^{-9}$  [37]) und die Lebensdauer beträgt nur einige ns. Wichtige Kenndaten für  $\text{Cu}_2\text{O}$  sind in Tabelle 1.1 zusammengetragen. Obwohl der Bohrradius der Exzitonen in der gleichen Größenordnung wie die Gitterkonstante liegt, können sie trotzdem als Wannier-Exzitonen beschrieben werden. Allerdings treten dadurch in  $\text{Cu}_2\text{O}$  einige Besonderheiten auf. Die Energiezustände bilden zwar eine Rydberg-Serie, allerdings nur mit Ausnahme des Grundzustandes. Die Massen der  $1s$ -Ortho- ( $m_O = 3,0 m_0$ ) und  $1s$ -Paraexzitonen ( $m_P = 2,6 m_0$ ) unterscheiden sich stark von der Summe der Massen der entsprechenden Löcher ( $m_h = 0,7 m_0$ ) und Elektronen ( $m_e = 1,0 m_0$ ). Zudem besitzt die Bandstruktur für kleine  $k$  eine starke Nichtparabolizität (siehe Abbildung 1.1). Diese und andere Abweichungen können mittels der *central-cell-corrections* [30] und der Arbeiten von Alvermann *et al.* [38] verstanden werden. Für die numerischen Rechnungen werden die Parameter gemäß Tabelle 1.1 verwendet und eine näherungsweise parabolische Dispersion angenommen.

Aufgrund des Mottüberganges ist die Dichte der Exzitonen in Halbleitern beschränkt. Mit steigender Dichte nimmt die Abschirmung der Coulombwechselwirkung zwischen den Konstituenten des Exzitons (Elektron und Loch) immer weiter zu. Ab einem bestimmten Dich-

| Parameter                   | Symbol    | Wert      | Quelle |
|-----------------------------|-----------|-----------|--------|
| Brechungsindex              | $n_r$     | 2,95      | [34]   |
| Elektronenmasse             | $m_e$     | 1,0 $m_0$ | [35]   |
| Lochmasse                   | $m_h$     | 0,7 $m_0$ | [35]   |
| Masse Paraexziton           | $m_P$     | 2,6 $m_0$ | [36]   |
| Masse Orthoexziton          | $m_O$     | 3,0 $m_0$ | [30]   |
| Rydberg ( $n > 1$ )         | $E_{Ry}$  | 97 meV    | [35]   |
| Bindungsenergie ( $n = 1$ ) | $E_X$     | 150 meV   | [35]   |
| Bohrradius                  | $a_X$     | 0,7 nm    | [35]   |
| Bandlücke                   | $E_g$     | 2,17 eV   | [30]   |
| Ortho-Para-Aufspaltung      | $E_{O-P}$ | 12,12 meV | [35]   |

**Tabelle 1.1.:** Wichtige Kenngrößen für Kupferoxydul

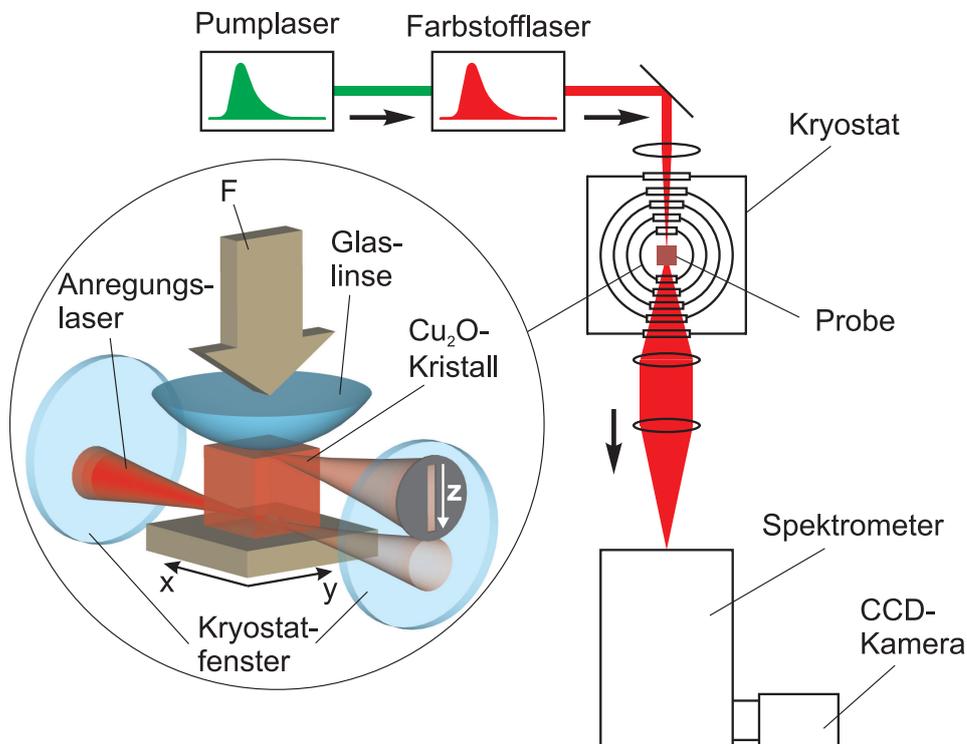
tebereich, der sogenannten Mott-dichte, ist diese so stark, dass die Bindungszustände aufbrechen und ein freies Elektron-Loch-Plasma entsteht. Die genaue Lage dieses Dichtebereichs wird durch ein subtiles Zusammenspiel verschiedener Vielteilcheneffekte (neben der Abschirmung noch Pauliblocking und Selbstenergie) bestimmt [39]. Für tiefe Temperaturen ( $T < 10$  K) beträgt die Mott-dichte in Kupferoxydul  $n_{\text{Mott}} \approx 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  [40].

Andererseits können auch die Exzitonen untereinander wechselwirken. Die Beschreibung dieser Wechselwirkung ist aufgrund der inneren Struktur der Exzitonen (*Composite-Particle-Effekte*) ein komplexes und seit langem diskutiertes Problem [41, 42, 43, 44, 45, 46]. Allerdings können Exzitonen als schwach wechselwirkendes Bosegas behandelt werden, wenn

$$na_X^3 \ll \frac{1}{4\pi} \quad (1.2)$$

erfüllt ist [35]. Exzitonen in  $\text{Cu}_2\text{O}$  können demnach bei Dichten  $n \ll 2,3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  und somit für alle Dichten unterhalb der Mott-dichte, so beschrieben werden. Aufgrund des großen mittleren Abstands der Exzitonen in den zu betrachtenden Fällen spielen *composite-particle-Effekte* daher nur eine untergeordnete Rolle. Zur Beschreibung der Wechselwirkung sollte demnach ein Kontaktpotential und somit die Kenntnis der  $s$ -Wellen-Streulänge  $a_s$  ausreichen. Aufgrund der sehr ähnlichen Massen von Elektronen und Löchern in  $\text{Cu}_2\text{O}$  stellt Positronium ein geeignetes Modell zur Berechnung dieser dar. Für diesen Fall wurde  $a_s$  für die Paraexzitonen von Shumway *et al.* [43] mit dem Ergebnis  $a_s = 2,1 a_B$ , berechnet.

Unter Vernachlässigung der inneren Struktur der Exzitonen können diese in  $\text{Cu}_2\text{O}$  als schwach wechselwirkendes Bosegas beschrieben werden. Somit kann auf die umfangreichen Arbeiten aus dem Bereich der atomaren BEK zurückgegriffen werden. Der entsprechende Formalismus muss allerdings an gegebener Stelle durch halbleiterspezifische Effekte ergänzt werden.



**Abbildung 1.2.:** Schematische Versuchsanordnung für Experimente mit Exzitonen in druckinduzierten Potentialfallen, wie sie in [25, 26] verwendet wird [49].

## 1.2. Experiment

Um hohe Dichten von Exzitonen zu erzeugen, werden typischerweise druckinduzierte Hertzsche Potentialfallen verwendet. Diese bereits seit den 1970er Jahren eingesetzte Methode verändert durch mechanischen Druck die Bandstruktur und erzeugt so Fallen für Exzitonen. Diese Technik wurde bei diversen experimentellen Untersuchungen verwendet [19, 22, 47, 48] und findet auch bei den Experimenten in der Arbeitsgruppe von H. Stolz [25, 26] Anwendung. Für die Versuche wird ein kubischer  $\text{Cu}_2\text{O}$ -Einkristall (Kantenlänge  $l \approx 3 \text{ mm}$ ) zwischen einer ebenen Unterlage und einer sphärischen Glaslinse eingespannt. Mittels einer Stellschraube kann der Druck der Linse auf den Kristall und somit die Tiefe und Form der Potentialfalle variiert werden. Die Probe befindet sich in einem  $^3\text{He}/^4\text{He}$ -Verdünnungskryostaten und kann darin bis auf  $0,037 \text{ K}$  abgekühlt werden [26]. Aufgrund des experimentellen Aufbaus gibt es insgesamt drei verschiedene Temperaturen, welche eine Rolle spielen. Diese sind die Temperatur der Exzitonen  $T_X$ , die Temperatur der Probe (der Phononen des Kristallgitters)  $T_{\text{Ph}}$  und die Temperatur des He-Bades  $T_{\text{Bad}}$ . Direkt messbar ist allerdings nur die Temperatur des Bades.

Die Exzitonen werden durch einen Pumplaser am Fallenrand erzeugt und diffundieren in das Fallenzentrum. Das bei der Rekombination emittierte Lumineszenzspektrum wird mittels eines Spektrometers mit angeschlossener CCD-Kamera aufgezeichnet. Der schematische Versuchsaufbau ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Die  $z$ -Achse verläuft vom Berührungspunkt der Linse

mit dem Kristall senkrecht nach unten. In dieser Richtung hat das Fallenpotential annähernd die Form eines Morsepotentials. In der  $x$ - $y$ -Ebene ist die Falle hingegen durch einen harmonischen Oszillator gegeben. Für die theoretische Beschreibung wird der Koordinatenursprung in das Minimum des Fallenpotentials gelegt. Wie in Abbildung 1.2 ersichtlich, erfolgt die Einstrahlung des Lasers senkrecht zur  $z$ -Achse. Für die theoretische Beschreibung des Systems ist es wichtig, weitere Aspekte zu berücksichtigen, wie die Effekte der mechanischen Verspannung, die Art der Erzeugung der Exzitonen und den Auger-Zerfall.

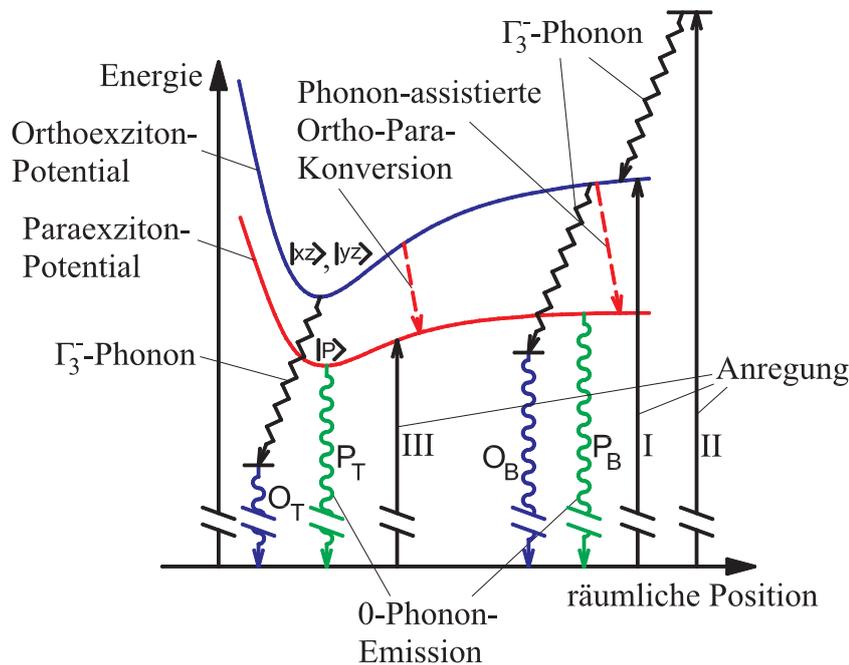
### 1.2.1. Verspannung im Kristall

Durch die Spannung mischen die Paraexzitonen der zu betrachtenden gelben Serie mit den energetisch höher liegenden Paraexzitonen der grünen Serie. Dies führt dazu, dass der direkte Zerfall der Paraexzitonen quadrupolerlaubt ist. Die Stärke dieses Übergangs ist abhängig vom verwendeten Druck. Bei typischen Werten (2 kbar) dominiert der direkte quadrupolerlaubte Zerfall gegenüber dem entsprechendem phononassistierten Prozess [34]. Für die Berechnung des Lumineszenzspektrums der Paraexzitonen kann somit eine direkte Exziton-Photon-Kopplung angenommen werden. Die Orthoexzitonen hingegen zerfallen über einen phononassistierten Prozess.

In einem Kristall ohne Verspannung ist die Streuung von Paraexzitonen nur mit longitudinal-akustischen (LA) Phononen möglich [50]. Unter Druck wird jedoch auch die Streuung an transversal-akustischen (TA) Phononen erlaubt [51]. Die Stärke dieser Kopplung ist allerdings noch vom ausgeübten Druck abhängig [52]. Da die Abkühlung der Exzitonen ausschließlich über die Streuung an Phononen stattfindet, verbessert sich dadurch die Kühlung der Exzitonen.

### 1.2.2. Erzeugung der Exzitonen

Für die Erzeugung von Exzitonen gibt es prinzipiell drei verschiedene Möglichkeiten, welche in Abbildung 1.3 dargestellt sind. Zum einem können zunächst Orthoexzitonen erzeugt werden, welche durch den Ortho-Para-Konversionsprozess in Paraexzitonen umgewandelt werden. Hierfür können Orthoexzitonen direkt über den quadrupolerlaubten Nullphononübergang (Prozess I) oder über die indirekte Absorption unter Einbeziehung eines  $\Gamma_3^-$ -Phonons (Prozess II) erzeugt werden. Andererseits können Paraexzitonen direkt über den Nullphononübergang erzeugt werden (Prozess III). Letzterer Prozess ist möglich aufgrund des ausgeübten Druckes und der dadurch entstehenden Verspannungen. Für die experimentelle Umsetzung wird Prozess II realisiert, da dieser eine hohe Absorptionsstärke besitzt und die anfänglich erzeugte Verteilung räumlich stark ausgedehnt ist [25]. Somit spielen sowohl die Para- als auch die dreifach entarteten Orthoexzitonen eine Rolle. Jedoch ist die entstehende Falle für Ortho(0)-Exzitonen



**Abbildung 1.3.:** Schematische Darstellung der verschiedenen Möglichkeiten zur Anregung von Paraexzitonen in  $\text{Cu}_2\text{O}$  [49].

repulsiv und es werden nur drei verschiedene Arten von Exzitonen (Ortho(+)-, Ortho(-)- und Paraexzitonen) in der Falle gesammelt.

### 1.2.3. Auger-Zerfall

Ein wichtiger Prozess ist der augerartige Zweikörperzerfall der Exzitonen. Bei diesem rekombiniert ein Exziton und ein zweites wird dabei ionisiert. Das so entstandene freie Elektron-Loch-Paar bildet nach einiger Zeit ein stark angeregtes Exziton. Dieser Prozess ist also für die Erzeugung eines Kondensates in zweierlei Hinsicht hinderlich. Zum einem werden Exzitonen vernichtet und somit die Dichte gesenkt und zum anderen entstehen sehr heie Exzitonen. Typischerweise wird der Einfluss des Auger-Zerfall in der Literatur über  $dn/dt = An^2$  beschrieben, wobei davon ausgegangen wird, dass der Auger-Koeffizient  $A$  weder orts- noch dichteabhängig ist. Über den Wert des Koeffizienten selbst gehen die experimentellen und theoretischen Ergebnisse jedoch weit auseinander. Im ersten Bericht über diesen Zerfallsprozess wird der Koeffizient mit  $A = 1 \times 10^{-20} \text{ cm}^3\text{ns}^{-1}$  [53] angegeben. Spätere experimentelle Arbeiten fanden die Werte  $A = 7 \times 10^{-17} \text{ cm}^3\text{ns}^{-1}$  [54, 55],  $A = 4 \times 10^{-16} \text{ cm}^3\text{ns}^{-1}$  [56] und  $A = 2 \times 10^{-18} \text{ cm}^3\text{ns}^{-1}$  [26]. Zusätzlich existieren noch theoretische Arbeiten, die den Koeffizienten berechnet haben mit dem Ergebniss  $A = 2 \times 10^{-21} \text{ cm}^3\text{ns}^{-1}$  [57] bzw.  $A = 3 \times 10^{-22} \text{ cm}^3\text{ns}^{-1}$  [58, 59]. Zudem unterscheiden sich die Ergebnisse durch die Temperaturabhängigkeit des Koeffizienten. Die theoretischen Arbeiten sagen eine lineare Tempe-

raturabhängigkeit voraus, während experimentell eine inverse bzw. keine Temperaturabhängigkeit gefunden wurde. Der zugrundeliegende Mechanismus dieses Zerfalles ist zur Zeit noch nicht verstanden. Als mögliche Ursachen werden in der Literatur Störstellen [60] und Biexzitonen [61] diskutiert. Trotz der Unsicherheiten muss dieser Prozess bei einer dynamischen Beschreibung der Exzitonen berücksichtigt werden.

### 1.3. Grundlagen der theoretischen Beschreibung

Um die experimentelle Situation zu beschreiben, bedarf es der Lösung zweier Probleme. Zunächst muss die Dichteverteilung der Exzitonen und somit die entsprechende Energiedispersion bestimmt werden. Aus diesen Ergebnissen muss dann das Lumineszenzspektrum in seinen verschiedenen experimentell messbaren Formen berechnet werden.

Von den drei verschiedenen Sorten Exzitonen in der Falle sind die Paraexzitonen von besonderem Interesse. Aufgrund ihrer hohen Lebensdauer haben diese mehr Zeit zum Thermalisieren, so dass ein mögliches exzitonesches Kondensat aus Paraexzitonen bestehen wird. Aufgrund der Wechselwirkung der verschiedenen Spezies von Exzitonen untereinander müssten die Exzitonen in der Falle als mehrkomponentiges Bosegas beschrieben werden. Wie in [62, 63] allerdings gezeigt wurde, ist der Einfluss der Orthoexzitonen auf die Paraexzitonen gering. Erst wenn es ein Kondensat von Orthoexzitonen gäbe, wäre die Wechselwirkung zwischen den verschiedenen Exzitonsorten stark genug, um Dichte und Lumineszenzspektrum der Paraexzitonen merklich zu beeinflussen. Da das Verhältnis von Ortho- zu Paraexzitonen allerdings in einem typischen Experiment 1:10 ist, können die Orthoexzitonen in der Falle für die Beschreibung der Paraexzitonen vernachlässigt werden. Wenn im folgendem also von Exzitonen die Rede ist, so sind immer die Paraexzitonen gemeint. Diese können somit als schwach wechselwirkendes einkomponentiges Bosegas beschrieben werden. Aufgrund der intensiven Untersuchung der atomaren BEK sind solche Systeme in der Fachliteratur bereits ausführlich diskutiert worden. Die Ableitung der grundlegenden Gleichungen zur Berechnung der Dichteverteilungen sind in verschiedenen Artikeln, Büchern und Übersichtsartikeln dargelegt (siehe z.B. [64, 65, 66, 67, 68, 69, 70]) und sollen daher hier nur skizzenhaft vorgestellt werden.

Ausgangspunkt für die theoretische Beschreibung ist der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung. Dieser lautet

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{h}_0 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \quad (1.3)$$

mit den Bosefeldoperatoren  $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ , dem Einteilchenbeitrag  $\hat{h}_0$  und dem Wechselwirkungspotential  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Die genaue Gestalt von  $\hat{h}_0$  wird an dieser Stelle offen gelassen, um eine kompakte Darstellung zu ermöglichen. Für das Wechselwirkungspotential wird ein Kontaktpotential  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  angenommen (siehe Abschnitt 1.1), wobei die Wechselwirkungs-

konstante  $g$  durch die  $s$ -Wellen-Streulänge  $a_s$  und die Exzitonenmasse  $m$  über

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (1.4)$$

gegeben ist. Setzt man das Wechselwirkungspotential in (1.3) ein, so ergibt sich

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{h}_0 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t).$$

Die entsprechende Bewegungsgleichung im Heisenbergbild lautet somit

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ &= \hat{h}_0 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + g \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Üblicherweise wird der Bosefeldoperator über  $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) + \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)$  in eine Kondensatswellenfunktion  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  und einen Fluktuationsoperator  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)$  zerlegt. Der Fluktuationsoperator beschreibt die nichtkondensierten Exzitonen, welche im folgenden auch als thermische Exzitonen bezeichnet werden. Für die entsprechenden gemittelten Größen gilt

$$\begin{aligned} \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle &= \Phi(\mathbf{r}, t) \\ \langle \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Nach Einsetzen der Zerlegung in (1.5) und anschließender Mittelung ergibt sich die Bewegungsgleichung für  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  somit zu

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{h}_0 \Phi(\mathbf{r}, t) + g \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (1.7)$$

Das Produkt der drei Bosefeldoperatoren ergibt entsprechend

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) &= |\Phi(\mathbf{r})|^2 \Phi(\mathbf{r}) + \Phi^*(\mathbf{r}) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + 2|\Phi(\mathbf{r})|^2 \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + 2\Phi(\mathbf{r}) \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + \Phi^2(\mathbf{r}) \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Wird unter Beachtung von  $\langle \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$  die Mittelung durchgeführt, so ist das Resultat

$$\begin{aligned} \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle &= n_c(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) + \tilde{m}(\mathbf{r}, t) \Phi^*(\mathbf{r}, t) + 2\tilde{n}(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Die neu eingeführten Größen sind hierbei die Dichte des Kondensates  $n_c(\mathbf{r}, t) = |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2$ , die Dichte der thermischen Exzitonen  $\tilde{n}(\mathbf{r}, t) = \langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$  sowie die anomale Dichte  $\tilde{m}(\mathbf{r}, t) =$

$\langle \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$ . Somit ergibt sich für die Bewegungsgleichung der Kondensatswellenfunktion

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{h}_0 \Phi(\mathbf{r}, t) + gn_c(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) + g\tilde{m}(\mathbf{r}, t) \Phi^*(\mathbf{r}, t) + g \langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (1.10)$$

Eine analoge Bewegungsgleichung lässt sich auch für den Fluktuationsoperator  $\tilde{\psi}$  ableiten. Hierzu muss lediglich die Zerlegung in (1.5) eingesetzt und anschließend die Zeitableitung von  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  mittels Gleichung (1.10) eliminiert werden. Das Resultat ist

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{h}_0 \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + 2gn_c(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + g\Phi^*(\mathbf{r}, t) [\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) - \tilde{m}(\mathbf{r}, t)] + g\Phi^2(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) + 2g\Phi(\mathbf{r}, t) [\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) - \tilde{n}(\mathbf{r}, t)] + g [\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) - \langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle]. \quad (1.11)$$

Die Gleichungen (1.10) und (1.11) bilden den Ausgangspunkt für alle im folgenden verwendeten Näherungen zur Beschreibung der Exzitonen in der Falle.



## Kapitel 2.

# Exzitonen im thermischen Gleichgewicht

Die experimentell bestimmten Lebensdauern von Paraexzitonen in  $\text{Cu}_2\text{O}$  unter Druck sind mit  $\tau = 300 \text{ ns}$  [51] bzw.  $\tau = 650 \text{ ns}$  [25] sehr lang. Die Thermalisierung der Exzitonen hingegen benötigt bei Badtemperaturen von  $T_{\text{Bad}} = 10\text{-}20 \text{ K}$  lediglich einige ns [71]. Es wird daher zunächst davon ausgegangen, dass die Exzitonen innerhalb der Lebensdauer in ein thermodynamisches Gleichgewicht relaxieren können. Da durch diese Annahme alle dynamischen Prozesse vernachlässigt werden (Drift der Exzitonen zum Fallenzentrum, Abkühlung der Exzitonen,...), wird eine Beschreibung der Experimente nur in speziellen Fällen möglich sein. Dennoch sind die Gleichgewichtseigenschaften des Systems wichtig für das grundlegende Verständnis der Experimente.

### 2.1. Dichte der Exzitonen

Das typische Vorgehen zur Berechnung der Dichten ist die Diagonalisierung des Hamiltonoperators im großkanonischen Ensemble  $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$  [64]. Der Einteilchenbeitrag in (1.3) ist daher durch

$$\hat{h}_0 = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu \quad (2.1)$$

mit dem externen Fallenpotential  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  und dem chemischen Potential der Exzitonen  $\mu$  gegeben. In diesem Fall gilt  $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r})$  [64] und Gleichung (1.10) wird zur Gross-Pitajewski-Gleichung (GPG) für endliche Temperaturen

$$0 = \left[ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu + gn_c(\mathbf{r}) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) + g\tilde{m}(\mathbf{r})\Phi^*(\mathbf{r}) + g\langle\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (2.2)$$

Das Produkt der drei Fluktuationsoperatoren in (2.2) lautet in selbstkonsistenter *mean-field*-Näherung [67]

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) &\approx 2\langle\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + \langle\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \\ &\approx 2\tilde{n}(\mathbf{r})\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + \tilde{m}(\mathbf{r})\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\quad (2.3)$$

Wegen  $\langle\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle = 0$  (siehe Gleichung (1.6)) gilt  $\langle\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle = 0$  und Gleichung (2.2) wird zur GPG in stationärer *mean-field*-Näherung

$$0 = \left[ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu + gn_c(\mathbf{r}) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) + g\tilde{m}(\mathbf{r})\Phi^*(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Diese stellt den Ausgangspunkt für die Berechnung der Kondensatswellenfunktion im Gleichgewicht dar.

Zur Berechnung der Dichte der thermischen Exzitonen wird die Bewegungsgleichung des Fluktuationsoperators (1.11) auf dem gleichen Niveau behandelt wie die entsprechende Gleichung für die Kondensatswellenfunktion. Dies bedeutet vor allem die Näherungen  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \approx \langle\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\rangle$  und  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \approx \langle\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle$ , um mit der zuvor verwendeten *mean-field*-Näherung konsistent zu bleiben. Angewendet auf Gleichung (1.11) ergibt sich unter Beachtung von (2.3) die Bewegungsgleichung der thermischen Exzitonen zu

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}} + 2gn(\mathbf{r}) - \mu \right] \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + gm(\mathbf{r})\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t). \quad (2.5)$$

Hierbei wurden die Gesamtdichte  $n(\mathbf{r}) = n_c(\mathbf{r}) + \tilde{n}(\mathbf{r})$  sowie die anomale Gesamtdichte  $m(\mathbf{r}) = \Phi^2(\mathbf{r}) + \tilde{m}(\mathbf{r})$  eingeführt. Schließt man zusätzlich für das Kondensat Wirbel und kollektive Bewegungen aus, so ist die Wellenfunktion reell [68] und es gilt  $\Phi^2(\mathbf{r}) = |\Phi(\mathbf{r})|^2 = n_c(\mathbf{r})$ . Dies soll für die Berechnungen im Gleichgewicht angenommen werden und es ist somit  $m(\mathbf{r}) = n_c(\mathbf{r}) + \tilde{m}(\mathbf{r})$ .

Die Bewegungsgleichung (2.5) sowie deren adjungiertes Gegenstück können über eine Bogoljubow-Transformation der Form [67]

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) &= \sum_l \left[ u_l(\mathbf{r})\hat{\alpha}_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t} + v_l^*(\mathbf{r})\hat{\alpha}_l^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}E_l t} \right], \\ \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_l \left[ u_l^*(\mathbf{r})\hat{\alpha}_l^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}E_l t} + v_l(\mathbf{r})\hat{\alpha}_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t} \right]\end{aligned}\quad (2.6)$$

gelöst werden. Hierbei sind  $\hat{\alpha}_l^\dagger$  und  $\hat{\alpha}_l$  Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die den Vertauschungsrelationen für Bosonen unterliegen. Damit die Transformation (2.6) die Bewegungsgleichung (2.5) löst, müssen die Bogoljubow-Amplituden  $u_l(\mathbf{r})$  und  $v_l(\mathbf{r})$  sowie die Qua-

siteilchenergien  $E_l$  Lösungen der Bogoljubow-Gleichung

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathcal{L}}(\mathbf{r}) & gm(\mathbf{r}) \\ -gm(\mathbf{r}) & -\hat{\mathcal{L}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_l(\mathbf{r}) \\ v_l(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_l \begin{pmatrix} u_l(\mathbf{r}) \\ v_l(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

sein. Hierbei wurde die Abkürzung

$$\hat{\mathcal{L}}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2gn(\mathbf{r}) - \mu \quad (2.8)$$

eingeführt. Die Bogoljubow-Gleichungen stellen somit Eigenwertgleichungen zur Bestimmung der Bogoljubow-Amplituden  $u_l(\mathbf{r})$  und  $v_l(\mathbf{r})$  sowie der entsprechenden Quasiteilchenergien  $E_l$  dar.

Das externe Potential  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  ist in typischen Experimenten makroskopisch ausgedehnt (in  $z$ -Richtung über 100  $\mu\text{m}$ ). Somit ändert es sich nur sehr langsam auf den typischen Längenskalen der Exzitonen (z.B. Bohrradius  $a_X = 0,7$  nm) und die Verwendung einer Lokaldichtenäherung ist möglich [34]. Bei dieser Näherung wird das System als lokal homogen betrachtet und der kinetische Anteil in (2.8) kann durch den semiklassischen Impuls  $\mathbf{p}$  ausgedrückt werden

$$\mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2gn(\mathbf{r}) - \mu. \quad (2.9)$$

Durch diese Näherung wird die Eigenwertgleichung (2.7) algebraisch lösbar mit der positiven Lösung

$$E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \sqrt{\mathcal{L}^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - [gm(\mathbf{r})]^2}. \quad (2.10)$$

Unter Verwendung dieser Ausdrücke kann die Dichte der thermischen Exzitonen mittels

$$\tilde{n}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left[ \frac{\mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{E(\mathbf{p}, \mathbf{r})} \left( n_B(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \right] \Theta(E^2(\mathbf{p}, \mathbf{r})) \quad (2.11)$$

direkt berechnet werden [66]. Hierbei bezeichnet  $n_B(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  die übliche Bose-Einstein-Verteilung

$$n_B(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (e^{E(\mathbf{p}, \mathbf{r})/k_B T} - 1)^{-1} \quad (2.12)$$

mit der Boltzmannkonstante  $k_B$  und der Temperatur  $T$ . Die Bogoljubow-Amplituden, welche später für die Berechnung des Spektrums benötigt werden, sind durch die Relationen

$$\begin{aligned} u^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \left( \frac{\mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{E(\mathbf{p}, \mathbf{r})} + 1 \right) \\ v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \left( \frac{\mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{E(\mathbf{p}, \mathbf{r})} - 1 \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

gegeben [34]. Innerhalb der Lokaldichtenäherung gilt für selbige die Normierung  $u^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = 1$ .

Mit den Gleichungen (2.4) und (2.11) lassen sich bei gegebenem externem Potential unter Beachtung von (2.10) und (2.9) die Dichten der kondensierten und der thermischen Exzitonen berechnen. Auf dieser Stufe der Näherung werden die Exzitonen als schwach wechselwirkendes Bosegas in einer *mean-field*- und Lokaldichtenäherung behandelt. In der Literatur wird dies als Hartree-Fock-Bogoljubow-Näherung (HFBN) mit zusätzlicher Lokaldichtenäherung (LDN) bezeichnet. Da alle später diskutierten Näherungen im Gleichgewicht sich der LDN bedienen, wird auf eine explizite Nennung dieser im folgenden verzichtet werden.

Zur Berechnung der Dichten werden auf diese Gleichungen insgesamt vier verschiedene Stufen der Näherung angewendet. Für deren Diskussion ist es sinnvoll, die GPG (2.4) und die Energie (2.10) umzuformen. Durch Einführen einer effektiven Wechselwirkungsstärke  $\tilde{g}(\mathbf{r})$  über

$$\begin{aligned} g[|\Phi(\mathbf{r})|^2\Phi(\mathbf{r}) + \tilde{m}(\mathbf{r})\Phi^*(\mathbf{r})] &= g \left[ 1 + \frac{\tilde{m}(\mathbf{r})}{\Phi^2(\mathbf{r})} \right] |\Phi(\mathbf{r})|^2\Phi(\mathbf{r}) \\ &= g \left[ 1 + \frac{\tilde{m}(\mathbf{r})}{n_c(\mathbf{r})} \right] n_c(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) \\ &= \tilde{g}(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.14)$$

lässt sich die GPG (2.4) in der kompakten Form

$$0 = \left[ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu + \tilde{g}(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r}) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

darstellen. Auch die Energiedispersion (2.10) lässt sich mit  $\tilde{g}(\mathbf{r})$  auf

$$E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \sqrt{\mathcal{L}^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - [\tilde{g}(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r})]^2} \quad (2.16)$$

umformen. Im folgenden werden die verschiedenen verwendeten Näherungen vorgestellt und diskutiert.

### 2.1.1. Das ideale Exzitonengas

Die drastischste Näherung besteht in der Vernachlässigung der Wechselwirkung und somit der Betrachtung der Exzitonen als ideales Gas. Dieses wird in Lehrbüchern der Statistik abgehandelt (siehe z.B. [2]). Für die folgenden Betrachtungen ist diese Näherung in zwei Fällen von Interesse. Zum einen verhalten sich die wechselwirkenden Exzitonen im Fall niedriger Dichte ( $\tilde{n}\lambda_T^3 \ll 1$ ; mit der thermischen Wellenlänge  $\lambda_T = [h/(2\pi mk_B T)]^{1/2}$ ) wie ein ideales Bosegas, zum anderen bietet sich das ideale Gas als Vergleichsfall für die Resultate mit Wechselwirkung an. Die Energie der idealen Exzitonen ist gegeben durch  $E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) =$

$p^2/2m + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu$ . Dadurch vereinfacht sich der Ausdruck für die thermische Dichte zu einem Integral über die Boseverteilung  $\tilde{n}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d^3\mathbf{p} n_B(\mathbf{p}, \mathbf{r}) / (2\pi\hbar)^3$ , welches bekanntermaßen mit Hilfe des Bose-Integrals  $g_\nu(z)$  und der thermischen Wellenlänge  $\lambda_T$  dargestellt werden kann,  $\tilde{n}(\mathbf{r}) = \lambda_T^{-3} g_{3/2}(z)$ . Hierbei wurde die Fugazität  $z = \exp(\beta\mu_{\text{eff}})$  mit  $\mu_{\text{eff}} = \mu - V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  verwendet. Die Dichte der kondensierten Exzitonen wird über die harmonische Näherung des Fallenpotentials im Minimum berechnet. Bei bekannten Fallenparametern lässt sich beim harmonischen dreidimensionalen Oszillatorpotential die Wellenfunktion des Kondensats analytisch berechnen und somit auch die entsprechende Dichte (für Details siehe z.B. [69]).

### 2.1.2. Thomas-Fermi-Näherung

Die Thomas-Fermi-Näherung (TFN) besteht in der Streichung des kinetischen Anteils der GPG ((2.4) bzw. (2.15)). Dadurch entsteht eine algebraische Gleichung zur Berechnung der Dichte der kondensierten Exzitonen

$$n_c(\mathbf{r}) = \frac{1}{\tilde{g}(\mathbf{r})} (\mu - V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - 2g\tilde{n}(\mathbf{r})) \Theta(\mu - V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - 2g\tilde{n}(\mathbf{r})). \quad (2.17)$$

Somit muss anstelle einer Differentialgleichung zweiter Ordnung lediglich eine algebraische Gleichung selbstkonsistent gelöst werden, da  $\tilde{g}(\mathbf{r})$  noch von  $n_c(\mathbf{r})$  abhängt (siehe Gleichung (2.14)). Die Verwendung dieser Näherung ist für hohe Exzitonenzahlen sinnvoll, da in solchen Fällen die potentielle Energie typischerweise deutlich größer ist als die kinetische Energie [65].

### 2.1.3. Popow-Näherung

Die sogenannte Popow-Näherung besteht in der Streichung der anomalen Dichten  $\tilde{m}(\mathbf{r})$ , somit gilt  $\tilde{g}(\mathbf{r}) = g$ . Entsprechend muss die Dichte der kondensierten Exzitonen über die GPG in der Form

$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu + gn_c(\mathbf{r}) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}) \right) \Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.18)$$

berechnet werden (siehe Gleichung (2.4)). Die Energie der thermischen Exzitonen ergibt sich dann über

$$E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \sqrt{\mathcal{L}^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - [gn_c(\mathbf{r})]^2} \quad (2.19)$$

und die entsprechende Dichte über Gleichung (2.11). Diese Form der Dichteberechnung stellt eine der betrachteten Näherungen, nämlich die Hartree-Fock-Bogoljubow-Popow-Näherung (HFBPN) dar. Wird zusätzlich auch noch die TFN angewendet, so entsteht eine weitere betrachtete Näherung, die HFBPN mit TFN. Hierbei ist zu beachten, dass in Gleichung (2.17)

$\tilde{g}(\mathbf{r})$  durch  $g$  ersetzt werden muss.

Das Energiespektrum der HFBP-Gleichungen ist im Gegensatz zu dem der HFB-Gleichungen *gapless* und erfüllt somit das Goldstone-Theorem [64]. Bei sehr tiefen Temperaturen  $T \ll T_{\text{krit}}$  kann jedoch  $\tilde{m}(\mathbf{r})$  von der gleichen Größenordnung wie  $n_c(\mathbf{r})$  sein und die Näherung ist nicht mehr anwendbar.

#### 2.1.4. G1/G2-Näherung

In der oben abgeleiteten GPG (2.15) und der Dispersion der Exzitonen (2.16) steht vor der Dichte der kondensierten Exzitonen die renormierte Wechselwirkungskonstante  $\tilde{g}(\mathbf{r})$  und vor der thermischen Dichte die Wechselwirkungskonstante  $g$ . Allerdings steht in der Gleichung für  $\mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  (2.9) vor beiden Dichten  $g$ . Die sogenannte G1-Näherung besteht nun darin, in Gleichung (2.9) die Wechselwirkungskonstante  $g$  vor der Dichte der kondensierten Exzitonen durch die renormierte Wechselwirkungskonstante  $\tilde{g}(\mathbf{r})$  zu ersetzen. Somit steht in dieser Näherung vor allen thermischen Dichten die Wechselwirkungskonstante  $g$  und vor allen kondensierten Exzitonendichten die renormierte Wechselwirkungsstärke  $\tilde{g}(\mathbf{r})$ . Um diese explizit ausrechnen zu können, muss die anomale Dichte  $\tilde{m}(\mathbf{r})$  berechnet werden. Innerhalb der Lokaldichtennäherung gilt [68]

$$\tilde{m}(\mathbf{r}) = -\tilde{g}(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r}) \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2n_B(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + 1}{2E(\mathbf{p}, \mathbf{r})} \Theta(\mathcal{L}^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - [\tilde{g}(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r})]^2). \quad (2.20)$$

Dieser Ausdruck ist aufgrund der  $+1$  im Zähler des Integranden formal divergent. Dies liegt allerdings an einer Doppelzählung der Hochenergieanteile und kann durch eine entsprechende Renormierung behoben werden [64]. Das Resultat dieser Überlegungen lässt sich durch Streichen der  $1$  im Integranden reproduzieren.

Die G2-Näherung besteht nun in der Annahme, dass alle Exzitonen, kondensiert oder nicht, die gleiche Wechselwirkung aufweisen sollten. Man ersetzt also „per Hand“ alle Wechselwirkungskonstanten  $g$  durch  $\tilde{g}(\mathbf{r})$ . Diese Näherungen stellen die Hartree-Fock-Bogoljubow-G1-Näherung (HFBG1N) bzw. die Hartree-Fock-Bogoljubow-G2-Näherung (HFBG2N) dar. Eine zusätzliche Anwendung der TFN liefert den vierten betrachteten Fall, die HFBG1N bzw. HFBG2N mit TFN.

Der Vorteil dieser Näherungen ist ein Energiespektrum ohne *gap*, trotz der (heuristischen) Berücksichtigung von  $\tilde{m}(\mathbf{r})$  [64].

## 2.2. Spektrum der Exzitonen im thermischen Gleichgewicht

Wie bereits erläutert, sind die experimentell zur Verfügung stehenden Messgrößen das Lumineszenzspektrum und davon abgeleitete Größen. Für ein homogenes exzitonisches System im

thermischen Gleichgewicht, welches an ein Bad von Phononen gekoppelt ist, haben Shi *et al.* in [72] einen Ausdruck für die spektrale Intensität angegeben:

$$I(\tilde{\omega}) = |S_{\mathbf{k}=0}|^2 N_c 2\pi \delta(\tilde{\omega}) + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} |S_{\mathbf{k}}|^2 n_B(\tilde{\omega}) A(\mathbf{k}, \tilde{\omega}). \quad (2.21)$$

Hierbei ist  $S_{\mathbf{k}}$  die vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  abhängige Exziton-Photon-Kopplung,  $n_B$  die Bose-Einstein-Verteilung,  $N_c$  die Exzitonenzahl im Kondensat und  $A(\mathbf{k}, \tilde{\omega})$  die Spektralfunktion [73]. Das Argument der Boseverteilung ist durch  $\hbar\tilde{\omega} = \hbar\omega_{\text{photon}} + \hbar\omega_{\text{phonon}} - \hbar\omega_{gX} - \mu$  mit der exzitonischen Bandlücke  $\hbar\omega_{gX}$  gegeben. Der erste Summand auf der rechten Seite von Gleichung (2.21) beschreibt den Beitrag von  $N_c$  kondensierten Exzitonen zum Lumineszenzspektrum eines homogenen Systems. Der Beitrag der thermischen Exzitonen besteht in der  $\mathbf{k}$ -Summe auf der rechten Seite.

Da die optische Wellenlänge wesentlich kleiner ist als die Ausdehnung der Exzitonenwolke, kann auch für das Spektrum eine Lokaldichtenäherung angewandt werden [34]. Es wird also angenommen, dass die Emission der Exzitonen lokal wie die eines homogenen Systems ist. Dadurch erhalten alle Größen eine zusätzliche Abhängigkeit vom Ort  $\mathbf{r}$ . Es ist sinnvoll, die Beiträge des Kondensats ( $I_K$ ) und der thermischen Exzitonen ( $I_T$ ) getrennt voneinander zu betrachten. In Lokaldichtenäherung gilt:

$$I_K(\mathbf{r}, \tilde{\omega}) = |S_{\mathbf{k}=0}|^2 n_c(\mathbf{r}) 2\pi \delta(\tilde{\omega}) \quad (2.22)$$

und

$$I_T(\mathbf{r}, \tilde{\omega}) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |S_{\mathbf{k}}|^2 n_B(\tilde{\omega}) A(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \tilde{\omega}), \quad (2.23)$$

mit  $I(\mathbf{r}, \tilde{\omega}) = I_K(\mathbf{r}, \tilde{\omega}) + I_T(\mathbf{r}, \tilde{\omega})$ . Die Spektralfunktion ist bestimmt durch [74]

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \tilde{\omega}) = 2\pi \left[ u^2(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \delta(\hbar\tilde{\omega} - E(\mathbf{k}, \mathbf{r})) - v^2(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \delta(\hbar\tilde{\omega} + E(\mathbf{k}, \mathbf{r})) \right] \quad (2.24)$$

mit den in Gleichung (2.13) definierten Bogoljubow-Amplituden  $u^2(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  und  $v^2(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ . Die Paraexzitonen zerfallen aufgrund der Bandstruktur direkt ohne die Beteiligung von Phononen. Ein solcher Prozess ist aufgrund der Energieerhaltung nur möglich, wenn sich die Dispersionskurven für Photonen und Exzitonen schneiden. Dieser Schnittpunkt ist gegeben durch den Wellenvektor  $\mathbf{k}_0$  mit  $|\mathbf{k}_0| = \omega_{gX} n_r / c = 30,208 \mu\text{m}^{-1}$  und es ist  $|S_{\mathbf{k}}|^2 = S_0 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ . Somit gilt  $\hbar\tilde{\omega} = \hbar\omega_{\text{photon}} - \hbar\omega_{gX} - \mu = \hbar\omega - \mu$ . Unter dieser Voraussetzung sollte ein Kondensat, welches bei  $\mathbf{k} = 0$  angesiedelt ist, überhaupt nicht zur Lumineszenz beitragen.

Da der genaue Wert des Übergangsmatrixelements  $S_0$  nicht bekannt ist und im Rahmen dieser Theorie auch nicht berechnet werden kann, werden im folgenden alle Konstanten in einer Normierung zusammengefasst und als Parameter verwendet. Die Lumineszenz der thermischen

Exzitonen lässt sich unter Ausnutzung der Deltafunktion in  $|S_{\mathbf{k}}|^2$  somit über

$$I_T(\mathbf{r}, \omega) \sim n_B(\hbar\omega - \mu) \left[ u^2(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \delta(\hbar\omega - \mu - E(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})) - v^2(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \delta(\hbar\omega - \mu + E(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})) \right] \quad (2.25)$$

darstellen. Experimentell sind nun prinzipiell zwei verschiedene Größen zugänglich. Zum einen das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum  $I(z, \omega)$  und zum anderen die räumlich aufgelöste Lumineszenz  $I(x, z)$ . Bei der Messung des  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektrums wird über die Tiefe der Probe ( $y$ -Richtung) integriert. Über die  $x$ -Richtung wird ebenfalls integriert, wobei jedoch zu beachten ist, dass der Spalt (Breite  $2\Delta x$ ) die Grenzen des Integrals festlegt. Bei der räumlich aufgelösten Lumineszenz wird hingegen mit vollständig geöffnetem Spalt über die Tiefe ( $y$ -Richtung) und die Energieachse ( $\omega$ ) vollständig integriert.

Zusätzlich zu diesen beiden verschiedenen Messmethoden muss noch die endliche Auflösung des Spektrographen und die Abbildungsfunktion des experimentellen Aufbaus in der Theorie berücksichtigt werden. Die Auflösung kann durch eine Faltung des Lumineszenzspektrums  $I(\mathbf{r}, \omega)$  mit einer Auflösungsfunktion  $h(\omega)$  simuliert werden. In selbige kann auch zusätzlich eine Ortsabhängigkeit geschrieben werden, um die Abbildungsfunktion symbolisch zu berücksichtigen. Die genaue Form dieser Abhängigkeit muss allerdings aus dem experimentellen Aufbau bestimmt werden. Damit ergeben sich die folgenden Ausdrücke für das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum

$$I(z, \omega) \sim \int_{-\Delta x}^{\Delta x} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\omega} h(\mathbf{r}, \omega - \bar{\omega}) I(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.26)$$

sowie die räumlich aufgelöste Lumineszenz

$$I(x, z) \sim \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\omega} h(\mathbf{r}, \omega - \bar{\omega}) I(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.27)$$

Im einfachsten Fall kann die Abbildung und die Auflösung durch eine einfache Gaußfunktion mit entsprechendem Breitenparameter  $\Delta$  beschrieben werden  $h(\mathbf{r}, \omega) = \exp[-(\omega/\Delta)^2]$ . Zur Untersuchung der zu erwartenden Signaturen ist diese simple Form ausreichend. Wenn es jedoch um einen expliziten Vergleich von Theorie und Experiment geht, muss  $h(\mathbf{r}, \omega)$  entsprechend den experimentellen Gegebenheiten gewählt werden.

Durch weitere Integrationen lassen sich abgeleitete Größen bilden, welche relevant für die weitere Beschreibung und Diskussion des Experiments sind. Von besonderem Interesse sind hier die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$ , die  $x$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(x)$ , das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  und die total integrierte Lumineszenz  $I$ .

## 2.3. Ergebnisse

Da als primäre Messgröße nur das Lumineszenzspektrum der Exzitonen zur Verfügung steht, müssen aus diesem Temperatur  $T$  und chemisches Potential  $\mu$  mittels eines geeigneten *fit*-Algorithmus' bestimmt werden. Zudem sollte sich das Auftreten einer BEK im Spektrum manifestieren. Es wird also zunächst untersucht, welche Signaturen ein solches Kondensat erzeugen würde. Anschließend wird der Einfluss verschiedener Faktoren (Wechselwirkungsstärke, Näherung, optische Abbildung,...) auf die Lumineszenzspektren im allgemeinen und speziell auf die Signaturen des Kondensates diskutiert. Auf der Grundlage dieser Erkenntnisse wird danach eine *fit*-Routine aufgestellt und getestet. Abschließend werden die Ergebnisse mit Bezug auf die experimentellen Resultate diskutiert.

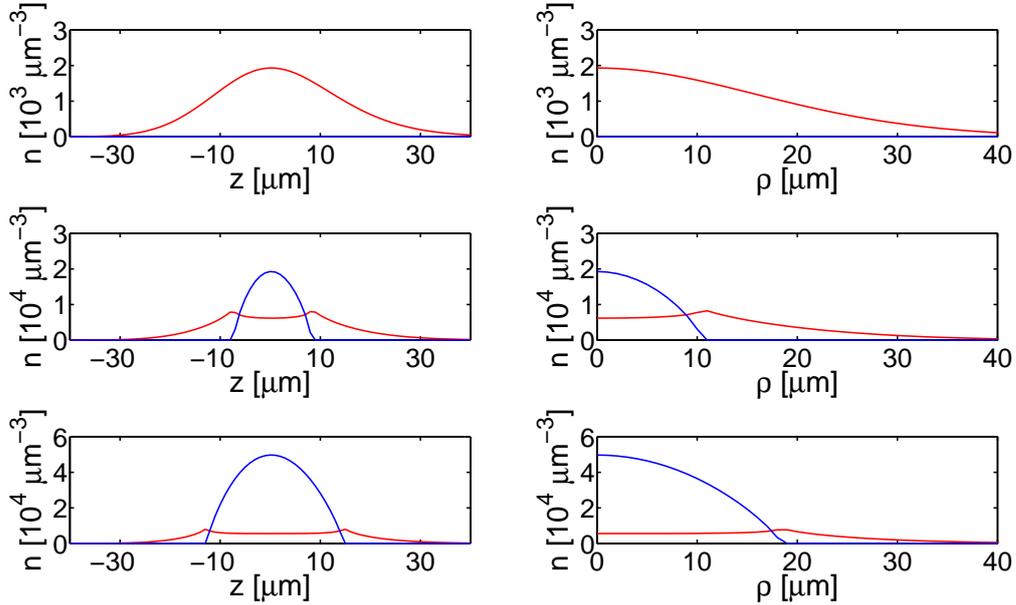
Für die numerischen Rechnungen werden aus den experimentellen Daten rekonstruierte Fallenpotentiale verwendet [75]. Die Wechselwirkungskonstante  $g$  ergibt sich unter Annahme von  $a_s = 2,1 a_X$  [43] zu  $g_{SC} = 5,62 \times 10^{-4} \mu\text{eV}\mu\text{m}^3$ .

### 2.3.1. Signaturen

Als Ausgangspunkt für die Diskussion der Signaturen eines Bose-Einstein-Kondensates im thermodynamischen Gleichgewicht dient die einfachste in Kapitel 2.1 betrachtete Näherung mit Wechselwirkung, die HFBPN mit zusätzlicher TFN. Innerhalb dieser Approximation müssen zur Berechnung der Dichten die Gleichungen (2.17) und (2.11) unter Berücksichtigung der Energiedispersion in (2.19) und  $\tilde{g}(\mathbf{r}) = g$  für jeden Punkt der Falle selbstkonsistent gelöst werden.

Die Dichteprofile variieren räumlich sowohl in  $z$ -Richtung als auch in  $\rho$ -Richtung ( $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ ). In Abbildung 2.1 sind daher Schnitte bei  $\rho = 0$  und  $z = 0$  dargestellt. In der ersten Reihe von Abbildung 2.1 ist ein typisches Dichteprofil für  $T > T_{\text{krit}}$  zu sehen. Beide Schnitte zeigen eine gaußartige Verteilung mit leicht asymmetrischen Anteilen der Flanken in  $z$ -Richtung. Mit zunehmender Dichte wächst im Zentrum der Falle der Kondensatsbeitrag heraus (mittlere Reihe). Die Wechselwirkung zwischen den Exzitonen führt bei existierendem Kondensat zu einer charakteristischen Deformation der Dichte der thermischen Exzitonen. Diese verformt sich zu einer Art Krater mit den für die TF-Näherung typischen Spitzen am Rand des Kondensats. Mit weiter zunehmender Dichte wird der Kondensatsbeitrag dominant (untere Reihe). Der Verlauf der Dichteprofile für andere Teilchenzahlen und Temperaturen weicht nicht qualitativ von den in 2.1 gezeigten typischen Resultaten ab.

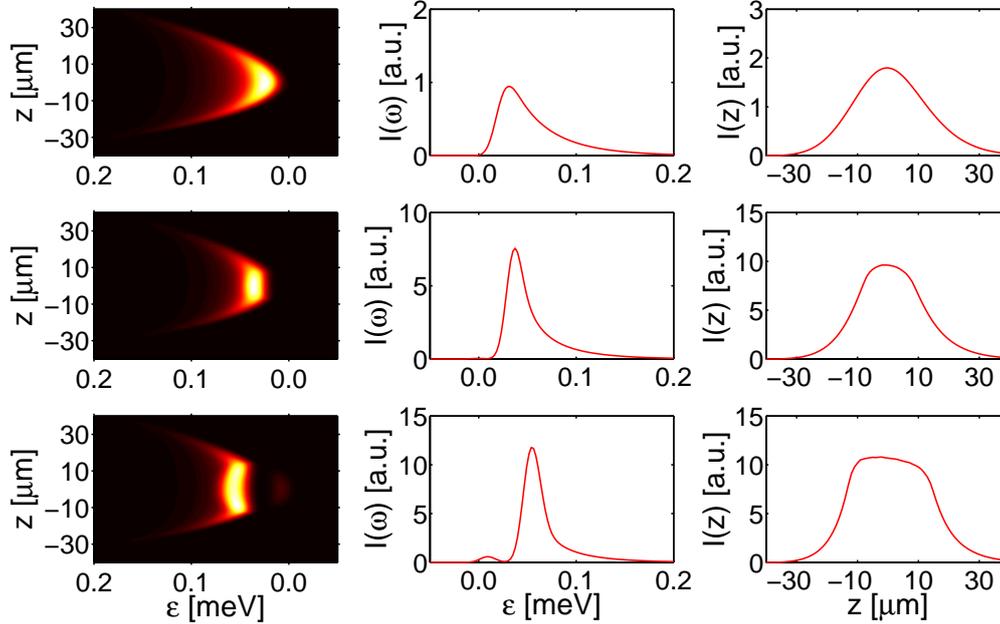
Berechnet man aus den in 2.1 gezeigten Dichteprofilen gemäß (2.26) das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum  $I(z, \omega)$ , das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  und die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$ , so erhält man die Resultate in Abbildung 2.2. Hierbei wurde angenommen, dass  $h(\mathbf{r}, \omega) = \exp[-(\hbar\omega/\Delta)^2]$  ist mit  $\Delta = 10 \mu\text{eV}$ . Da hier das Kondensat



**Abbildung 2.1.:** Dichteprofil der thermischen (rote Kurven) und der kondensierten Exzitonen (blaue Kurven) für  $n(z, \rho = 0)$  (linke Spalte) und  $n(z = 0, \rho)$  (rechte Spalte). Die Gesamteilchenzahlen sind  $N = 1,07 \times 10^8$  (erste Reihe),  $N = 4,33 \times 10^8$  (zweite Reihe) und  $N = 1,00 \times 10^9$  (dritte Reihe) bei  $T = 0,5$  K. Die Kondensatsfraktionen betragen von oben nach unten  $N_c/N = 0$ ,  $N_c/N = 0,07$  und  $N_c/N = 0,42$ .

nicht zur Lumineszenz beiträgt, bestehen alle Lumineszenzgrößen nur aus dem jeweils thermischen Anteil. Die  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektren in der ersten Spalte zeigen eine deutliche Signatur eines Kondensats. Während im oberen Bild ( $N_c/N = 0$ ) das Spektrum einer Parabel folgt (näherungsweise Form des renormierten Fallenpotentials), sieht man im mittleren ( $N_c/N = 0,07$ ) und im unteren Bild ( $N_c/N = 0,42$ ) eine deutliche Abweichung von dieser Form. Im mittleren Bild bildet sich eine flache Kante bei  $\varepsilon \approx \mu$  aus. Im unteren Bild wird diese zu höheren Energien durchgebogen. Ursache dieses Effekts ist der verwendete endliche Spalt. Bei vollständiger Öffnung des Spaltes in der Rechnung entsteht wieder eine flache Kante. Zudem tritt in dieser Abbildung der  $v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ -Anteil des Spektrums schwach hervor (siehe Gleichung (2.25)). Im entsprechenden räumlich integrierten Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  ist dieser zusätzliche Peak um  $\varepsilon = 0$  allerdings besser zu erkennen. Dieser Anteil des Spektrums ist ohne Kondensat stets Null und sein Auftreten signalisiert somit eindeutig die Existenz eines Kondensats.

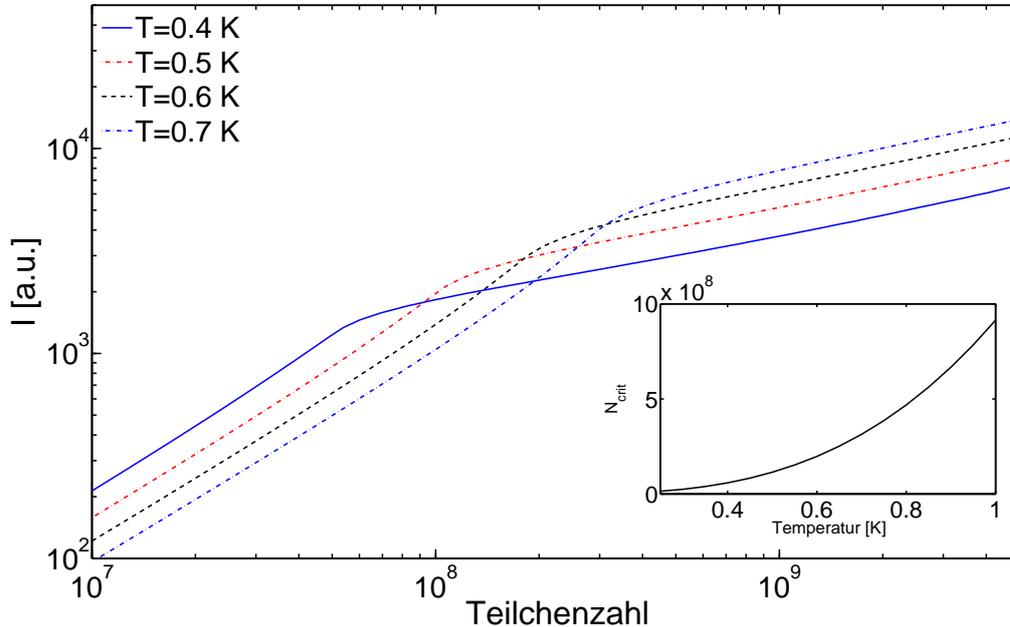
Auch die in der mittleren Spalte abgebildeten räumlich integrierten Lumineszenzspektren  $I(\omega)$  weisen deutlich Veränderungen mit steigender Dichte auf. Bei der niedrigsten Dichte (obere Reihe) folgt das Lumineszenzspektrum einer Maxwellverteilung, wie man es für ein nicht entartetes thermisches Gas erwarten würde. Nach Erhöhung der Teilchenzahl und dem Auftreten eines schwachen Kondensats wird die Kurve deutlich steiler und der Verlauf entspricht



**Abbildung 2.2.:** Dargestellt sind das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum  $I(z, \omega)$  (linke Spalte), das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  (mittlere Spalte) und die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  für die gleichen Teilchenzahlen und Temperaturen wie in Abbildung 2.1. Der Nullpunkt der Energieachse  $\varepsilon$  liegt im energetischen Minimum des Fallenpotentials.

einer Boseverteilung. Wie bereits erwähnt, tritt bei der höchsten Dichte (untere Reihe) zusätzlich der  $v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ -Term auf, welcher nur in einem kondensierten Fall vorhanden ist. Des Weiteren verschiebt sich das Maximum der Kurve bei steigender Teilchenzahl zu höheren Energien. Diese durch die Wechselwirkung bedingte Verschiebung bildet allerdings für sich genommen noch keine Signatur. Dies liegt an der Tatsache, dass die Verschiebung noch von der nicht exakt bekannten Wechselwirkungsstärke  $g$  abhängt und auch bei nichtkondensierten Systemen auftritt. In der letzten Spalte ist die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz dargestellt. Bei der niedrigen Dichte (obere Reihe) findet sich die erwartete asymmetrische Gaußkurve wieder. Beim Auftreten eines Kondensats wird die Spitze dieser Kurve zunehmend durch eine Abflachung deformiert. Es bildet sich mit steigender Kondensatsfraktion ein immer stärker ausgeprägtes Plateau. Diese Abweichung vom thermischen Fall stellt wiederum eine Signatur für ein Kondensat dar. Es gibt also in diesem Fall eine Vielzahl von möglichen Signaturen einer BEK in den verschiedenen Lumineszenzgrößen.

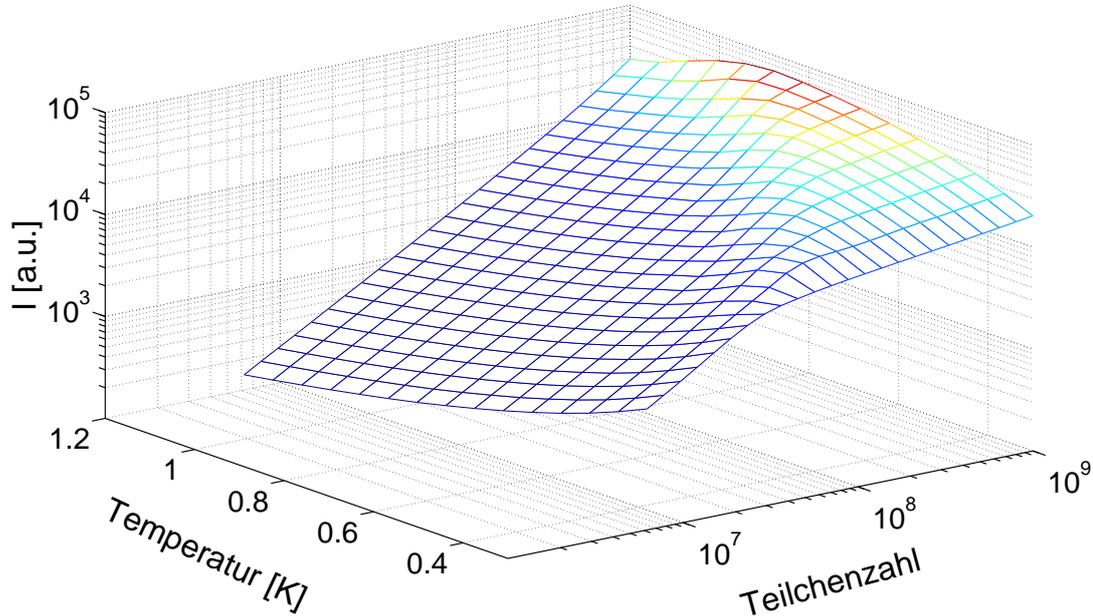
Betrachtet man zu verschiedenen festen Temperaturen  $T$  die total integrierte Lumineszenz  $I$  ( $I = \int d\omega I_T(\omega)$ ) als Funktion der Gesamtteilchenzahl  $N$ , so ergeben sich die in Abbildung 2.3 gezeigten Kurven. Bei allen Temperaturen steigt  $I$  mit der Teilchenzahl zunächst linear an. Ab einer bestimmten Teilchenzahl, welche für alle Temperaturen unterschiedlich ist, knickt der Graph jedoch ab, um mit einem anderen Anstieg fortzufahren. Die Position dieses Knicks ist die zur Temperatur  $T$  gehörige kritische Teilchenzahl  $N_{krit}$ . Da die kondensierten Exzitonen



**Abbildung 2.3.:** Total integrierte Lumineszenz  $I$  für verschiedene Temperaturen als Funktion der Gesamtteilchenzahl  $N$ . Die verwendeten Temperaturen sind  $T = 0,4$  K (blau),  $T = 0,5$  K (rot gestrichelt),  $T = 0,6$  K (schwarz gestrichelt) und  $T = 0,7$  K (blau gestrichelt). Die kleine eingebettete Grafik zeigt die Gesamtteilchenzahl beim Knick als Funktion der Temperatur  $T$ .

nicht zur Lumineszenz beitragen, knickt die total integrierte Lumineszenz nach Auftreten eines Kondensats ab. Die Position des Knicks in Abhängigkeit von der Temperatur ist in dem kleinen Einschub in Abbildung 2.3 dargestellt. Die kritische Teilchenzahl ist proportional zu  $T^3$  und entspricht somit dem vom idealen Gas erwarteten Verlauf in einer parabolischen Falle. Das Auftreten des Knicks in der total integrierten Lumineszenz  $I$  stellt somit eine weitere Signatur für eine BEK dar. In Anbetracht der experimentellen Situation ist jedoch davon auszugehen, dass eine Steigerung der Teilchenzahl um mehr als eine Größenordnung bei konstanter Temperatur nicht möglich ist. Die Erzeugung von höheren Exzitonenzahlen erfordert eine steigende Leistung des Anregungslasers und führt dadurch zur Aufheizung der Probe. Betrachtet man daher die total integrierte Lumineszenz als Funktion von  $N$  und  $T$ , so entsteht Abbildung 2.4. Je nachdem, wie sich  $T$  mit der Laserleistung (und somit  $N$ ) verändert, ist es möglich, den Knick zu überschreiten (Kondensation). Die Abhängigkeit der Temperatur von der Laserleistung muss daher experimentell sorgfältig geprüft werden.

Zusammenfassend lassen sich also eine Vielzahl von Signaturen der BEK angeben. Diese sind (i) die flache Kante der  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektren am chemischen Potential, (ii) das Auftreten eines zusätzlichen Beitrags zum Spektrum unterhalb des chemischen Potentials ( $v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ -Term aus (2.25)), (iii) die Bildung eines Plateaus in der  $z$ -aufgelösten Lumineszenz und (iv) das Abknicken der total integrierten Lumineszenz nach Eintreten der Kondensation.



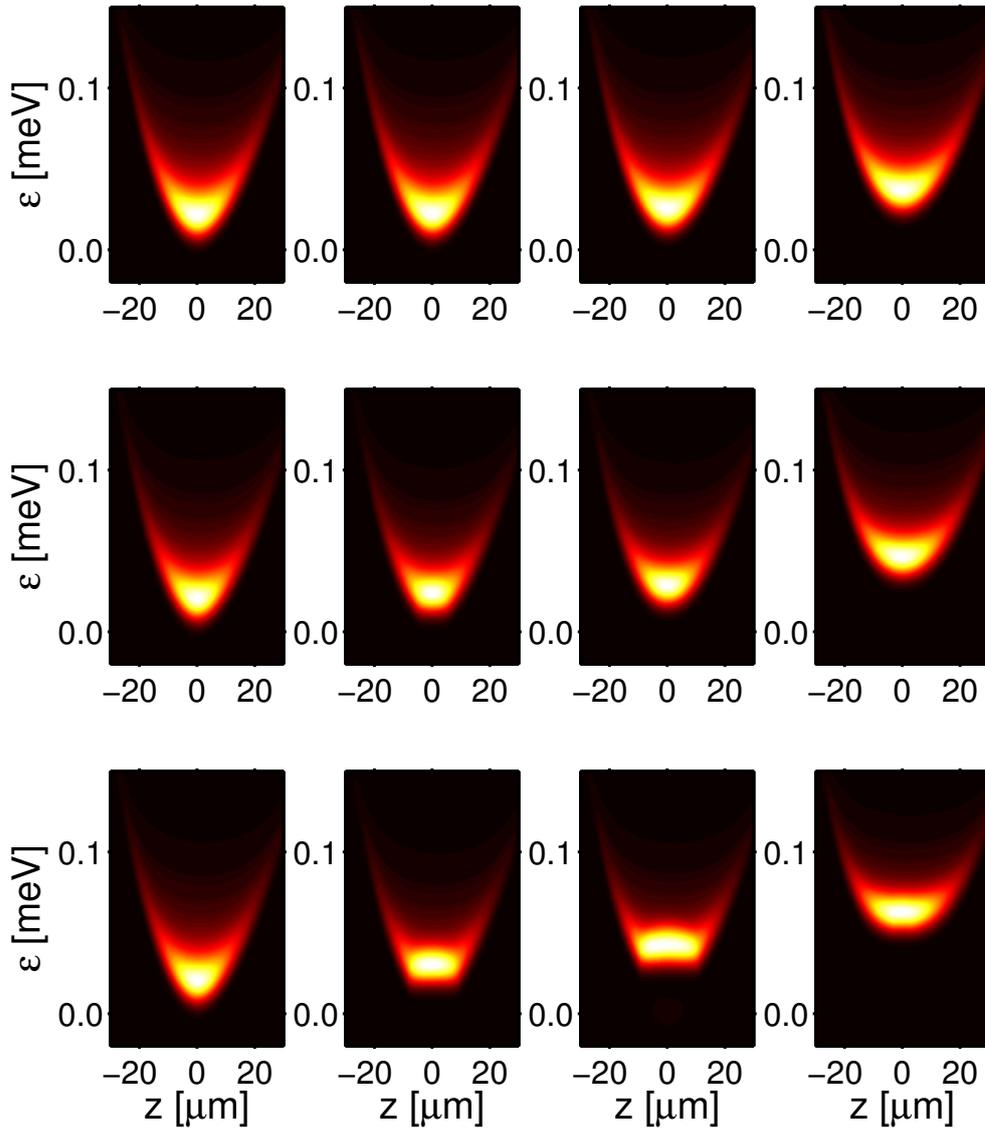
**Abbildung 2.4.:** Total integrierte Lumineszenz  $I$  als Funktion der Temperatur  $T$  und der Gesamtteilchenzahl  $N$ .

Im folgenden soll nun schrittweise untersucht werden, wie sich Änderungen in den Näherungen oder den verwendeten Parametern auf die gefundenen Signaturen auswirken.

### 2.3.2. Wechselwirkungsstärke

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, ob die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Exzitonen Einfluss auf die im vorangegangenen Abschnitt diskutierten Signaturen eines BEK hat und ob es möglich ist, die Wechselwirkungskonstante  $g$  aus experimentellen Messungen zu ermitteln.

Als Referenzwert wird die bisher benutzte Wechselwirkungsstärke  $g_{SC}$  verwendet ( $g_{SC} = 5,62 \times 10^{-4} \mu\text{eV}\mu\text{m}^3$ ). Davon ausgehend wird  $g$  zwischen  $g = 0$  (idealer Fall),  $g = g_{SC}/5$ ,  $g = g_{SC}$  und  $g = 5g_{SC}$  variiert. Für diese vier Fälle sind bei einer festen Temperatur und drei verschiedenen Gesamtteilchenzahlen die  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektren in Abbildung 2.5 dargestellt. Es lassen sich mehrere Effekte bei Variation der Wechselwirkungsstärke beobachten. Zum einen erhöht sich die kritische Teilchenzahl bei gleicher Temperatur mit steigender Wechselwirkung. Zum anderen bewirkt die Wechselwirkung eine Blauverschiebung der Spektren. Ein weitere bemerkenswerte Eigenschaft offenbart der Blick auf die wechselwirkungsfreien Spektren. Da im idealen Fall  $E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathcal{L}(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  und somit  $u^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = 1$  bzw.  $v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = 0$  gilt (siehe Gleichungen (2.10) und (2.13)), kann es keinen Beitrag des  $v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ -Terms unterhalb des chemischen Potentials geben (siehe Gleichung (2.25)). Somit folgt im idealen Fall



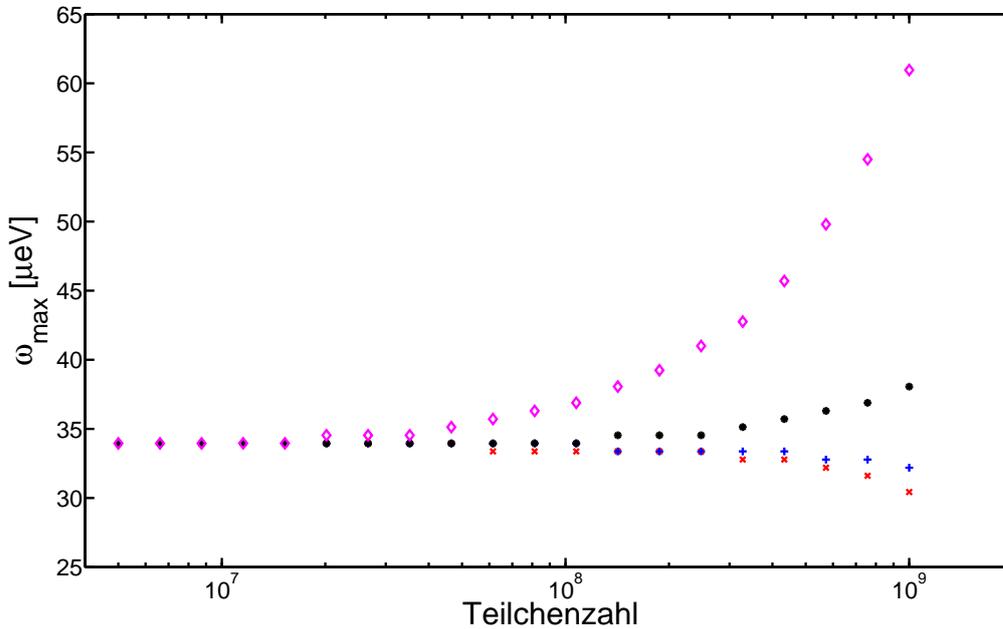
**Abbildung 2.5.:**  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektren  $I(z, \omega)$  für verschiedene Wechselwirkungsstärken. Dabei ist  $g = 0$  (linke Spalte),  $g = g_{SC}/5$  (zweite Spalte),  $g = g_{SC}$  (dritte Spalte) und  $g = 5g_{SC}$  (rechte Spalte). Die Zahl der Exzitonen sind  $N = 1,88 \times 10^8$  (erste Reihe),  $N = 3,28 \times 10^8$  (zweite Reihe) und  $N = 5,73 \times 10^8$  (dritte Reihe) bei einer Temperatur von  $T = 0,5$  K. Die Kondensatsfraktionen sind von oben nach unten:  $N_c/N = 0$ ;  $N_c/N = 0,2$  und  $N_c/N = 0,54$  (linke Spalte);  $N_c/N = 0$ ;  $N_c/N = 0,06$  und  $N_c/N = 0,36$  (zweite Spalte);  $N_c/N = 0$ ;  $N_c/N = 0,0002$  und  $N_c/N = 0,20$  (dritte Spalte);  $N_c/N = 0$ ;  $N_c/N = 0$  und  $N_c/N = 0,002$  (rechte Spalte).

die Energie  $E(0, \mathbf{r})$  aufgrund der fehlenden Renormierung durch die Wechselwirkung immer dem Fallenpotential und ist annähernd parabolisch. Das Spektrum verhält sich also immer wie im nichtkondensierten Fall. Bei vorhandener Wechselwirkung und Verwendung der TFN gilt aber durch die Renormierung des Fallenpotentials überall dort, wo Kondensat in der Falle existiert,  $E(0, \mathbf{r}) = 0$ . Dadurch entsteht die charakteristische flache Kante am chemischen Potential (siehe z.B. unterste Reihe zweites und drittes Bild). Somit unterscheidet sich das ideale Spektrum im kondensierten Fall entscheidend vom Spektrum mit Wechselwirkung. Abgesehen von diesem Unterschied hat die Wechselwirkung allerdings keinen Einfluss auf die qualitativen Signaturen aus Abschnitt 2.3.1.

Die zweite Frage in diesem Zusammenhang ist, ob sich aus experimentellen Resultaten eine Aussage über die Wechselwirkungskonstante  $g$  ableiten lässt. Es ist klar, dass sich die betreffenden Messungen nicht im Regime  $\tilde{n}\lambda_T^3 \ll 1$  abspielen dürfen, da hier das Verhalten quasi-ideal ist. Andererseits ist es zu diesem Zweck auch nicht sinnvoll, im Bereich der BEK nach Indizien für den Wert der Wechselwirkungsstärke zu suchen, da hier Effekte auftreten, welche die Form des Spektrums selbst radikal verändern und Vergleiche schwierig machen. Zudem treten bei sehr hohen Dichten andere Probleme hinzu. Dies sind der bereits erwähnte außerordentliche Zerfall der Exzitonen, welcher zu einer steigenden Dichte des umgebenden Elektron-Loch-Plasmas führt, ein möglicher Beitrag des Kondensats zur Lumineszenz und weitere Effekte. Es ist also in diesem Zusammenhang vielversprechend, Messungen im entarteten ( $\tilde{n}\lambda_T^3 \approx 1$ ) aber nicht kondensierten Regime anzustellen.

Es werden im folgenden zwei verschiedene Messgrößen untersucht: zum einen die energetische Position des Maximums des räumlichen integrierten Lumineszenzspektrums  $I(\omega)$  als Funktion der Teilchenzahl bei fester Temperatur und zum anderen die Ausdehnung der räumlich aufgelösten Lumineszenz  $I(x, z)$  in  $x$ - oder auch in  $z$ -Richtung bei fester Teilchenzahl und steigender Temperatur. Die Wechselwirkungsstärke selbst wird für die vier verschiedenen Fälle wie zuvor betrachtet.

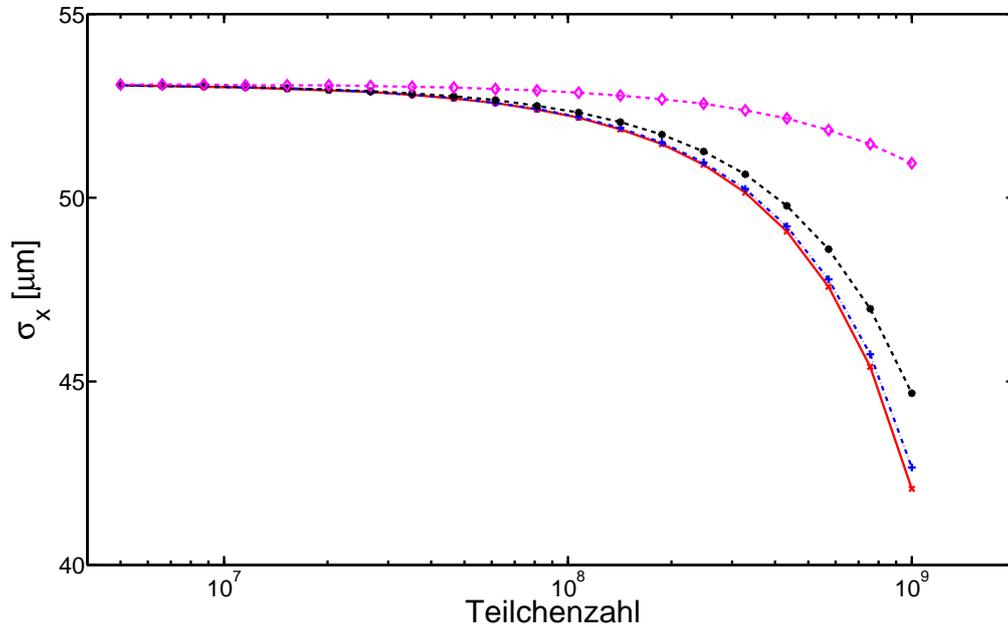
Wie man bereits in Abbildung 2.5 gut erkennen kann, führt die Wechselwirkung zu einer Blauverschiebung der Spektren. Allerdings spiegeln die dargestellten Fälle eine sehr hohe Dichte von Exzitonen und sogar Kondensate wider. Wie oben bereits erwähnt, eignen sich diese Situationen jedoch wenig, um quantitative Aussagen über die Wechselwirkungsstärke zu gewinnen. In Abbildung 2.6 ist daher die Verschiebung des spektralen Maximums als Funktion der Gesamtteilchenzahl bei fester Temperatur  $T = 0,9$  K für verschiedenen Wechselwirkungsstärken dargestellt. Im System tritt dabei keine Kondensation, aber ein deutlicher Einfluss der Wechselwirkung auf. Im wechselwirkungsfreien Fall würde eine Rotverschiebung stattfinden, welche durch die Wechselwirkung abgeschwächt bzw. in eine Blauverschiebung umgewandelt wird. Die eigentliche Verschiebung des Maximums ist somit die Differenz zwischen der idealen und der entsprechenden Kurve mit Wechselwirkung und nicht die Differenz zum ersten Punkt der Messung. Prinzipiell könnte man also versuchen, die Verschiebung des Maximums zu messen und anschließend über eine Vergleichsrechnung die Wechselwirkungsstärke  $g$  zu



**Abbildung 2.6.:** Position des Maximums des räumlich integrierten Lumineszenzspektrums  $I(\omega)$  als Funktion der Gesamtteilchenzahl  $N$  bei fester Temperatur  $T = 0,9$  K und verschiedenen Wechselwirkungsstärken. Dargestellt sind  $g = 0$  (rote Andreaskreuze),  $g = g_{SC}/5$  (blaue Kreuze),  $g = g_{SC}$  (schwarze Kreise) und  $g = 5g_{SC}$  (magenta Rauten).

bestimmen. Allerdings ist es experimentell schwierig, die Temperatur bei einer über mehrere Größenordnungen ansteigenden Teilchenzahl konstant zu halten. Falls sich die Exzitonen also erwärmen sollten, führt dies zu einem Anstieg der spektralen Position mit  $k_B T$ . Bei einer Verschiebung des spektralen Maximums gibt es somit drei miteinander konkurrierende Effekte: eine Blauverschiebung bei steigender Temperatur, eine Rotverschiebung bei steigender Teilchenzahl (steigendem chemischem Potential) sowie eine Blauverschiebung durch die Wechselwirkung. Eine Bestimmung von  $g$  über diesen Weg scheint somit nicht erfolgversprechend.

Als zweite Größe wird die Ausdehnung der thermischen Wolke untersucht. Hierzu kann die räumlich aufgelöste Lumineszenz  $I(x, z)$  in  $x$ - oder in  $z$ -Richtung betrachtet werden. Im folgenden wird exemplarisch die Ausdehnung bzw. Breite der thermischen Wolke in  $x$ -Richtung verwendet. Als Breite  $\sigma_x$  wird der Abstand der Punkte halber Höhe (*FWHM*) in  $x$ -Richtung bei  $z = 0$  verwendet. Des Weiteren können entweder die Teilchenzahl oder die Temperatur konstant gehalten und die jeweils andere Größe variiert werden. Die Ergebnisse für eine feste Temperatur  $T = 0,9$  K und wachsende Teilchenzahl sind in Abbildung 2.7 dargestellt. Wie in der Abbildung gut zu erkennen ist, verändert die Wechselwirkungsstärke  $g$  den Abfall der Breite  $\sigma_x$  mit der Teilchenzahl. Auch der umgekehrte Fall mit fester Teilchenzahl und steigender Temperatur (nicht dargestellt) zeigt einen eindeutigen Zusammenhang von Breite und Wechselwirkungsstärke  $g$ . Mittels einer Vergleichsrechnung sollte es demnach möglich

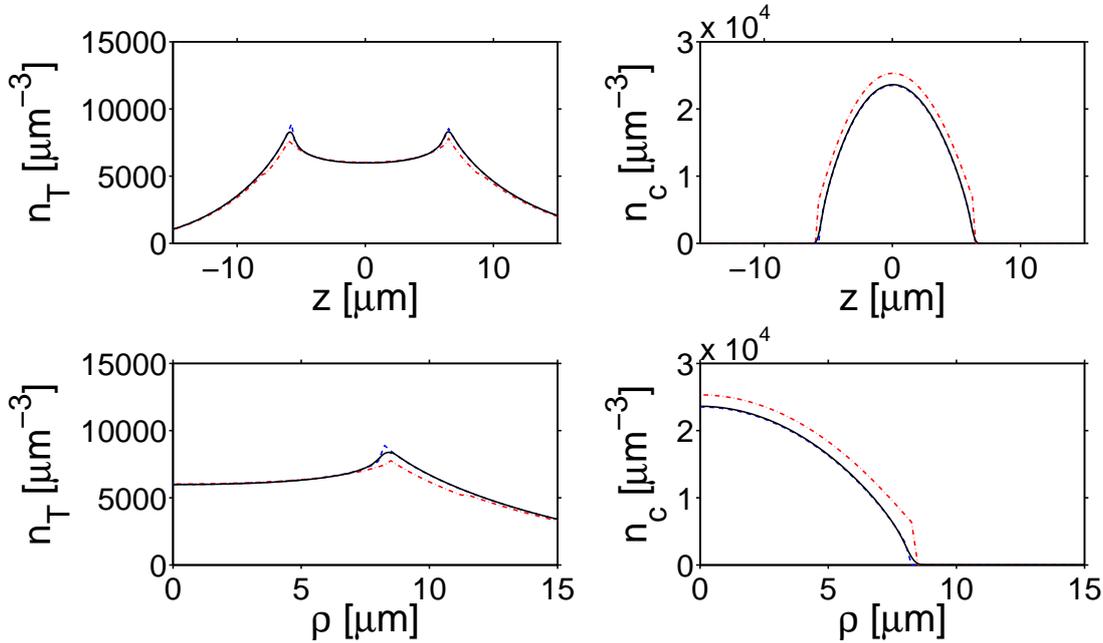


**Abbildung 2.7.:** Breite  $\sigma_x$  (*FWHM*) der räumlich aufgelösten Lumineszenz  $I(x, z)$  bei  $z = 0$  und fester Temperatur  $T = 0,9$  K für steigende Teilchenzahl und verschiedene Wechselwirkungsstärken  $g$  (Werte für  $g$  und Farben/Symbole wie in Abbildung 2.6).

sein, aus entsprechenden experimentellen Werten über beide Methoden  $g$  zu rekonstruieren. Aufgrund der möglichen Aufheizung der Probe durch steigende Leistung des Anregungslasers ist jedoch die Variante mit fester Teilchenzahl (feste Laserleistung) und variiertem Temperatur zu bevorzugen. Falls es nämlich durch die steigende Laserleistung zur Aufheizung der Probe kommen sollte, findet eine Überlagerung beider Effekte statt. Dies würde den Anstieg der Kurve in Abbildung 2.7 verändern und dadurch das Resultat verfälschen. Somit besteht die aussichtsreichste Möglichkeit einer experimentellen Bestimmung der effektiven Wechselwirkungsstärke in der Messung der Ausdehnung der thermischen Wolke bei fester Teilchenzahl und variiertem Temperatur mit anschließender Vergleichsrechnung zur Rekonstruktion der Wechselwirkungsstärke  $g$ .

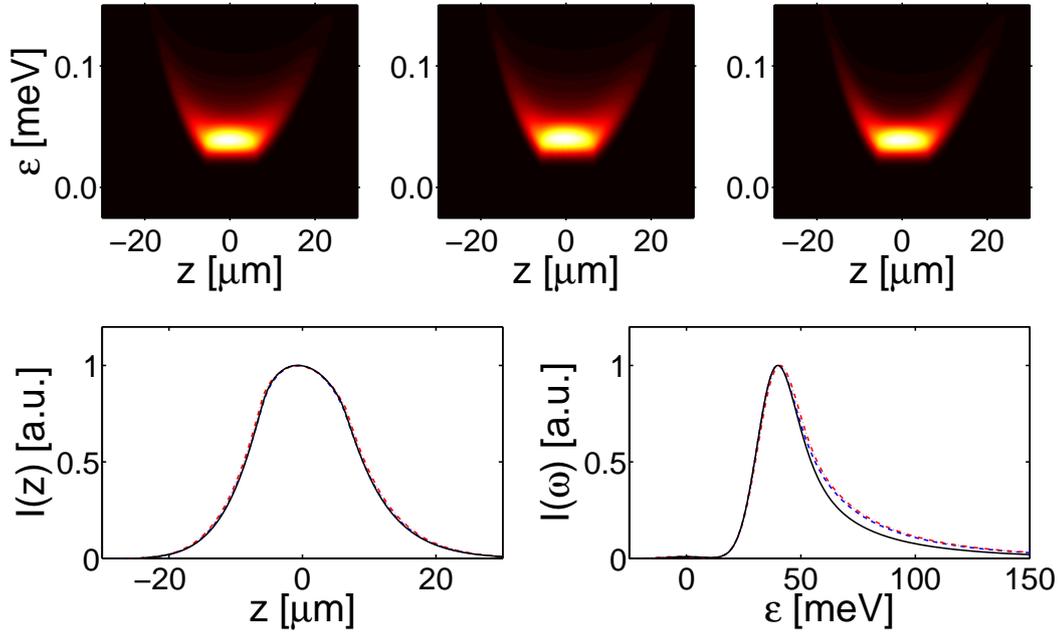
### 2.3.3. Näherungen

In diesem Abschnitt soll der Einfluss der verschiedenen Näherungen auf Dichteverteilung und Spektrum untersucht werden (siehe Abschnitt 2.1). Hierzu werden drei verschiedene Modelle zur Berechnung der Dichteverteilung in der Falle miteinander verglichen. Als erste Möglichkeit steht die bereits in den vorangegangenen Abschnitten benutzte Hartree-Fock-Bogoljubow-Popow-Näherung (HFBN) unter Verwendung der Thomas-Fermi-Näherung (TFN) zur Verfügung. Als Alternative dazu kann die TFN weggelassen und die Berechnung innerhalb der



**Abbildung 2.8.:** Dichte der thermischen (linke Spalte) und der kondensierten Exzitonen (rechte Spalte) in verschiedenen Näherungen. Dargestellt ist die Dichte als Schnitt für  $\rho = 0$  als Funktion von  $z$  (obere Reihe) und als Schnitt bei  $z = 0$  als Funktion von  $\rho$  (untere Reihe). Die betrachteten Näherungen sind die HFBPN mit TFN (blaue, gestrichelte Kurve), die HFBPN ohne TFN (schwarze, durchgezogene Kurve) sowie die HFBG2N mit TFN (rote, strichpunktierte Kurve). Die Gesamtteilchenzahl beträgt  $N = 1,67 \times 10^8$  bei einer Temperatur von  $T = 0,5$  K. Die Kondensatsfraktionen sind in den verschiedenen Näherungen  $N_c/N = 0,115$  (HFBPN mit TFN),  $N_c/N = 0,116$  (HFBPN ohne TFN) sowie  $N_c/N = 0,147$  (HFBG2N mit TFN).

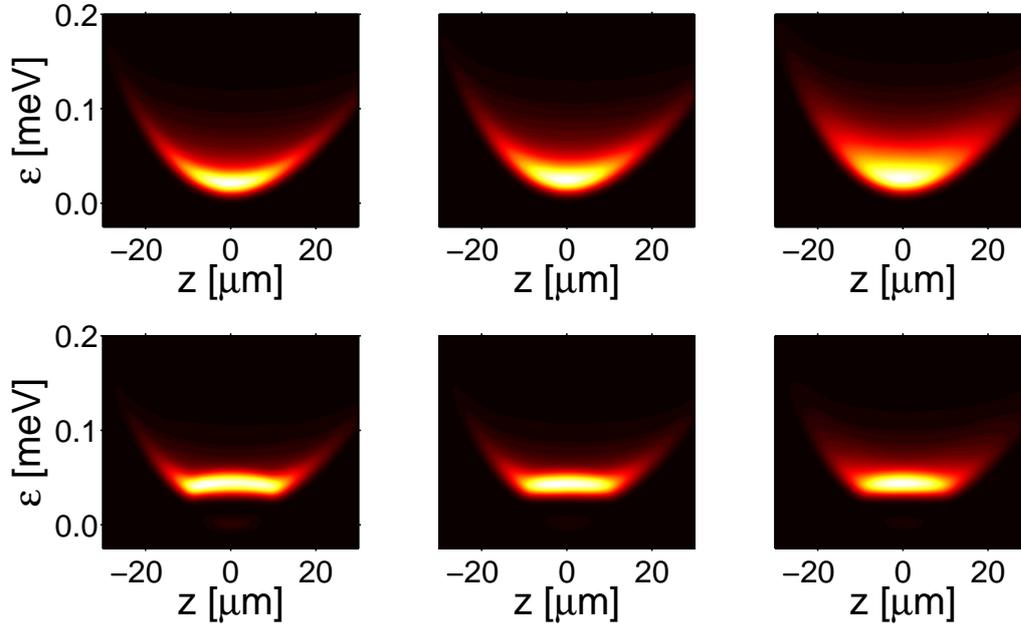
HFBPN durchgeführt werden. Als dritte Möglichkeit wird die Dichte innerhalb der HFBG2N unter Verwendung der TFN berechnet. Es sei daran erinnert, dass oberhalb der kritischen Temperatur alle diese Näherungen in die gleichen Ausdrücke übergehen. Eine Diskussion der verschiedenen Näherungen ist also nur für solche Paare von  $N$  und  $T$  sinnvoll, bei denen ein Kondensat vorhanden ist. Exemplarisch sind die Ergebnisse der Dichteberechnung für  $T = 0,5$  K und  $N = 1,67 \times 10^8$  in Abbildung 2.8 dargestellt. Beide auf die TFN zurückgreifende Näherungen produzieren eine abrupt verschwindende Kondensatsdichte  $n_c$ , wohingegen der Übergang ohne die TFN stetig verläuft. Dieses Verhalten spiegelt sich auch bei den thermischen Dichten wider. Es ist klar zu erkennen, wie die für die TFN charakteristischen Spitzen in der HFBPN abgerundet werden. Es ist weiterhin zu bemerken, dass die Unterschiede im Verlauf der thermischen Dichte auf die Umgebung des verschwindenden Kondensats beschränkt sind. Ausserhalb dieses Raumbereichs ist die thermische Dichte für alle betrachteten Näherungen nahezu gleich. Anders verhält es sich bei der Dichte der kondensierten Exzitonen. Die Mitnahme der anomalen Dichten in der G2-Näherung hat offenbar eine Erhöhung der Dichte der kondensierten Exzitonen zur Folge. Dies wird auch anhand der Kondensatsfraktionen deutlich. Bei gleicher Temperatur und Gesamtteilchenzahl ist die Kondensatsfraktion für die HFBG2N



**Abbildung 2.9.:**  $z$ -aufgelöstes Lumineszenzspektrum (obere Reihe), räumlich integrierte Lumineszenz  $I(\omega)$  (unten rechts) und die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz für die gleichen Näherungen und Parameter wie in Abbildung 2.8. In der oberen Reihe sind von links nach rechts jeweils das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum für die HFBPN mit TFN, die HFBG2N mit TFN sowie die HFBPN dargestellt. Entsprechend finden sich in den unteren Bildern die Resultate für die HFBPN mit TFN (blaue, gestrichelte Kurve), die HFBPN ohne TFN (schwarze, durchgezogene Kurve) sowie die HFBG2N mit TFN (rote, strichpunktierte Kurve).

mit  $N_c/N = 0,147$  deutlich höher als in den anderen beiden Näherungen ( $N_c/N = 0,115$  bzw.  $N_c/N = 0,116$ ). Es ist hier wichtig festzuhalten, dass die einfachste Näherung, die HFBPN mit TFN, die kleinste Kondensatsfraktion vorhersagt. Wenn es also mit Hinblick auf die Experimente um die Vorhersage von kritischen Teilchenzahlen geht, so stellt diese Näherung eine obere bzw. für die kritische Temperaturen eine untere Grenze dar.

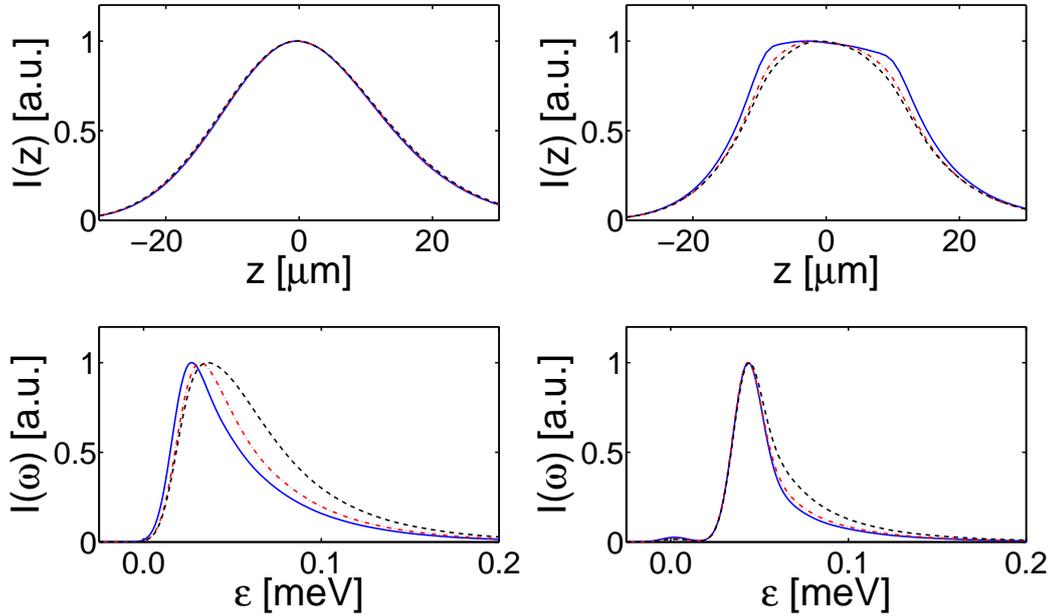
Aus den berechneten Dichten lassen sich die verschiedenen Lumineszenzspektren berechnen. Die zu den Dichten in Abbildung 2.8 gehörigen Spektren sind in Abbildung 2.9 dargestellt. Wie man an den  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektren in der oberen Reihe von Abbildung 2.9 gut erkennen kann, haben die verschiedenen Näherungen keinen sichtbaren Einfluss auf das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum  $I(z, \omega)$ . Gleiches gilt für die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$ , welche für alle Näherungen identisch ist. Lediglich bei dem räumlich integrierten Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  wird ein Unterschied im Abfall der hochenergetischen Flanke sichtbar. Es ist also festzuhalten, dass die verschiedenen Näherungen nur kleine Unterschiede in der Dichte und so gut wie keine Unterschiede im Spektrum aufweisen. Die Signaturen des Kondensats, wie sie in Abschnitt 2.3.1 diskutiert wurden, sind nicht abhängig von der verwendeten Näherung.



**Abbildung 2.10.:**  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektren für  $T = 0,5$  K und eine Gesamtteilchenzahl von  $N = 1,07 \times 10^8$  (obere Reihe) bzw.  $N = 5,73 \times 10^8$  (untere Reihe). Die Spaltgröße  $2\Delta x$  ist von links nach rechts  $2\Delta x = 10; 30; 50$   $\mu\text{m}$ . Die Kondensatsfraktionen sind  $N_c/N = 0$  (obere Reihe) und  $N_c/N = 0,195$  (untere Reihe).

### 2.3.4. Optische Abbildung und Verbreiterungen

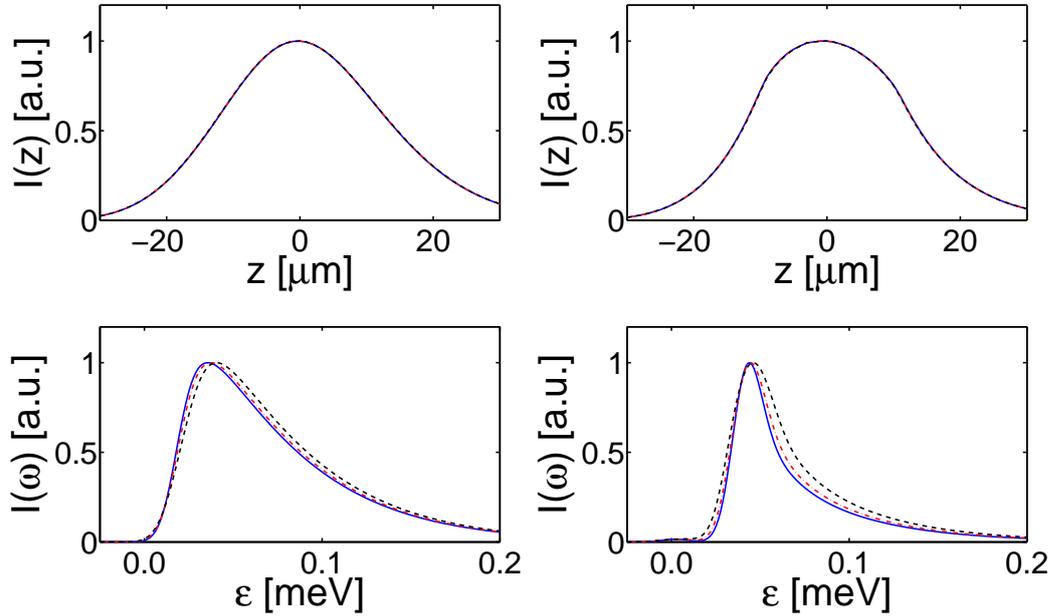
Im folgenden Abschnitt soll es darum gehen, die Veränderung der Lumineszenz durch verschiedene Einflüsse auf die Spektralfunktion, die optische Abbildung und eine veränderte Exziton-Photon-Kopplung zu untersuchen. Wie bereits erwähnt, muss die Funktion  $h(\mathbf{r}, \omega)$  in Gleichung (2.26) bzw. (2.27) so gewählt werden, dass die experimentell verwendete optische Abbildung reproduziert wird. Der Einfluss von  $h(\mathbf{r}, \omega)$  auf die Spektren ist sehr groß. Um dies zu demonstrieren, wird für  $h(\mathbf{r}, \omega) = \exp(-[\hbar\omega/\Delta]^2)$  gewählt und somit lediglich die endliche Auflösung des Spektrographen simuliert. Wie in Abbildung 2.10 sichtbar, kann selbst in diesem einfachen Fall durch Variation der Spaltweite  $2\Delta x$  das resultierende Spektrum deutlich verändert werden. Obwohl die physikalischen Parameter Temperatur und Gesamtteilchenzahl in der jeweils oberen und unteren Reihe konstant sind, ändert sich das Spektrum sichtbar. Im nichtkondensierten Fall (obere Reihe) schnürt sich das Spektrum bei kleiner werdendem Spalt scheinbar zusammen (von rechts nach links). Dabei wird das Spektrum bei hohen Energien deutlich sichelförmiger. Im kondensierten Fall sieht man, wie bei kleiner werdendem Spalt die flache untere Kante nach oben ausgebeult wird. Auch das in Abbildung 2.11 dargestellte räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  sowie die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  können durch den Spalt beeinflusst werden. Bei kleiner werdendem Spalt verläuft der Abfall der Hochenergieflanke des räumlich integrierten Lumineszenzspektrums  $I(\omega)$  immer steiler und die Vertei-



**Abbildung 2.11.:**  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  (obere Reihe) und räumlich integriertes Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  (untere Reihe) für die gleichen Parameter wie in Abbildung 2.10. Die linke (rechte) Spalte entspricht der oberen (unteren) Reihe aus Abbildung 2.10. Die verwendeten Spaltgrößen sind wiederum  $2\Delta x = 10 \mu\text{m}$  (blau durchgezogen),  $2\Delta x = 30 \mu\text{m}$  (rot gestrichpunktet) und  $2\Delta x = 50 \mu\text{m}$  (schwarz gestrichelt).

lung an sich wird schmaler. Zusätzlich verschiebt sich im nichtkondensierten Fall die Position des Maximums. Betrachtet man die Entwicklung der räumlich integrierten Lumineszenzspektren  $I(\omega)$  für eine steigende Teilchenzahl, so sind ein Schmalwerden der Verteilung und eine Verschiebung des Maximums Indizien für zunehmende Exzitonenzahlen (siehe Abbildung 2.2 bzw. 2.6). Fatalerweise spiegelt der sich verkleinernde Spalt eine analoge Entwicklung wider. Ebenso könnte z.B. der durch den Spalt veränderte Abfall der Hochenergieflanke zur Bestimmung einer falschen Temperatur führen. Andererseits hat der Spalt im nichtkondensierten Fall keinen Einfluss auf die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  (obere Reihe links). Dies ist im Fall mit Kondensat (obere Reihe rechts) nicht der Fall. In diesem Fall verstärkt der kleine Spalt sogar die zu erwartende Plateaubildung. Es ist also von großer Wichtigkeit, die Eigenschaften der optischen Abbildung genau zu kennen, bevor man versucht, die physikalischen Parameter aus den Spektren zu rekonstruieren.

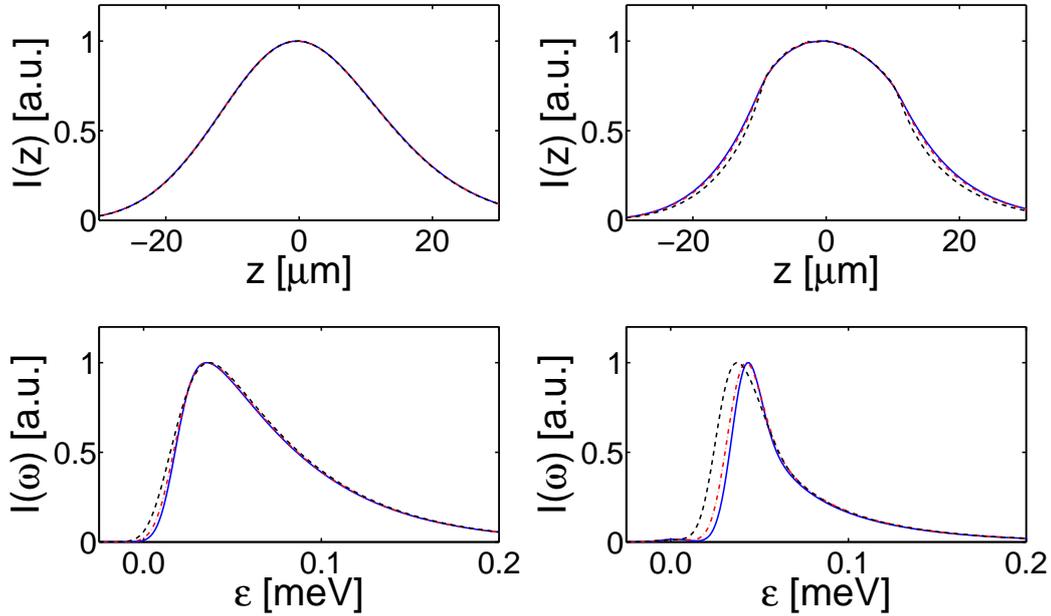
Zur Ableitung der Formel für das Lumineszenzspektrum wurden zwei wichtige Annahmen gemacht. Zum einem sollte die Exziton-Photon-Kopplung deltaförmig sein,  $|S(\mathbf{k})|^2 = S_0\delta(k - k_0)$ , und zum anderen sollte die Spektralfunktion durch (2.24) gegeben sein. Aufgrund der endlichen Ausdehnung des Systems wird aber die  $\mathbf{k}$ -Auswahlregel in  $|S(\mathbf{k})|^2$  aufgeweicht. Zusätzlich führt der Auger-Effekt zum entstehen eines Elektron-Loch-Plasmas, welches die Exzitonenzustände dämpft und somit zur Aufweitung der Spektralfunktion führt. Im folgenden



**Abbildung 2.12.:**  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  (obere Reihe) und räumlich integriertes Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  (untere Reihe) für  $T = 0,5$  K und eine Gesamtteilchenzahl von  $N = 1,07 \times 10^8$  (linke Spalte) bzw.  $N = 5,73 \times 10^8$  (rechte Spalte). Bei vollständig geöffnetem Spalt werden verschiedene Verbreiterungen  $\Delta k$  der Exziton-Photon-Kopplung  $S(\mathbf{k})$  betrachtet. Es sind  $\Delta k = 5 \mu\text{m}^{-1}$  (blau durchgezogen),  $\Delta k = 15 \mu\text{m}^{-1}$  (rot punkt-strich) und  $\Delta k = 25 \mu\text{m}^{-1}$  (schwarz gestrichelt).

soll daher der Einfluss der Aufweichung der  $\mathbf{k}$ -Auswahlregel in  $|S(\mathbf{k})|^2$  sowie der Einfluss von gedämpften Exzitonenzuständen in der Spektralfunktion untersucht werden. Hierzu werden die deltaförmigen Kopplungen durch entsprechende Lorentzkurven ersetzt. Anzumerken ist, dass diese Effekte hier nur heuristisch eingeführt werden. Eine strenge theoretische Beschreibung erfordert z.B. die Berücksichtigung von Exziton-Ladungsträger-Wechselwirkung sowie eine verbesserte Theorie der Lumineszenz. Zum Vergleich werden die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  und das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  betrachtet. Die Ergebnisse für die Aufweichung der  $k$ -Auswahlregel in der Exziton-Photon-Kopplung ist in Abbildung 2.12 dargestellt. Im Fall der  $z$ -aufgelösten Lumineszenz (obere Reihe) lässt sich weder im kondensierten noch im nichtkondensierten Fall ein Unterschied für die verschiedenen Verbreiterungen feststellen. Lediglich bei dem räumlich integrierten Lumineszenzspektrum gibt es Abweichungen. Diese beschränken sich aber im wesentlichen auf eine kleine Verschiebung des Maximums sowie eine allgemeine Verbreiterung der Kurve. Dieser Effekt könnte auch mit einer geänderten Auflösung reproduziert werden.

Der Einfluss der gedämpften Exzitonenzustände führt zu ähnlichen Ergebnissen wie in Abbildung 2.13 dargestellt ist. Wiederum ist die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz unverändert (nicht-kondensierter Fall) bzw. nur leicht verändert (kondensierter Fall). Im räumlich integrierten Lumineszenzspektrum wird wieder eine Verschmierung bzw. Verschiebung des Maximums sicht-



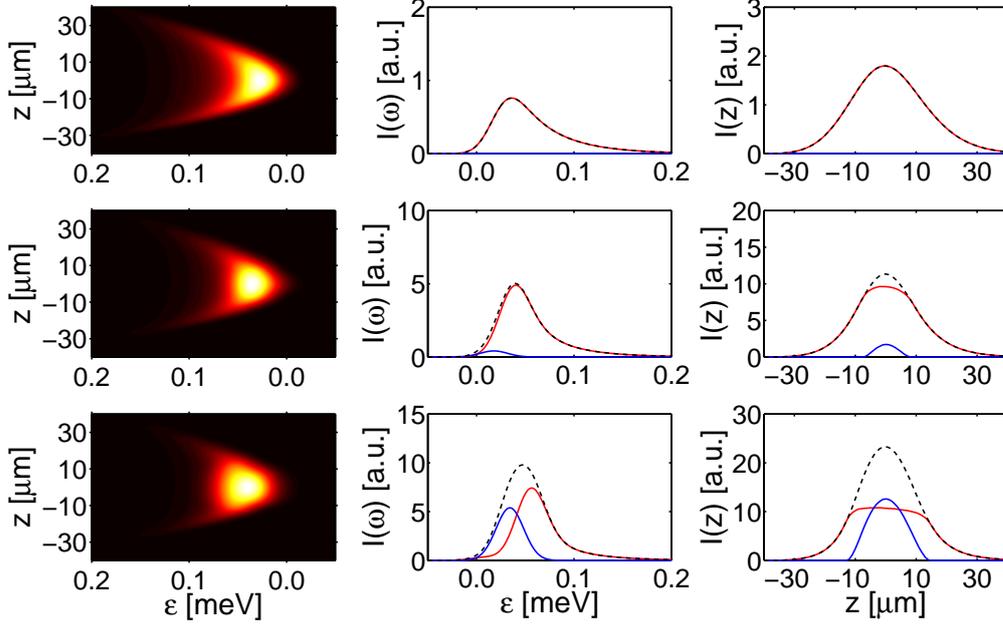
**Abbildung 2.13.:**  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  (obere Reihe) und räumlich integriertes Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  (untere Reihe) für  $T = 0,5$  K und eine Gesamtteilchenzahl von  $N = 1,07 \times 10^8$  (linke Spalte) bzw.  $N = 5,73 \times 10^8$  (rechte Spalte). Bei vollständig geöffnetem Spalt werden verschiedene Verbreiterungen  $\Delta E$  der Spektralfunktion  $A(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  betrachtet. Es sind  $\Delta E = 5 \mu\text{eV}$  (blau durchgezogen),  $\Delta E = 15 \mu\text{eV}$  (rot gestrichpunktet) und  $\Delta E = 25 \mu\text{eV}$  (schwarz gestrichelt).

bar. Es ist also möglich, Effekte dieser Art über die Auflösung des Spektrographen zu simulieren.

Es stellt sich abschließend die Frage, wie stark diese hier gezeigten Effekte in einem Experiment sein könnten. Die Dichte des Elektron-Loch-Plasmas steigt, wegen des Auger-Effekts, mit der Dichte der Exzitonen an. Bei Experimenten in Diamant wurde nachgewiesen, dass die Dichte des Elektron-Loch-Plasmas bis auf ein Zehntel der Exzitonendichte ansteigen kann [76]. Rechnungen zeigen, dass dies einer Verbreiterung von wenigen  $\mu\text{eV}$  entspricht [77]. Somit liegt dieser dichteabhängige Wert in der gleichen Größenordnung wie die Auflösung des Spektrographen  $\Delta$  selbst. Wie bereits zuvor angemerkt, können diese Effekte aber durch eine angepasste Auflösung simuliert werden. Für Vergleiche mit experimentellen Daten ist es also sinnvoll, statt der Auflösung des Spektrographen einen variablen Parameter zu verwenden, welcher durch die tatsächliche Auflösung des Spektrographen nach unten begrenzt wird.

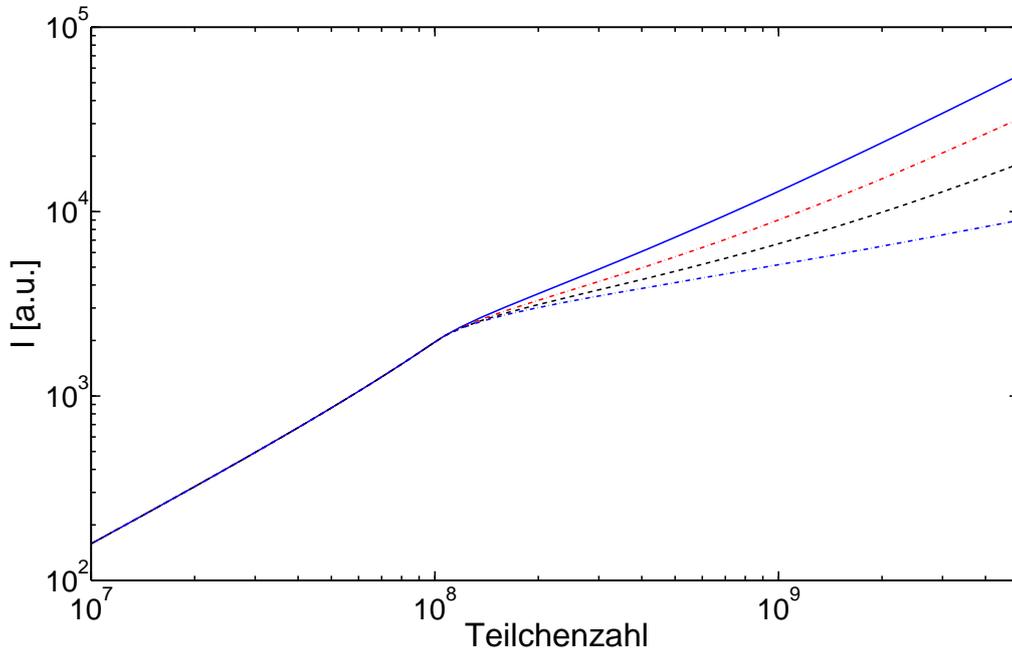
### 2.3.5. Leuchtendes Kondensat

Bisher wurde das Kondensat stets als nicht emittierend betrachtet. Die entsprechende Begründung wurde in Abschnitt 2.2 gegeben. Wie dort allerdings bereits angedeutet, sollte in einem endlichen System die strikte Erhaltung der Wellenzahl aufgeweicht werden und das



**Abbildung 2.14.:**  $z$ -aufgelöstes Lumineszenzspektrum  $I(z, \omega)$  (linke Spalte), räumlich integriertes Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  (mittlere Spalte) und  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  mit  $S_c = 5 \times 10^{-7}$ . Hierbei sind der Beitrag der kondensierten Exzitonen blau, der Beitrag der thermischen Exzitonen rot und die gesamte Lumineszenz schwarz dargestellt. Die Gesamtteilchenzahlen sind  $N = 1,07 \times 10^8$  (erste Reihe),  $N = 4,33 \times 10^8$  (zweite Reihe) und  $N = 1,00 \times 10^9$  (dritte Reihe) bei  $T = 0,5$  K. Die Kondensatsfraktionen betragen von oben nach unten  $N_c/N = 0; 0,07; 0,42$  (vergleiche Abbildung 2.1 und 2.2).

Kondensat dadurch zumindest schwach lumineszieren können. Die grundlegende Behandlung der Lumineszenz von kondensierten Exzitonen ist eine weiterführende und schwierige Aufgabe. Um zumindest die Auswirkung auf das Spektrum abzuschätzen, wird für die thermischen Exzitonen weiterhin eine deltaförmige Exziton-Photon-Kopplung angenommen (2.23), aber zusätzlich ein Beitrag des Kondensats (2.22) zugelassen. Da die Vorfaktoren dieser beiden Terme nicht bekannt sind, wird das gesamte Lumineszenzspektrums  $I(\mathbf{r}, \omega)$  über  $I(\mathbf{r}, \omega) = S_c I_K(\mathbf{r}, \omega) + I_T(\mathbf{r}, \omega)$  bestimmt.  $S_c$  stellt hierbei lediglich eine heuristisch eingeführte Konstante dar, welche zur Steuerung des Kondensatsanteils dient. Dabei gibt es zwei Grenzfälle. Zunächst einmal den Fall, dass der Beitrag des Kondensats verschwindend gering ist gegenüber dem Beitrag der thermischen Exzitonen ( $S_c \rightarrow 0$ ). Für diesen Fall gelten alle in den vorherigen Abschnitten getroffenen Aussagen über Signaturen. Andererseits kann der Kondensatsbeitrag zur Lumineszenz die thermischen Beiträge überstrahlen ( $S_c \rightarrow 1$ ). In diesem Fall sieht man nur den Beitrag des Kondensats, welcher eine durch die Auflösung verschmierte und durch die Dichte der kondensierten Exzitonen begrenzte deltaförmige Spitze im Spektrum darstellt. Eine solche Signatur wäre im Experiment klar zu erkennen. Daher bedürfen diese beiden Fälle keiner weiteren Diskussion. Für den interessanten Bereich dazwischen gibt es mehrere Effekte zu beobachten. Die Ergebnisse für die gleichen Teilchenzahlen und



**Abbildung 2.15.:** Total integrierte Lumineszenz  $I$  für verschiedene Lumineszenzkonstanten  $S_c$  bei  $T = 0,5$  K als Funktion der Gesamtteilchenzahl  $N$ . Die dargestellten Lumineszenzkonstanten sind  $S_c = 0$  (blau gestrichelt),  $S_c = 1 \times 10^{-7}$  (schwarz gestrichelt),  $S_c = 2,5 \times 10^{-7}$  (rot gestrichelt) und  $S_c = 5 \times 10^{-7}$  (blau durchgezogen).

Temperaturen wie in Abbildung 2.2 und mit einem Beitrag des Kondensats von  $S_c = 5 \times 10^{-7}$  (vgl. oben) bei einer spektralen Auflösung von  $\Delta = 20 \mu\text{eV}$  sind in Abbildung 2.14 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, wie der Beitrag des Kondensats das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum wieder parabelförmig erscheinen lässt. Die flache Kante wird demnach vollständig überdeckt. Die Veränderungen in dieser Größe sind zwar in dieser theoretischen Rechnung erkennbar, aber relativ subtil. Bei experimentellen Daten, in denen Rauschen eine Rolle spielt, wären diese Unterschiede wohl kaum auszumachen. Das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  ändert sich qualitativ nur wenig. Der Beitrag des Kondensats führt hier dazu, dass die Verteilung insgesamt breiter und höher wird, aber dennoch eine ähnliche Form wie im nichtkondensierten Fall behält. Selbst das Plateau in der  $z$ -aufgelösten Lumineszenz  $I(z)$  wird durch den Beitrag des Kondensats beseitigt. Es ist also denkbar, dass ein schwach leuchtendes Kondensat diese Signaturen überdeckt.

Als letzte mögliche Signatur eines Kondensats in diesem Fall bleibt also das Verhalten der total integrierten Lumineszenz. Dieses ist für verschiedene Lumineszenzkonstanten  $S_c$  bei fester Temperatur in Abbildung 2.15 dargestellt. Der Beitrag des Kondensats ändert hierbei lediglich den Anstieg der Kurve nach dem Abknicken. Für die hier betrachteten Lumineszenzkonstanten bleibt der Knick als solcher aber erhalten. Es ist dennoch denkbar, dass ein bestimmtes  $S_c$  die total integrierte Lumineszenz insgesamt wie eine Gerade verlaufen lässt. In diesem Fall wäre allerdings die Kondensatlumineszenz gegenüber den thermischen Beiträgen dominant

und somit klar im  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektrum  $I_G(z, \omega)$  als solche zu erkennen. Zusammengefasst kann festgestellt werden, dass die hier gemachten Betrachtungen natürlich keine strikte Behandlung der Lumineszenz der kondensierten Exzitonen ersetzen, aber die Wichtigkeit einer umfassenden Lumineszenztheorie zeigen. So werden zum Beispiel die flache Kante und andere Signaturen durch den möglichen Beitrag eines schwach leuchtenden Kondensats überdeckt. Lediglich der Knick in der total integrierten Lumineszenz hat sich als robust erwiesen. Diese Überlegungen zu einem schwach lumineszierenden Kondensat wurden in [26] veröffentlicht.

## 2.4. *fit*-Algorithmus

Für einen quantitativen Vergleich von theoretischen und experimentellen Ergebnissen ist es zunächst nötig, die physikalischen Parameter (Temperatur und chemisches Potential) aus den gemessenen Spektren zu rekonstruieren. Ziel dieses Abschnittes ist es, dafür eine geeignete Methode zu entwickeln. Um dies zu erreichen, sind drei Teilaufgaben zu bewältigen. Zunächst muss unter Berücksichtigung der Erkenntnisse aus den vorangegangenen Kapiteln ein *fit*-Algorithmus entwickelt werden. Anschließend wird dieser an theoretischen Ergebnissen getestet und im letzten Schritt auf experimentelle Daten angewendet.

Ausgangspunkt für die Entwicklung eines Algorithmus ist die folgende Situation: Bei einer bestimmten Badtemperatur werden mit einer gewissen Laserleistung Exzitonen erzeugt und das  $z$ -aufgelöste Lumineszenzspektrum  $I(z, \omega)$  gemessen. Dies wird mit steigender Laserleistung mehrfach wiederholt. Aus den gemessenen  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektren  $I(z, \omega)$  kann durch Integration das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  und die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  gebildet werden. Aus dem Experiment ist das Fallenpotential der Exzitonen  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  und die optische Abbildungsfunktion  $h(\mathbf{r}, \omega)$  (siehe Gleichung (2.26)) bekannt. Letztere umfasst auch die Angabe der Spaltbreite  $2\Delta x$ . Zudem kann die Teilchenzahl mit Hilfe des Ratenmodells aus der Laserleistung bestimmt werden [25].

Eine grundlegende Frage ist zunächst jedoch, welche der beiden zur Verfügung stehenden Größen  $I(z)$  bzw.  $I(\omega)$  verwendet werden soll. Da beide aus derselben Messgröße  $I(z, \omega)$  berechnet werden, sind beide gleichberechtigt. Wie man in Abschnitt 2.3.4 gut sehen konnte, ist die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz außerordentlich robust gegenüber Unsicherheiten und Fehlern in der optischen Abbildung. Andererseits ist die genaue Kenntnis des Fallenverlaufs essentiell, da ohne diesen eine korrekte Bestimmung der Temperatur nicht möglich ist. Bei dem räumlich integrierten Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  verhält es sich gerade umgekehrt. Der Verlauf der Potentialfalle hat hier nur einen geringen Einfluss, dafür ist die optische Abbildung äußerst wichtig für eine korrekte Wiedergabe der Parameter. Welche der beiden Größen verwendet werden sollte, hängt also davon ab, wie sicher die jeweiligen Angaben bekannt sind. Im Idealfall sollten natürlich beide herangezogen werden und somit einen Vergleich der ermittelten

Parameter auf Konsistenz ermöglichen.

Eine entsprechende *fit*-Formel für die experimentellen Daten ist immer ein Kompromiss aus möglichst genauer Beschreibung des Systems und der benötigten Rechenzeit. Daher wird im folgenden zunächst davon ausgegangen, dass es nur thermische Exzitonen gibt. Somit entfallen einige der in den vorangegangenen Abschnitten diskutierten Probleme. Falls ein Kondensat auftritt, sollte dies anhand einer der in Abschnitt 2.3.1 vorgestellten Signaturen erkennbar sein. Da sich diese durch eine qualitative Änderung der Spektren auszeichnen, wird eine quantitative Analyse der Spektren in diesen Fällen zunächst nicht benötigt. Im folgenden wird das Modell für das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  kurz vorgestellt. Eine detaillierte Erklärung und Herleitung der Modelle sowohl für das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  als auch die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  findet sich im Anhang B.5.

Ausgangspunkt für die Betrachtungen ist die Lumineszenz der Exzitonen im nichtkondensierten Fall (siehe Gleichung 2.25)

$$I_T(\mathbf{r}, \omega) \sim n_B(\hbar\omega - \mu)\delta(\hbar\omega - \mu - E(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})) \quad (2.28)$$

mit dem chemischen Potential  $\mu$  und der Energie der Exzitonen  $E(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) = \hbar^2 k_0^2 / 2m + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu + 2g\tilde{n}(\mathbf{r})$ . Um das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I(\omega)$  zu berechnen, muss Gleichung (2.28) unter Berücksichtigung des Spaltes über die gesamte Falle integriert werden. Um diese Integration analytisch auszuführen, wird ein anisotroper harmonischer Oszillator für das externe Fallenpotential angesetzt,  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \approx V_0 + \alpha_\rho \rho^2 + \alpha_z z^2$ . Des Weiteren wird angenommen, dass der Einfluss der Wechselwirkung näherungsweise durch eine Konstante beschrieben werden kann,  $2g\tilde{n}(\mathbf{r}) \approx C_{XX}$ . Mit diesen beiden Näherungen lässt sich die Energie der Exzitonen darstellen als  $E(k_0, \rho, z) = \Delta E + \alpha_\rho \rho^2 + \alpha_z z^2 - \mu$ , wobei alle Konstanten in  $\Delta E = \hbar^2 k_0^2 / 2m + V_0 + C_{XX}$  zusammengefasst wurden. Mit diesen Annahmen lässt sich das Integral über den gesamten Raum analytisch berechnen. Das Ergebnis ist

$$I_{\text{fit}}(\omega) \sim n_B(\hbar\omega - \mu)\Theta(\hbar\omega - \Delta E) \begin{cases} \sqrt{\frac{\hbar\omega - \Delta E}{\alpha_\rho}}, & \Delta x > \sqrt{\frac{\hbar\omega - \Delta E}{\alpha_\rho}} \\ \Delta x & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.29)$$

Das so berechnete Spektrum wird mit der spektralen Breite  $\Delta$  gefaltet, mit einer Proportionalitätskonstanten  $I_0$  multipliziert und eine Konstante für den Untergrund  $I_U$  hinzuaddiert. Die in Gleichung (2.29) auftretende halbe Spaltbreite  $\Delta x$  und der Fallenparameter  $\alpha_\rho$  sind von außen vorgegebene Parameter und werden nicht variiert. Für den *fit*-Algorithmus werden somit sechs verschiedene Größen ( $T$ ,  $\mu$ ,  $\Delta E$ ,  $\Delta$ ,  $I_0$  und  $I_U$ ) variiert. Da die spektrale Breite  $\Delta$  durch verschiedene Effekte beeinflusst werden kann (siehe Abschnitt 2.3.4), kann für diesen Wert lediglich eine untere Grenze angenommen werden, nämlich die Auflösung des Spektrometers. Von den verbleibenden Größen sind lediglich die Temperatur und das chemische Potential physikalisch relevant. Die Temperatur ist über den Abfall des integrierten Lumines-

| $T_{fit}$ [K] | $\Delta_{fit}$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $\Delta E$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $\mu_{fit}$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $\mu$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $N_{fit}$          | $N$                |
|---------------|-----------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|--------------------------|--------------------|--------------------|
| 0,502         | 11,16                             | 15,09                         | -119,09                        | -117,90                  | $5,00 \times 10^6$ | $5,00 \times 10^6$ |
| 0,514         | 10,56                             | 14,64                         | -108,69                        | -105,73                  | $7,20 \times 10^6$ | $6,61 \times 10^6$ |
| 0,511         | 10,03                             | 14,01                         | -96,89                         | -93,88                   | $9,10 \times 10^6$ | $8,73 \times 10^6$ |
| 0,506         | 10,28                             | 14,56                         | -84,38                         | -82,06                   | $1,17 \times 10^7$ | $1,15 \times 10^7$ |
| 0,510         | 10,41                             | 14,99                         | -73,53                         | -70,28                   | $1,55 \times 10^7$ | $1,53 \times 10^7$ |
| 0,517         | 10,46                             | 15,19                         | -62,76                         | -58,55                   | $2,12 \times 10^7$ | $2,02 \times 10^7$ |
| 0,514         | 10,80                             | 15,93                         | -51,74                         | -46,90                   | $2,67 \times 10^7$ | $2,66 \times 10^7$ |
| 0,521         | 10,93                             | 16,25                         | -41,36                         | -35,37                   | $3,59 \times 10^7$ | $3,52 \times 10^7$ |
| 0,531         | 11,02                             | 17,35                         | -31,72                         | -24,01                   | $4,85 \times 10^7$ | $4,65 \times 10^7$ |
| 0,522         | 10,00                             | 17,65                         | -20,95                         | -12,87                   | $5,84 \times 10^7$ | $6,15 \times 10^7$ |
| 0,529         | 10,13                             | 19,15                         | -12,80                         | -2,08                    | $7,42 \times 10^7$ | $8,13 \times 10^7$ |
| 0,564         | 10,29                             | 22,52                         | -5,86                          | 8,1                      | $1,09 \times 10^8$ | $1,07 \times 10^8$ |

**Tabelle 2.1.:** Verschiedene aus theoretischen Daten rekonstruierte Parameter. Die Temperatur war in allen Fällen  $T = 0,5$  K und die Auflösung betrug  $\Delta = 10 \mu\text{eV}$ .

zenzspektrums zu hohen Energien gegeben. Das chemische Potential hingegen manifestiert sich vor allem durch das Anwachsen der Intensität bei steigender Teilchenzahl. Es ist also notwendig, für die Bestimmung des chemischen Potentials zunächst die Proportionalitätskonstante  $I_0$  festzulegen. Dafür wird diese bei der niedrigsten Leistung geeicht. Hierzu verschafft man sich die entsprechende Teilchenzahl aus dem Ratenmodell und bestimmt die Temperatur aus den experimentellen Daten. Mit der gegebenen Falle und diesen beiden Parametern lässt sich das chemische Potential berechnen. Unter Verwendung des berechneten chemischen Potentials wird mittels der *fit*-Routine  $I_0$  bestimmt und für die anderen Leistungen konstant gehalten. Dies hat den Vorteil, dass bei dieser niedrigen Leistung nahezu keine Störeffekte auftreten sollten (Wechselwirkung, Elektron-Loch-Plasma,...). Der Nachteil ist ein möglicherweise schlechtes Signal-Rausch-Verhältnis bei sehr kleinen Teilchenzahlen und somit schwachen Intensitäten. Mit Hilfe dieses Modells können alle energetischen Verschiebungen durch  $\Delta E$  und alle spektralen Verbreiterungen durch  $\Delta$  simuliert werden. Somit werden Veränderungen der Art, wie in Kapitel 2.3.4 und 2.3.2 diskutiert, in die Prozedur einbezogen. Wenn also zum Beispiel die spektrale Breite deutlich von der spektralen Auflösung des Spektrometers abweicht, ist dies ein Indikator entweder für eine fehlerhafte Abbildungsfunktion oder für das Vorhandensein von Verbreiterungseffekten.

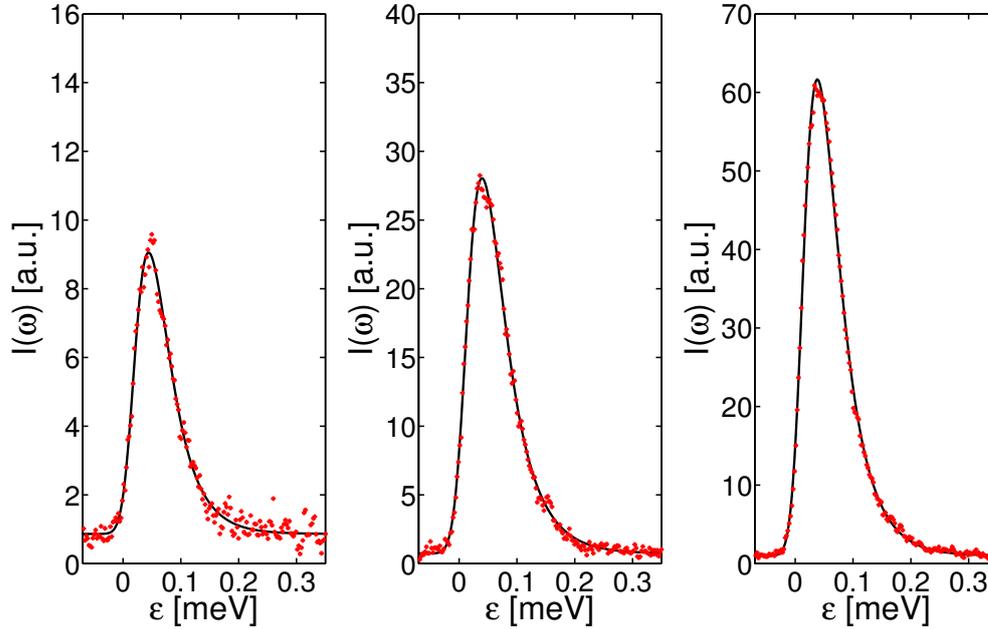
Die numerische Routine zum Ermitteln der Parameter beruht auf der Levenberg-Marquardt-Methode. Es handelt sich hierbei um eine Standardmethode zum Finden der Parameter von nichtlinearen, mehrdimensionalen Modellen, welche auf der Grundlage von [78] implementiert wurde. Zu Testzwecken wird die entwickelte Routine auf theoretische Daten angewandt. Dazu werden bei einer festen Temperatur und wachsender Teilchenzahl die Parameter ge-

mäß dem oben angegebenen Verfahren aus dem Spektrum ermittelt. Um die Situation realistischer zu gestalten, wurden die Spektren um einen zufälligen Wert verschoben und Rauschen hinzuaddiert. Das Rauschen wurde durch Zufallszahlen mit einem Höchstwert von 5% des Maximums des jeweiligen Spektrums simuliert. Nachdem die Temperatur und das chemische Potential ermittelt sind, können beide Angaben zur Berechnung der entsprechenden Gesamtteilchenzahlen in der Falle verwendet werden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 2.1 festgehalten. Die ermittelten Parameter stimmen mit den tatsächlich verwendeten Größen bei kleinen Teilchenzahlen gut überein. Bei steigender Exzitonenzahl wird der Einfluss der Wechselwirkung größer, wie man an  $\Delta E$  erkennen kann. Da diese nur als ortsunabhängige Konstante berücksichtigt wurde, führt dies wahrscheinlich zu den Abweichungen bei Temperatur und chemischem Potential bei hohen Teilchenzahlen. Jedoch weicht die aus den Parametern berechnete Exzitonenzahl in keinem der betrachteten Fälle stark vom wahren Wert ab. Der angegebene Algorithmus funktioniert also für moderate Dichten, produziert aber für sehr hohe Teilchenzahlen zunehmend Abweichungen.

## 2.5. Vergleich von Experiment und Theorie

Mit den bis hierher gewonnen Erkenntnissen lässt sich nun ein erster Vergleich der theoretischen Ergebnisse mit den experimentellen Resultaten anstellen. Die meisten der in Abschnitt 2.3.1 vorgestellten Signaturen konnten bis heute experimentell nicht beobachtet werden. Lediglich das Abknicken der integrierten Lumineszenz konnte in [26] (z.B. Abbildung 12) gezeigt werden. Wenn dieses Verhalten tatsächlich eine BEK von Exzitonen anzeigt, so könnte der Beitrag des Kondensats zur Lumineszenz eine mögliche Erklärung für das Fehlen der anderen Signaturen sein (vgl. Kapitel 2.3.5). Auch die in [26] gefundenen bimodalen Verteilungen (Abbildung 9 in [26]) deuten auf ein mit Abbildung 2.14 vergleichbares Verhalten hin. Der Beitrag des Kondensats könnte bei der  $z$ -aufgelösten Lumineszenz  $I(z)$  zu einem dem thermischen Anteil aufgesetzten Spitze und somit zu einer solchen bimodalen Verteilung führen. Diese Überlegungen sind auch ausführlich in [26] dargelegt.

Für eine quantitative Analyse werden die ersten drei Messungen der in [26] ausgewerteten Messreihe verwendet. Die Auflösung des Spektrographen war dabei  $\Delta = 20 \mu\text{eV}$  und die gemessene Badtemperatur lag bei  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ . Die gemessenen räumlich integrierten Lumineszenzspektren und die entsprechenden *fits* sind in Abbildung 2.16 dargestellt. Die Resultate der *fit*-Parameter sind in Tabelle 2.2 aufgeführt. Wie an den Graphen von Abbildung 2.16 zu erkennen ist, stimmen experimentelle Daten und theoretische *fits* gut überein. Auch die Teilchenzahlen des Ratenmodelles und der *fit*-Prozedur sind ähnlich. Da sich mit der Laserleistung die Zahl der Exzitonen erhöht, muss das chemische Potential ansteigen. Diese Entwicklung ist anhand von Tabelle 2.2 gut nachzuvollziehen. Das Ergebnis für die Temperatur ist allerdings bemerkenswert. Wenn die ermittelte Temperatur von 0,45-0,52 K tatsächlich der



**Abbildung 2.16.:** Gemessene räumlich integrierte Lumineszenzspektren  $I(\omega)$  (rote Punkte) und die Ergebnisse der entsprechenden *fit*-Prozeduren (schwarze Kurve) für die ersten drei Messungen der in [26] ausgewerteten Messreihe (siehe Abbildung 7 in [26]). Die Leistung des Pumplasers steigt von links nach rechts an. Die gemessene Temperatur des He-Bades betrug in allen Fällen  $T_{\text{Bad}} = 0,037$  K.

| $T_{fit}$ [K] | $\Delta_{fit}$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $\Delta E$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $\mu_{fit}$ [ $\mu\text{eV}$ ] | $N_{fit}$          | $N_{Rat}$          |
|---------------|-----------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|--------------------|--------------------|
| 0,448         | 21,60                             | 15,03                         | -171,39                        | $6,50 \times 10^5$ | $6,50 \times 10^5$ |
| 0,512         | 22,57                             | 8,00                          | -148,68                        | $2,76 \times 10^6$ | $2,06 \times 10^6$ |
| 0,475         | 20,82                             | 9,66                          | -101,22                        | $5,37 \times 10^6$ | $4,00 \times 10^6$ |

**Tabelle 2.2.:** Ergebnisse der *fit*-Routine angewendet auf die ersten drei experimentell gemessenen Spektren von [26]. Die Auflösung des Spektrographen war  $\Delta = 20 \mu\text{eV}$ .

Exzitonentemperatur entspricht, so liegt diese eine Größenordnung über der Badtemperatur. Dies ist ein Widerspruch zu der Annahme, dass die Exzitonen in einem thermodynamischen Gleichgewicht mit dem He-Bad seien. Für diese ultratiefen Badtemperaturen  $T_{\text{Bad}} \ll 0,5$  K gilt offenbar  $T_X \neq T_{\text{Bad}}$ . Die bis hier verwendete Gleichgewichtstheorie reicht somit nicht zum Verständnis aller experimentellen Resultate in [26] aus. Wenn die Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichts aufzugeben ist, so wäre der nächste Schritt die Einführung einer Nichtgleichgewichtstheorie. Diese wird im nächsten Kapitel behandelt.

## Kapitel 3.

# Nichtgleichgewicht

Wie im vorangegangenen Kapitel gezeigt wurde, ist eine Beschreibung des Systems im Gleichgewicht unzureichend zum Verständnis einiger experimenteller Resultate. Eine ganze Reihe von physikalisch interessanten Prozessen ist der bisher verwendeten Gleichgewichtstheorie nicht zugänglich. So sind die Erzeugung der Exzitonen, die Driftbewegung ins Fallenzentrum sowie der Prozess der Thermalisierung erst in einer Nichtgleichgewichtstheorie beschreibbar. Frühere Publikationen haben sich bereits mit verschiedenen Teilaspekten einer Nichtgleichgewichtsbeschreibung der Exzitonen befasst [51, 79, 80, 81, 82]. Typischerweise wird in diesen Arbeiten eine Quanten-Boltzmann-Gleichung in einem räumlich homogenen System unter speziellen Gesichtspunkten gelöst. So werden in [79, 80] nur Exziton-Exziton-Stöße und in [51, 81] nur Exziton-Phonon-Stöße betrachtet. In [82] werden zwar alle relevanten Stoßterme berücksichtigt, jedoch nur für schwache Besetzungen ( $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \ll 1$ ) und in keinem der Zugänge wird räumliche Inhomogenität beschrieben.

Um ein geeignetes Modell zur Beschreibung der Exzitonen in der Falle aufzustellen, wird wiederum auf den reichen Fundus von Arbeiten auf dem Gebiet der atomaren Kondensate zurückgegriffen. Diese müssen an entsprechender Stelle durch die halbleiterspezifischen Terme ergänzt werden. Ein geeignetes Modell stellen die sogenannten Zaremba-Nikuni-Griffin-Gleichungen (ZNG-Gleichungen) dar [83]. In diesem Formalismus wird das Kondensat mittels einer dissipativen GPG und die nichtkondensierten Teilchen über eine Quanten-Boltzmann-Gleichung beschrieben. Beide Gleichungen sind über Kopplungsterme miteinander verbunden und müssen selbstkonsistent gelöst werden. Auf diese Weise ist eine dynamische Beschreibung beider Phasen möglich. Die ZNG-Gleichungen basieren auf den fundamentalen Arbeiten von Kirkpatrick und Dorfman [84, 85, 86] sowie den von Proukakis *et al.* [87, 88] gemachten Erweiterungen. Ein umfassender Überblick über die Gleichungen, ihre Ableitung und Anwendungsmöglichkeiten findet sich in [74].

Im folgenden werden die ZNG-Gleichungen genutzt, um eine hydrodynamische Beschreibung des bosonischen Gases aufzustellen. In dieser Darstellung können die halbleiterspezifischen Effekte besonders einfach hinzugefügt werden.

### 3.1. Hydrodynamische Darstellung

Die Ausgangsgleichungen für die hydrodynamische Darstellung des Systems wurden bereits im Abschnitt 1.3 dargestellt. Für den hier betrachteten allgemeinen Fall im Nichtgleichgewicht ist der Einteilchenbeitrag des Hamiltonoperators  $\hat{h}_0$  gegeben durch

$$\hat{h}_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}). \quad (3.1)$$

In den folgenden Abschnitten sollen die hydrodynamischen Gleichungen für die thermischen und kondensierten Exzitonen abgeleitet werden.

#### 3.1.1. Kondensat

Unter Verwendung von (3.1) lautet die Bewegungsgleichung für die Kondensatswellenfunktion (siehe Gleichung (1.10))

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + gn_c(\mathbf{r}, t) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}, t) \right] \Phi(\mathbf{r}, t) + g\tilde{m}(\mathbf{r}, t)\Phi^*(\mathbf{r}, t) + g\langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (3.2)$$

Grundlage der ZNG-Gleichungen sind zwei wichtige Näherungen: Zum einem wird die anomale Dichte vernachlässigt (Popow-Näherung) und zum anderen wird der Beitrag des Terms  $\langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$  nur bis zur ersten Ordnung in  $g$  berücksichtigt. Dies führt auf eine verallgemeinerte GPG der Form [74]

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + gn_c(\mathbf{r}, t) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}, t) - iR_{\text{ZNG}}(\mathbf{r}, t) \right] \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (3.3)$$

mit dem Kopplungsterm  $R_{\text{ZNG}}(\mathbf{r}, t)$ . Dieser beschreibt den Austausch von Exzitonen zwischen der kondensierten und der nichtkondensierten Phase und ist innerhalb der ZNG-Gleichungen durch

$$R_{\text{ZNG}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{g}{n_c(\mathbf{r}, t)} \text{Im}[\Phi^*(\mathbf{r}, t)\langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle]$$

gegeben. Durch Einführung von Amplituden- und Phasenvariablen für die Kondensatswellenfunktion  $\Phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n_c(\mathbf{r}, t)}e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$  lässt sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [n_c(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}_c(\mathbf{r}, t)] &= -\Gamma_{\text{Xc-X}}^{(0)}(\mathbf{r}, t), \\ m \left( \frac{\partial \mathbf{v}_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla v_c^2(\mathbf{r}, t) \right) &= -\nabla \mu_c(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.4)$$

aufstellen, welches äquivalent zu der verallgemeinerten GPG (3.3) ist. Hierbei ist die neu eingeführte Geschwindigkeit des Kondensats definiert über  $\mathbf{v}_c(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta(\mathbf{r}, t)$  und das chemische Potential des Kondensats [74] ist gegeben durch

$$\mu_c(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2 \sqrt{n_c(\mathbf{r}, t)}}{2m \sqrt{n_c(\mathbf{r}, t)}} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g n_c(\mathbf{r}, t) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}, t). \quad (3.5)$$

Somit ist die Energie eines Teilchens im Kondensat

$$\varepsilon_c(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} m \mathbf{v}_c^2(\mathbf{r}, t) + \mu_c(\mathbf{r}, t). \quad (3.6)$$

Der Term  $\Gamma_{X_c-X}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$  erfüllt die gleiche Aufgabe wie  $R_{\text{ZNG}}(\mathbf{r}, t)$  in der verallgemeinerten GPG und hängt mit diesem über

$$\Gamma_{X_c-X}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \frac{2n_c(\mathbf{r}, t)}{\hbar} R_{\text{ZNG}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.7)$$

zusammen.

Bei den Gleichungen (3.4) handelt es sich um die ursprünglich von Madelung [89] vorgeschlagene hydrodynamische Formulierung der (nichtlinearen) Schrödingergleichung (3.3). Der erste Term auf der rechten Seite von (3.5) entspricht dem sogenannten Quantendruckterm bzw. dem Bohm-Potential der bohmischen Mechanik [90, 91].

Da die hydrodynamischen Gleichungen (3.4) und die verallgemeinerte GPG (3.3) völlig äquivalent sind, kann die numerisch leichter zu handhabende GPG gelöst und im Anschluss  $n_c(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{v}_c(\mathbf{r}, t)$  und  $\mu_c(\mathbf{r}, t)$  aus der bekannten Wellenfunktion bestimmt werden. Die Gleichungen sind aufgrund der Kopplung an die thermischen Exzitonen allerdings nicht abgeschlossen. Diese werden im kommenden Abschnitt behandelt.

### 3.1.2. Thermische Exzitonen

Zur Berechnung der Dichte der thermischen Exzitonen muss die Bewegungsgleichung für den Fluktuationsoperator (siehe Gleichung (1.11)) unter Verwendung des Einteilchenbeitrages in (3.1) gelöst werden. Die entstehende Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g n_c(\mathbf{r}, t) \right] \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) + g \Phi^*(\mathbf{r}, t) \left[ \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) - \tilde{m}(\mathbf{r}, t) \right] \\ & + g \Phi^2(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) + 2g \Phi(\mathbf{r}, t) \left[ \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) - \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \right] \\ & + g \left[ \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) - \langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

wird zunächst in eine quantenkinetische Boltzmanngleichung umgeformt. Da die Ableitung dieser Gleichung und der darin enthaltenen Stoßterme lange und umfangreiche Rechnungen

beinhaltet, soll hier nur das Ergebnis angegeben werden. Für eine detaillierte Herleitung und Diskussion wird auf [74] und die darin enthaltenen Quellen verwiesen. Unter der Annahme eines räumlich nur langsam veränderlichen mittleren Feldes

$$U(\mathbf{r}, t) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g[n_c(\mathbf{r}, t) + \tilde{n}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.9)$$

lässt sich die Bewegungsgleichung (3.8) in eine Quanten-Boltzmann-Gleichung der Form

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \nabla_{\mathbf{r}} U(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \right|_{\text{Stoß}} = \quad (3.10)$$

mit der Wigner-Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  [92] umschreiben. Der Stoßterm auf der rechten Seite ist gegeben durch

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} \right|_{\text{Stoß}} = C_{X-X}[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)] + C_{X_c-X}[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \Phi(\mathbf{r}, t)], \quad (3.11)$$

wobei Stöße unter Einbeziehung von kondensierten Exzitonen in  $C_{X_c-X}$  und Stöße ohne diese in  $C_{X-X}$  enthalten sind. Dabei ist zu beachten, dass in  $C_{X_c-X}$  alle Stoßprozesse enthalten sind, in denen mindestens einer der Ausgangs- oder Endzustände das Kondensat ist. Es gilt der Zusammenhang

$$\Gamma_{X_c-X}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_{X_c-X} \quad (3.12)$$

zwischen dem Stoßterm  $C_{X_c-X}$  und dem bereits zuvor eingeführten Kopplungsterm  $\Gamma_{X_c-X}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ . Da die ZNG-Gleichungen Atome beschreiben, fehlen an dieser Stelle noch wichtige festkörperspezifische Mechanismen. Diese sollen durch Ergänzung des Stoßtermes (3.11) in die Gleichungen eingebracht werden. Dazu gehören Stöße mit Phononen ( $C_{\text{Ph}}[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)]$ ), die endliche Lebensdauer ( $C_{\text{Rek}}[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)]$ ), der Auger-Zerfall ( $C_{\text{Auger}}[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)]$ ) und der Einfluss des Pumplasers ( $C_{\text{Laser}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ ). Die Beiträge zum Stoßintegral lauten daher

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} \right|_{\text{Stoß}} &= C_{X-X} + C_{X_c-X} + C_{\text{Ph}} + C_{\text{Rek}} + C_{\text{Auger}} + C_{\text{Laser}} \\ &= C_{X-X} + C_{X_c-X} + C_{\text{Ph}} + C_{\text{E-V}}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

wobei alle Beiträge, die Exzitonen erzeugen oder vernichten können, im Term  $C_{\text{E-V}}$  zusammengefasst wurden.

Um mit der in (3.3) angegebenen GPG konsistent zu bleiben, muss  $R_{\text{ZNG}}(\mathbf{r}, t)$  durch einen verallgemeinerten Term ersetzt werden. Die endliche Lebensdauer  $\tau$  der Exzitonen kann leicht hinzugefügt werden. Die Matrixelemente für die beim Auger-Effekt benötigten Übergänge sind linear in  $\mathbf{k}$  [58]. Es wird daher davon ausgegangen, dass die kondensierten Exzitonen nicht dem Auger-Zerfall unterliegen. Neben der Exziton-Exziton-Streuung können Exzitonen auch

durch Exziton-Phonon-Streuung zwischen der thermischen und kondensierten Phase wechseln. Daher wird der Phononstoßterm gemäß  $C_{\text{Ph}} = C_{X_c-\text{Ph}} + C_{X-\text{Ph}}$  aufgeteilt. Dabei beschreibt  $C_{X_c-\text{Ph}}$  Wechselwirkungen unter Einbeziehung der kondensierten Phase, während in  $C_{X-\text{Ph}}$  lediglich thermische Zustände eine Rolle spielen. Mit diesen Annahmen lautet der erweiterte Kopplungsterm

$$R(\mathbf{r}, t) = \hbar/\tau + R_{X_c-\text{Ph}}(\mathbf{r}, t) + R_{X_c-X}(\mathbf{r}, t). \quad (3.14)$$

Die Terme  $R_{X_c-\text{Ph}}(\mathbf{r}, t)$  und  $R_{X_c-X}(\mathbf{r}, t)$  werden später im Rahmen der Berechnung der Stoßterme detailliert diskutiert.

Eine wichtige in den ZNG-Gleichungen gemachte Näherung ist die Annahme der Dispersion

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{p^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g[n_c(\mathbf{r}, t) + \tilde{n}(\mathbf{r}, t)] \\ &= \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.15)$$

für die thermischen Exzitonen bei allen Temperaturen. Diese Näherung versagt bei  $T \rightarrow 0$ , da bei  $T \ll T_{\text{krit}}$  die Dichte der kondensierten Exzitonen stark ansteigt und somit die Abweichung zwischen (3.15) und der eigentlich zu verwendenden Bogoljubow-Dispersion (vgl. Gleichung (2.10)) ebenfalls wächst. Giorgini *et al.* konnten in [93] allerdings zeigen, dass der Unterschied zwischen beiden in weiten Temperaturbereichen sehr gering ist.

Zur Ableitung der hydrodynamischen Gleichungen werden die Momente der Boltzmann-Gleichung bis zur zweiten Ordnung gebildet. Hierfür wird (3.10) mit 1 (nullte Ordnung),  $\mathbf{p}$  (erste Ordnung) beziehungsweise  $p^2/2m$  (zweite Ordnung) multipliziert und anschließend über den gesamten Impulsraum integriert. Im folgenden wird das  $n$ -te Moment eines Stoßtermes mit  $\Gamma^{(n)}$  bezeichnet.

Da Stöße zwischen thermischen Exzitonen teilchenzahl-, impuls- und ernergerieerhaltend sind, verschwinden die entsprechenden Momente und es gilt

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_{X-X} &= \Gamma_{X-X}^{(0)} = 0, \\ \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} C_{X-X} &= \mathbf{\Gamma}_{X-X}^{(1)} = \mathbf{0}, \\ \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} C_{X-X} &= \Gamma_{X-X}^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Bei den in  $C_{X_c-X}$  enthaltenen Stößen können Exzitonen die Phase wechseln. Somit können Exzitonenzahl, Impuls und Energie in den einzelnen Phasen keine Erhaltungsgrößen sein, sondern nur, wenn beide Phasen zusammen betrachtet werden. Die Momente von  $C_{X_c-X}$  ver-

schwinden daher nicht und nehmen die Form [74]

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_{X_c-X} &= \Gamma_{X_c-X}^{(0)} \\
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} C_{X_c-X} &= \mathbf{\Gamma}_{X_c-X}^{(1)} = m\mathbf{v}_c \Gamma_{X_c-X}^{(0)} \\
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} C_{X_c-X} &= \Gamma_{X_c-X}^{(2)} = (\varepsilon_c - U) \Gamma_{X_c-X}^{(0)}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

an. Weiterhin sind Stöße mit Phononen teilchenzahlerhaltend und es gilt demnach

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_{X-Ph} = \Gamma_{X-Ph}^{(0)} = 0. \tag{3.18}$$

Abgesehen von diesen hier aufgeführten Eigenschaften der Stoßterme ist die explizite Gestalt für die Ableitung der Momentengleichungen zunächst nicht relevant. Diese wird an späterer Stelle ausführlich für jeden Beitrag einzeln diskutiert.

Bei bekannter Verteilungsfunktion können diverse physikalisch relevante Größen direkt berechnet werden. So lässt sich die lokale Dichte der thermischen Exzitonen  $\tilde{n}(\mathbf{r}, t)$  sowie deren lokale Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t)$  über

$$\begin{aligned}
\tilde{n}(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \\
\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tilde{n}(\mathbf{r}, t)}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

berechnen. Weitere wichtige Größen sind die lokale Gesamtenergiedichte  $E_G(\mathbf{r}, t)$ , die lokale kinetische Energiedichte  $E(\mathbf{r}, t)$  und die lokale thermische Energiedichte  $\tilde{\varepsilon}$ , welche durch

$$\begin{aligned}
E_G(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\
E(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\
\tilde{\varepsilon}(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{[\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t)]^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \\
&= E(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2} m \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}_n^2(\mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{3.20}$$

gegeben sind. Mittels der hier zusammengestellten Gleichungen lassen sich die Momente der Boltzmann-Gleichung kompakt darstellen.

### Teilchenzahl (nulltes Moment)

Die Momente der Stoßterme (3.13) sind durch (3.16), (3.17) und (3.18) und die Festlegung von  $\Gamma^{(n)}$  gegeben und werden an dieser Stelle nicht explizit vorgerechnet. Die Terme mit den Zeitableitungen auf der linken Seite von (3.10) ergeben jeweils die Zeitableitung eines der Terme aus (3.19) bzw. (3.20). Im folgenden werden also nur die Terme aus Gleichung (3.10) explizit behandelt, welche die Gradienten enthalten. Zur besseren Übersichtlichkeit werden die Argumente weggelassen.

Das nullte Moment ergibt sich durch Integration über den Impuls. Unter Ausnutzung der Definition in (3.19) und der Tatsache, dass die Verteilungsfunktion im Unendlichen verschwindet, ergibt sich für den ersten Gradiententerm

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathbf{p}f}{m} \\ &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\tilde{n}\mathbf{v}_n) \end{aligned}$$

und für den zweiten

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \nabla_{\mathbf{r}} U \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f &= \nabla_{\mathbf{r}} U \cdot \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \nabla_{\mathbf{p}} f \\ &= 0. \end{aligned}$$

Die Gleichung für das nullte Moment lautet damit

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\tilde{n}\mathbf{v}_n) = \Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(0)} + \Gamma_{E-V}^{(0)}. \quad (3.21)$$

### Impuls (erstes Moment)

Das erste Moment wird durch Integration der Boltzmann-Gleichung, multipliziert mit dem Impuls, gewonnen. Für das erste Moment des ersten Gradiententermes in (3.10) erhält man nach partieller Integration

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} (-\nabla_{\mathbf{r}} U \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f) &= -\sum_{i,j} \frac{\partial U}{\partial x_j} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} p_i \frac{\partial f}{\partial p_j} \mathbf{e}_{x_i} \\ &= -\nabla_{\mathbf{r}} U \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} (\nabla_{\mathbf{p}} f) \mathbf{p} \\ &= \tilde{n} \nabla_{\mathbf{r}} U. \end{aligned}$$

Für die Berechnung des noch verbleibenden Terms ist es sinnvoll, diesen zunächst in kartesischen Koordinaten aufzuschreiben. Für die  $i$ -te Komponente ergibt sich

$$\begin{aligned}
\left[ \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} \left( \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \right) \right]_i &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_j p_i \frac{p_j}{m} \frac{\partial f}{\partial x_j} \\
&= m \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left[ \frac{p_i}{m} + v_{ni} - v_{ni} \right] \left[ \frac{p_j}{m} + v_{nj} - v_{nj} \right] f \\
&= m \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left[ \left( \frac{p_i}{m} - v_{ni} \right) \left( \frac{p_j}{m} - v_{nj} \right) \right. \\
&\quad \left. - v_{ni} v_{nj} + \frac{p_j v_{ni}}{m} + \frac{p_i v_{nj}}{m} \right] f \\
&= \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{ij} + m\tilde{n} v_{ni} v_{nj}).
\end{aligned}$$

Hierbei wurde der auch von Griffin *et al.* [74] verwendete Drucktensor

$$P_{ij} = m \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left( \frac{p_i}{m} - v_{ni} \right) \left( \frac{p_j}{m} - v_{nj} \right) f \quad (3.22)$$

eingeführt. Unter Verwendung der Vektordivergenz lässt sich dieser Term als

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} \left( \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \right) &= \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} (P_{ij} + m\tilde{n} v_{ni} v_{nj}) \mathbf{e}_{x_i} \\
&= \sum_{i,j} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j} \mathbf{e}_{x_i} + \nabla_{\mathbf{r}} \bullet (m\tilde{n} \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n)
\end{aligned}$$

schreiben. Zusammengesetzt ergibt sich für die erste Momentengleichung somit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (m\tilde{n} \mathbf{v}_n) + \nabla_{\mathbf{r}} \bullet (m\tilde{n} \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n) &= - \sum_{i,j} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j} \mathbf{e}_{x_i} - \tilde{n} \nabla_{\mathbf{r}} U \\
&\quad + m\mathbf{v}_c \Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \mathbf{\Gamma}_{X-Ph}^{(1)} + \mathbf{\Gamma}_{X_c-Ph}^{(1)} + \mathbf{\Gamma}_{E-V}^{(1)}. \quad (3.23)
\end{aligned}$$

### Energie (zweites Moment)

Für das zweite Moment wird die Boltzmann-Gleichung mit  $p^2/2m$  multipliziert und wiederum über den Impuls integriert. Analog zum ersten Moment ergibt sich für den ersten Gradiententerm durch partielle Integration

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} (-\nabla_{\mathbf{r}} U \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f) &= - \sum_{i,j} \frac{\partial U}{\partial x_j} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} p_i^2 \frac{\partial f}{\partial p_j} \\
&= \tilde{n} \mathbf{v}_n \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U.
\end{aligned}$$

Der verbleibende Term kann umgeformt werden zu

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} \left( \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{r}} f \right) &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} \frac{\mathbf{p}}{m} f \\
&= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left[ \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} + \mathbf{v}_n \cdot \mathbf{p} - \frac{m}{2} v_n^2 \right] \\
&\quad \times \left[ \frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_n + \mathbf{v}_n \right] f \\
&= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left[ \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} \left( \frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_n \right) f + \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} \mathbf{v}_n f \right. \\
&\quad \left. + (\mathbf{v}_n \cdot \mathbf{p}) \left( \frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_n \right) f + (\mathbf{v}_n \cdot \mathbf{p}) \mathbf{v}_n f - \frac{m}{2} v_n^2 \left( \frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_n \right) f \right. \\
&\quad \left. - \frac{m}{2} v_n^2 \mathbf{v}_n f \right] \\
&= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[ \mathbf{Q} + \tilde{\epsilon} \mathbf{v}_n - \frac{m}{2} \tilde{n} v_n^2 \mathbf{v}_n + \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} (\mathbf{v}_n \cdot \mathbf{p}) \frac{\mathbf{p}}{m} f \right]
\end{aligned}$$

mit dem Wärmestrom

$$\mathbf{Q} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} \left( \frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_n \right) f. \quad (3.24)$$

Für das letzte verbleibende Integral wird wiederum zunächst nur die  $i$ -te Komponente berechnet

$$\begin{aligned}
\left[ \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} (\mathbf{v}_n \cdot \mathbf{p}) \frac{\mathbf{p}}{m} f \right]_i &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_j \frac{1}{m} v_{nj} p_j p_i f \\
&= \sum_j \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} m v_{nj} \left[ \left( \frac{p_{xi}}{m} - v_{ni} \right) \left( \frac{p_{xj}}{m} - v_{nj} \right) \right. \\
&\quad \left. - v_{ni} v_{nj} + \frac{v_{ni} p_{xj}}{m} + \frac{v_{nj} p_{xi}}{m} \right] f \\
&= \sum_j (v_{nj} P_{ij} + m \tilde{n} v_{ni} v_{nj}^2).
\end{aligned}$$

Es ergibt sich also

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} \left( \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \right) &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[ \mathbf{Q} + \tilde{\epsilon} \mathbf{v}_n + \frac{m}{2} \tilde{n} v_n^2 \mathbf{v}_n + \sum_{i,j} v_{nj} P_{ij} \mathbf{e}_{x_i} \right] \\
&= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[ \mathbf{Q} + \left[ \tilde{\epsilon} + \frac{m}{2} \tilde{n} v_n^2 \right] \mathbf{v}_n + \sum_{i,j} v_{nj} P_{ij} \mathbf{e}_{x_i} \right] \\
&= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[ \mathbf{Q} + E \mathbf{v}_n + \sum_{i,j} v_{nj} P_{ij} \mathbf{e}_{x_i} \right]
\end{aligned}$$

und somit die Momentengleichung zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (E \mathbf{v}_n) &= -\tilde{n} \mathbf{v}_n \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{Q} - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[ \sum_{i,j} v_{nj} P_{ij} \mathbf{e}_{x_i} \right] \\ &+ (\varepsilon_c - U) \Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \Gamma_{X-Ph}^{(2)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(2)} + \Gamma_{E-V}^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Zusammengefasst lauten die abgeleiteten Momente der Boltzmann-Gleichung somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{n} \mathbf{v}_n) &= \Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(0)} + \Gamma_{E-V}^{(0)}, \\ \frac{\partial}{\partial t} (m \tilde{n} \mathbf{v}_n) + \nabla \bullet (m \tilde{n} \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n) &= - \sum_{i,j} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j} \mathbf{e}_{x_i} - \tilde{n} \nabla U \\ &+ m \mathbf{v}_c \Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \Gamma_{X-Ph}^{(1)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(1)} + \Gamma_{E-V}^{(1)}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (E \mathbf{v}_n) &= -\nabla U \cdot \tilde{n} \mathbf{v}_n - \nabla \cdot \mathbf{Q} - \nabla \cdot \sum_{i,j} v_{nj} P_{ij} \mathbf{e}_{x_i} \\ &+ (\varepsilon_c - U) \Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \Gamma_{X-Ph}^{(2)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(2)} + \Gamma_{E-V}^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

mit den zuvor eingeführten Definitionen (3.22) und (3.24). Da an dieser Stelle keine Impulse mehr auftreten, wurde der Index an den Nablaoperatoren weggelassen. Dieses Gleichungssystem unterscheidet sich nur scheinbar von dem in [74] angegeben. Um von den hier aufgestellten Gleichungen zu denen von Griffin *et al.* zu gelangen, muss man zunächst alle halbleiterspezifischen Stoßterme entfernen und anschließend die Zeitableitungen in der Impulsgleichung mittels Produktregel ausführen. Durch entsprechendes Einsetzen der Momentengleichungen ineinander gelangt man zu den in [74] angegebenen Gleichungen. Die hier gewählte Form ist allerdings physikalisch transparenter. Vernachlässigt man alle  $\Gamma^{(n)}$ -Terme, so handelt es sich um ein System aus Erhaltungssätzen für die Teilchenzahl, den Impuls und die Energie der thermischen Exzitonen, wobei  $\nabla U$  als externe Kraft fungiert. Es handelt sich formal gesehen um Eulergleichungen, welche mit der Methode der finiten Elemente [94, 95] numerisch gelöst werden können. Hierzu muss das System allerdings noch abgeschlossen werden, denn sie enthalten als drittes Moment den Wärmestrom  $\mathbf{Q}$ .

Eine sehr elegante Möglichkeit, dies zu tun bei gleichzeitiger Vereinfachung des obigen Gleichungssystems, ist die Annahme einer lokalen Gleichgewichtsverteilung

$$\tilde{f}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = [\exp\{\beta(\mathbf{r}, t)[(\mathbf{p} - m \mathbf{v}_n)^2/2m + U(\mathbf{r}, t) - \tilde{\mu}(\mathbf{r}, t)] - 1\}]^{-1} \quad (3.27)$$

mit einem orts- und zeitabhängigen lokalen chemischen Potential  $\tilde{\mu}(\mathbf{r}, t)$  sowie einer orts- und zeitabhängigen lokalen Temperatur  $\beta(\mathbf{r}, t) = 1/k_B T(\mathbf{r}, t)$ . Ein lokales Gleichgewicht liegt aber nur dann vor, wenn die Relaxationszeit im Impulsraum deutlich kürzer ist als die im Ortsraum. Berechnet man für typische experimentelle Werte die Stoßterme in (3.13) sowie die Vorfaktoren der Ableitungen in Gleichung (3.10), so deuten die Ergebnisse tatsächlich auf eine solche

Separation der Zeitskalen hin. Um dies genauer zu untersuchen, wird im folgenden die Relaxation einer durch den Pumplaser erzeugten thermischen Verteilung von Exzitonen betrachtet. Da sich die Dichte der thermischen Exzitonen für die gegebenen Fallenparameter und Anrengungsbedingungen auf einer Zeitskala von  $t < 1$  ns kaum verändert, kann zu diesem Zwecke ein homogenes System betrachtet werden.

### 3.2. Homogener Fall

Da es zunächst nur um die Frage der Relaxation ins lokale Gleichgewicht und um eine erste Abschätzung der Entwicklung der Temperatur gehen soll, werden nur die Beiträge der Exziton-Exziton- (X-X) sowie die der Exziton-Phonon-Streuung (X-Ph) berücksichtigt. Die Entwicklung der Verteilungsfunktion kann also in diesem homogenen Fall durch die vereinfachte Boltzmann-Gleichung der Form

$$\left. \frac{\partial f_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} = \frac{\partial f_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{Stoß}} = C_{X-X} + C_{X-Ph} \quad (3.28)$$

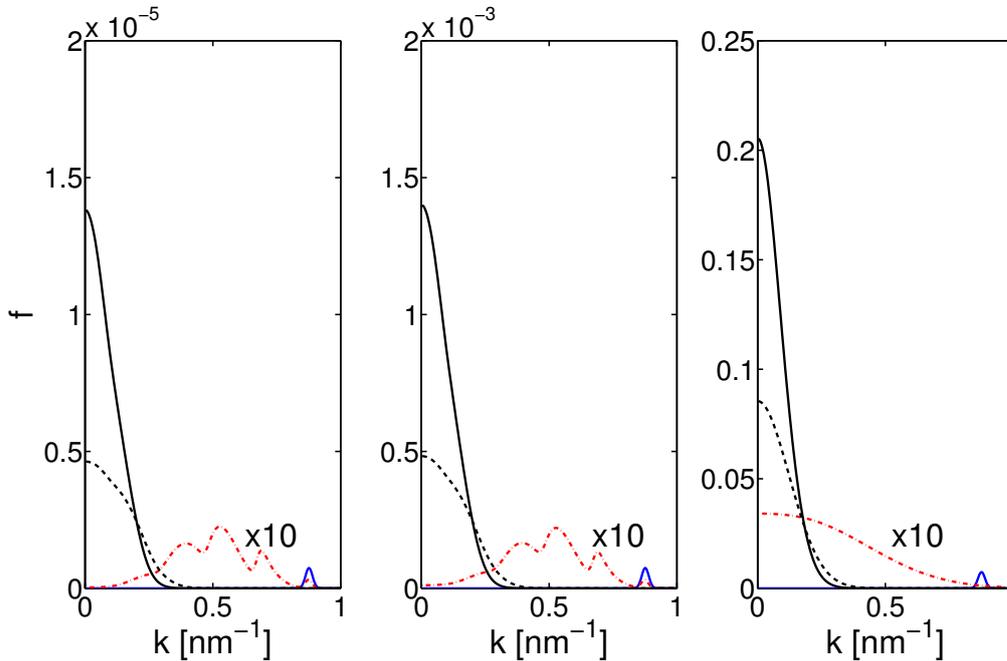
beschrieben werden. Unter Annahme eines Kontaktpotentials lautet der X-X-Stoßterm [79, 80]

$$C_{X-X} = \frac{g^2}{\hbar(2\pi)^5} \int d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 d\mathbf{k}_4 [(1 + f_{\mathbf{k}})(1 + f_{\mathbf{k}_2})f_{\mathbf{k}_3}f_{\mathbf{k}_4} - f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}_2}(1 + f_{\mathbf{k}_3})(1 + f_{\mathbf{k}_4})] \\ \times \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_3} - \varepsilon_{\mathbf{k}_4}) \quad (3.29)$$

mit der bereits zuvor verwendeten Wechselwirkungskonstante  $g$  (siehe Gleichung (1.4)). Die X-Ph-Stöße können über den von Ivanov *et al.* angegebenen Stoßterm [81]

$$C_{X-Ph} = -\frac{\pi D^2}{\hbar \rho v_s} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| \left\{ \left[ f_{\mathbf{k}}(1 + f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\text{Ph}})(1 + f_{\mathbf{k}'}) - (1 + f_{\mathbf{k}})f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\text{Ph}}f_{\mathbf{k}'} \right] \right. \\ \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) + \left[ f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\text{Ph}}(1 + f_{\mathbf{k}'}) - (1 + f_{\mathbf{k}})(1 + f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\text{Ph}})f_{\mathbf{k}'} \right] \\ \left. \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}) \right\} \quad (3.30)$$

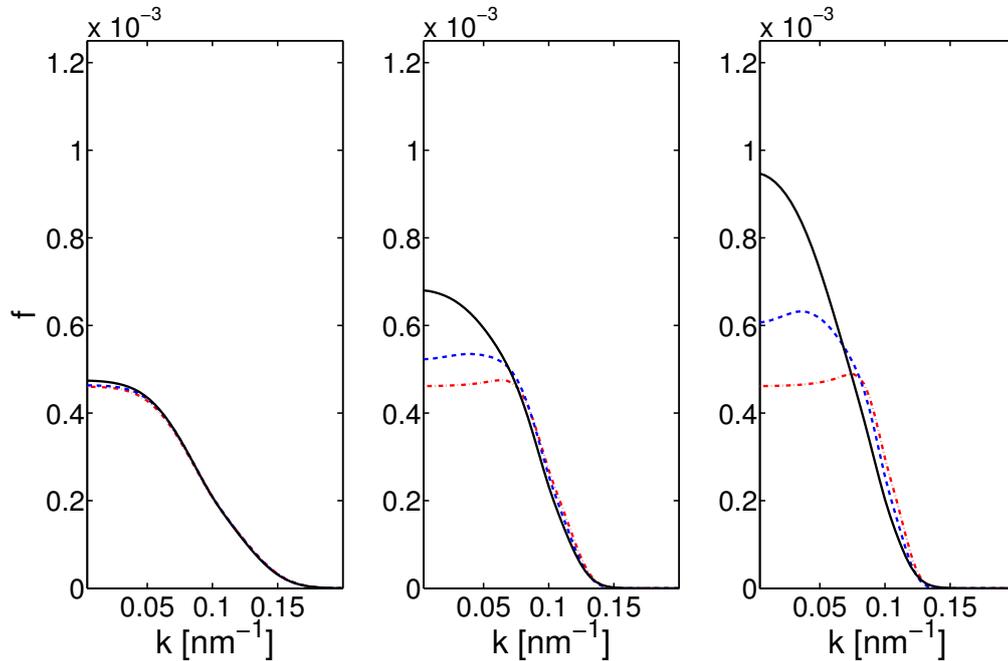
berechnet werden. Hierbei sind  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  bzw.  $\hbar\omega_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$  die Exzitonen- bzw. Phononenenergien,  $D$  das Deformationspotential,  $\rho$  die Kristalldichte und  $v_s$  die Schallgeschwindigkeit. Der erste Summand auf der rechten Seite von (3.30) steht für Stokes-Streuung (Emission eines Phonons) und der zweite für Anti-Stokes-Streuung (Absorption eines Phonons). Die Wechselwirkung der Exzitonen mit den Phononen in einem verspannten Kristall wurde bereits im Abschnitt 1.2 diskutiert. Sowohl die Streuung an TA-Phononen als auch die an LA-Phononen kann durch den Stoßterm (3.30) beschrieben werden.



**Abbildung 3.1.:** Verteilungsfunktion für  $t = 0$  ns (blaue Kurve), 0,05 ns (strichpunktierte rote Kurve), 0,5 ns (gestrichelte schwarze Kurve) und 1,0 ns (durchgezogene schwarze Kurve) mit  $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  (links),  $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  (Mitte) und  $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (rechts).

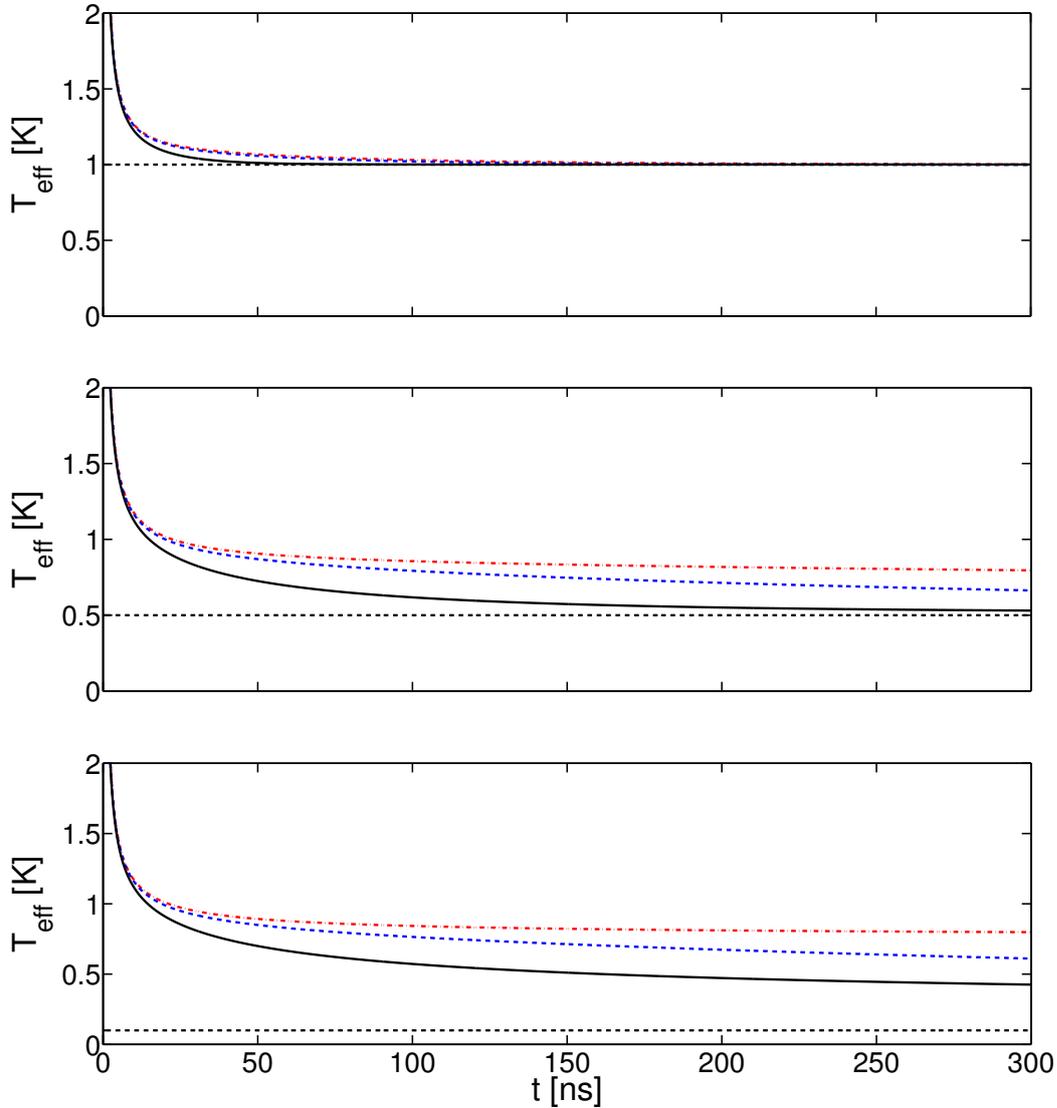
### 3.2.1. Relaxation

Im folgenden soll die vereinfachte Boltzmann-Gleichung (3.28) ausgehend von einer typischen Anfangsverteilung direkt gelöst werden. Dazu wird für die Anfangsverteilung der Exzitonen eine gaußförmige Verteilung mit dem Maximum bei  $k = 0,876 \text{ nm}^{-1}$  gewählt. Dieser Wert entspricht der in Abschnitt 1.2 erläuterten Anregungsmethode über das Orthoexziton. Die Relaxation einer durch den Laser bestimmten Anfangsverteilung hin zu einer Gleichgewichtsverteilung ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Es ist gut zu erkennen, wie mit steigenden Dichten der Einfluss der X-X-Stöße immer stärker zunimmt. Bei Dichten von  $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  ist bereits nach 50 ps eine gaußförmige Verteilung erreicht, während bei niedrigen Dichten zu dieser Zeit noch deutlich die Phononseitenbanden zu erkennen sind. In allen Fällen lässt sich spätestens nach 1 ns die Verteilung durch eine Boseverteilung anpassen. Somit erreichen die Exzitonen selbst bei sehr niedrigen Dichten innerhalb einer gegenüber ihrer Lebensdauer ( $\tau = 650$  ns) sehr kurzen Zeit eine lokale Gleichgewichtsverteilung der Form (3.27). Im Gegensatz zum globalen Gleichgewicht ist hier allerdings die Thermalisierung der Exzitonen noch nicht abgeschlossen. Wie bereits durch Ivanov *et al.* in [81] gezeigt, wird die Kühlung durch Phononen bei sehr tiefen Temperaturen zunehmend ineffizienter. Dies liegt an der Tatsache, dass Exzitonen mit Energien  $E < mv_s^2/2 = E_0$  nicht über den Stokes-Term in (3.30) mit den Phononen wechselwirken können. Dadurch werden die Exzitonen in zwei Untersysteme aufgeteilt. Exzitonen mit Energien  $E > E_0$  werden effektiv durch Phononen gekühlt, während das für Exzitonen mit



**Abbildung 3.2.:** Verteilungsfunktion zu  $t = 5$  ns (links),  $t = 50$  ns (Mitte) und  $t = 100$  ns (rechts) bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,1$  K und einer Exzitondichte von  $\tilde{n} = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Exzitonen wechselwirken mit LA-Phononen (strichpunktierte rote Kurve), LA- und TA-Phononen (gestrichelte blaue Kurve) und mit anderen Exzitonen sowie LA- und TA-Phononen (schwarze Kurve).

Energie  $E < E_0$  nicht gilt. Durch dieses „Ausfrieren“ der Phononen bei sehr niedrigen Energien tritt der sogenannte *bottle-neck*-Effekt [81] bei der Relaxation der Exzitonen auf. Dieser Sachverhalt kann sehr gut anhand der in Abbildung 3.2 dargestellten Verteilungsfunktionen nachvollzogen werden. Betrachtet man nur die Wechselwirkung der Exzitonen mit LA-Phononen, so entsteht eine typische Deformation. Es bildet sich zunächst ein Plateau aus, welches bei  $E_0$  ein zunehmend ausgeprägtes Maximum bildet. Gleichzeitig fällt die Verteilungsfunktion zu hohen Energien immer steiler ab. Die Mitnahme der TA-Phononen bewirkt in diesem Fall nur eine Verschiebung des Maximums zu niedrigeren Energien, da die Schallgeschwindigkeit entsprechend niedriger ist. Im Gegensatz dazu bewirkt die Mitnahme von X-X-Stößen einen qualitativen Unterschied. Unter Einwirkung dieser Stöße verschwindet das Plateau und die Verteilungsfunktion nimmt für große Zeiten die Form einer Boseverteilung an. Die Thermalisierung verläuft in diesem Fall deutlich schneller als bei der Wechselwirkung mit Phononen allein. Dies erscheint im ersten Moment merkwürdig, da die X-X-Stöße sowohl energie- als auch impulserhaltend sind, kann aber anhand des folgenden Szenarios leicht verstanden werden. Vor einem Stoß haben zwei Exzitonen beide die Energie  $E_1 = E_2 = E_0$ . Nach dem Stoß hat das erste Exziton die Energie  $E_1 < E_0$  und das zweite Exziton die Energie  $E_2 > E_0$  mit  $E_1 + E_2 = 2E_0$ . Das Exziton mit  $E_2 > E_0$  kann wieder effektiv über Phononen gekühlt werden und das Exziton mit  $E_1 < E_0$  wurde in einen tiefer liegenden Energiezustand gestreut. Somit trägt die X-X-Streuung in Verbindung mit der Streuung an Phononen effektiv zur Kühlung des



**Abbildung 3.3.:** Entwicklung der effektiven Exzitonentemperatur  $T_{\text{eff}}$  bei einer Dichte von  $\tilde{n} = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  und einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$  (oben),  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  (Mitte) und  $T_{\text{Bad}} = 0,1 \text{ K}$ . Exzitonen stoßen dabei mit: LA-Phononen (rote Kurve); LA- und TA-Phononen (blaue Kurve); anderen Exzitonen, LA- und TA-Phononen (schwarze Kurve). Die gestrichelte schwarze Linie zeigt die entsprechende Badtemperatur.

Systems bei, trotz Energie- und Impulserhaltung. Um die unterschiedlichen Geschwindigkeiten des Thermalisierungsprozesses darzustellen, wird als Maß für die kinetische Energie pro Exziton die „effektive Temperatur“ über

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{N} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f_{\mathbf{k}} = \frac{3}{2} k_B T_{\text{eff}} \quad (3.31)$$

eingeführt. Diese „effektive Temperatur“ und die Temperatur im thermodynamischen Sinne sind nur für nichtentartete Systeme im Gleichgewicht identisch.

Der Verlauf der Thermalisierung ist unter Berücksichtigung verschiedener Stoßprozesse mittels der „effektiven Temperatur“ in Abbildung 3.3 für verschiedene Badtemperaturen dargestellt. Für hohe Badtemperaturen von  $T_{\text{Bad}} \geq 1,0$  K (obere Abbildung) unterscheiden sich die verschiedenen betrachteten Fälle kaum und die Thermalisierung der Exzitonen ist spätestens nach 100-200 ns abgeschlossen. Je tiefer jedoch die Badtemperatur abgesenkt wird, desto stärker treten Unterschiede zwischen den einzelnen Kurven zutage. Wie bereits diskutiert, ist die Kühlung bei Mitnahme aller Stoßterme am wirkungsvollsten. Aber selbst in diesem Fall werden die sehr niedrigen Badtemperaturen von  $T_{\text{Bad}} = 0,1$  K innerhalb der ersten 300 ns nicht erreicht. Da die Bedingungen für den Kühlungsprozess hier allerdings optimal sind (kein Auger-Effekt), bedeutet dies wohl, dass die Exzitonen in der Falle bei sehr niedrigen Badtemperaturen erst zu Zeiten thermalisieren, welche in der Größenordnung der Lebensdauer liegen.

Das wichtigste Resultat dieses Abschnittes ist jedoch das Erreichen einer lokalen Gleichgewichtsverteilung der Form (3.27) innerhalb der ersten Nanosekunde. Da in dieser kurzen Zeit die Bewegung der erzeugten Exzitonen in der Falle vernachlässigt werden kann, erlaubt dies die Annahme einer lokalen Gleichgewichtsverteilung für die thermischen Exzitonen. Der ebenfalls in diesem Abschnitt diskutierte *bottle-neck*-Effekt wird durch die Berücksichtigung der X-X-Stöße aufgehoben oder zumindest stark abgeschwächt. Zudem wurde der Auger-Effekt noch nicht berücksichtigt, welcher die Exzitonen lokal aufheizen kann. Es kann also in guter Näherung davon ausgegangen werden, dass sich die Exzitonen zu fast allen Zeiten in einer lokalen Gleichgewichtsverteilung befinden. Dadurch lassen sich die Gleichungen für die thermischen Exzitonen abschließen und die Berechnung einiger Stoßterme vereinfacht sich.

### 3.3. Lokales Gleichgewicht

Wie in Abschnitt 3.2 dargelegt, nimmt die Verteilungsfunktion unter diesen Anregungsbedingungen in kürzester Zeit die Form einer lokalen Gleichgewichtsverteilung an. Ein wichtiger Punkt ist hierbei die spezielle Abhängigkeit der Verteilungsfunktion von  $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}_n$ . Im lokalen Gleichgewicht ist  $\tilde{f}(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n, \mathbf{r}, t) = \tilde{f}(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t)$  eine gerade Funktion bezüglich  $\mathbf{p}'$  und die Momentengleichungen lassen sich vereinfachen. So ist zum Beispiel der Integrand in der Definition von  $\mathbf{Q}$  (3.24) das Produkt einer geraden und einer ungeraden Funktion bezüglich  $\mathbf{p}'$ . Integriert man also über den gesamten Impulsraum, so verschwindet dieser Term. Analog dazu verschwinden die nichtdiagonalen Terme von  $P_{ij}$  und die verbliebenen Diagonalterme lassen sich gemäß

$$P_{ii}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p'^2}{3m} \tilde{f}(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) = \tilde{P}(\mathbf{r}, t) \quad (3.32)$$

schreiben. Vergleicht man dies mit der Definition von  $\tilde{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$  in Gleichung (3.20), so folgt

$$\tilde{P}(\mathbf{r}, t) = \frac{2}{3}\tilde{\epsilon}(\mathbf{r}, t). \quad (3.33)$$

Dies ist die gleiche Relation wie in einem idealen Bosegas. Auch andere Größen wie z.B. Dichte und Fugazität können mittels eines effektiven chemischen Potentials

$$\tilde{\mu}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mu}(\mathbf{r}, t) - U(\mathbf{r}, t) \quad (3.34)$$

auf die gleiche Form gebracht werden wie in einem idealen Bosegas. Allerdings hängen alle Größen noch von Ort und Zeit ab.

Um die formale Analogie zu den klassischen Eulergleichungen herzustellen, wird statt der Dichte  $\tilde{n}$  die Massendichte  $\rho = m\tilde{n}$  verwendet und der Gradient des effektiven Potentials wird als externe Kraft  $\mathbf{F}^{\text{ext}} = -\nabla U$  aufgefasst. Mit diesen beiden Ersetzungen, dem Verschwinden von  $\mathbf{Q}$  und unter Nutzung von Gleichung (3.32) lauten die Momentengleichungen in ihrer finalen Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_n) &= m\Gamma_{X_c-X}^{(0)} + m\Gamma_{X_c-Ph}^{(0)} + m\Gamma_{E-V}^{(0)}, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}_n) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n) &= -\nabla \tilde{P} + \frac{\rho}{m} \mathbf{F}^{\text{ext}} + m\mathbf{v}_c \Gamma_{X_c-X}^{(0)} \\ &\quad + \Gamma_{X-Ph}^{(1)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(1)} + \Gamma_{E-V}^{(1)}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot [(E + \tilde{P})\mathbf{v}_n] &= \frac{\rho \mathbf{v}_n}{m} \cdot \mathbf{F}^{\text{ext}} + (\varepsilon_c - U)\Gamma_{X_c-X}^{(0)} \\ &\quad + \Gamma_{X-Ph}^{(2)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(2)} + \Gamma_{E-V}^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

In Kombination mit der GPG (3.3) bilden diese ein abgeschlossenes System aus 6 simultan zu lösenden Gleichungen. Durch die Verwendung einer dem Problem angepassten Geometrie lässt sich diese Anzahl jedoch deutlich verringern.

### 3.3.1. Kugelkoordinaten

Die im Experiment durch Druck erzeugten Fallen können in guter Näherung durch einen dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillator beschrieben werden. Aufgrund dieser Symmetrie reduziert sich das System auf ein quasi-1-dimensionales. Unter Beachtung der Form der Divergenz in Kugelkoordinaten ergeben sich die Momentengleichungen der thermischen

Exzitonen zu

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}[\rho v_n] &= m\Gamma_{X_c-X}^{(0)} + m\Gamma_{X_c-Ph}^{(0)} + m\Gamma_{E-V}^{(0)} - \frac{2}{r}\rho v_n, \\
\frac{\partial}{\partial t}[\rho v_n] + \frac{\partial}{\partial r}[\rho v_n^2 + \tilde{P}] &= \frac{\rho}{m}F^{ext} - \frac{2}{r}\rho v_n^2 + mv_c\Gamma_{X_c-X}^{(0)} \\
&\quad + \Gamma_{X-Ph}^{(1)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(1)} + \Gamma_{E-V}^{(1)}, \\
\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}[(E + \tilde{P})v_n] &= \frac{\rho v_n}{m}F^{ext} + (\varepsilon_c - U)\Gamma_{X_c-X}^{(0)} - \frac{2}{r}(E + \tilde{P})v_n \\
&\quad + \Gamma_{X-Ph}^{(2)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(2)} + \Gamma_{E-V}^{(2)}
\end{aligned} \tag{3.36}$$

mit den für sphärische Koordinaten typischen  $1/r$ -Quelltermen. Dieses Gleichungssystem lautet in vektorieller Schreibweise

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial r}\mathbf{f}(\mathbf{w}) &= \mathbf{s}(\mathbf{w}), \\
\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_n \\ E \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} \rho v_n \\ \rho v_n^2 + \tilde{P} \\ (E + \tilde{P})v_n \end{pmatrix} &= \mathbf{s}(\mathbf{w})
\end{aligned} \tag{3.37}$$

mit den „Erhaltungsgrößen“  $w_1 = \rho$ ,  $w_2 = \rho v_n$  und  $w_3 = E$ . Die Quellterme auf der rechten Seite sind gegeben durch

$$\mathbf{s}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} m\Gamma_{X_c-X}^{(0)} + m\Gamma_{X_c-Ph}^{(0)} + m\Gamma_{E-V}^{(0)} - \frac{2}{r}\rho v_n \\ \frac{\rho}{m}F^{ext} - \frac{2}{r}\rho v_n^2 + mv_c\Gamma_{X_c-X}^{(0)} + \Gamma_{X-Ph}^{(1)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(1)} + \Gamma_{E-V}^{(1)} \\ \frac{\rho v_n}{m}F^{ext} + (\varepsilon_c - U)\Gamma_{X_c-X}^{(0)} - \frac{2}{r}(E + \tilde{P})v_n + \Gamma_{X-Ph}^{(2)} + \Gamma_{X_c-Ph}^{(2)} + \Gamma_{E-V}^{(2)} \end{pmatrix}. \tag{3.38}$$

Die GPG (3.3) erweitert um die halbleiterspezifischen Terme lautet

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} + gn_c + 2g\tilde{n} - \frac{i\hbar}{\tau} - iR_{X_c-Ph} - iR_{X_c-X} \right] \Phi. \tag{3.39}$$

Die erweiterte GPG (3.39) in Verbindung mit den hydrodynamischen Gleichungen (3.36) liefert eine selbstkonsistente Beschreibung der Exzitonen in der Falle. Abgesehen von atomaren Systemen werden solche gekoppelten Gleichungen von GPG und Quanten-Boltzmann-Gleichung bzw. Momentengleichungen auch häufig zur Beschreibung von Exziton-Polaritonen verwendet. So leiten Haug *et al.* in [96] ausgehend von Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen entsprechende Gleichungen ab. Diese stimmen im wesentlichen mit dem hier vorgestellten Gleichungssystem überein. Der Hauptunterschied zu den Arbeiten zu Exziton-Polaritonen besteht in der Behandlung der thermischen Exzitonen. Diese werden im Kontext von Exziton-Polariton-Kondensation nur als Reservoir betrachtet, welches häufig eine konstante Temperatur und keine Driftbewegungen besitzt. Daher wird zum Beispiel in [96] für die Verteilungsfunktion der

Exzitonen eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung angenommen. Während in diesem Modell also der Fokus auf den thermischen Exzitonen liegt um zu ergründen ob und unter welchen Umständen ein Kondensat entsteht, konzentrieren sich Arbeiten zu Exziton-Polaritonen auf die kondensierte Phase und deren Dynamik.

Das hier entwickelte Modell enthält alle relevanten Stoßterme, die räumliche Inhomogenität des Systems und eine explizite Gleichung für die kondensierte Phase. Damit geht es über die eingangs erwähnten älteren Arbeiten im Volumenmaterial [51, 79, 80, 81, 82] deutlich hinaus. Für die numerische Lösung der Gleichungen fehlen nur noch einige Stoßterme, die im folgenden diskutiert werden.

### 3.4. Stoßterme

In diesem Abschnitt sollen die benötigten Stoßterme und damit zusammenhängende Probleme diskutiert werden. Eine Reihe von Momenten der verschiedenen Stoßterme sind bereits durch die Gleichungen (3.16), (3.17) und (3.18) bestimmt. Es verbleiben somit das nullte Moment von  $C_{X_c-X}$ , das erste und das zweite Moment von  $C_{X-Ph}$  sowie alle Momente von  $C_{E-V}$ .

#### 3.4.1. Exziton-Phonon-Stoßterm $C_{X-Ph}$

Ausgangspunkt ist der von Ivanov *et al.* formulierte Stoßterm [81]

$$\begin{aligned}
C_{X-Ph} = & -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}} |M_{X-Ph}(\mathbf{p}-\mathbf{k})|^2 \left\{ \left[ f_{\mathbf{k}}(1+f_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{Ph})(1+f_{\mathbf{p}}) - (1+f_{\mathbf{k}})f_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{Ph}f_{\mathbf{p}} \right] \right. \\
& \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}) + \left[ f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^{Ph}(1+f_{\mathbf{p}}) - (1+f_{\mathbf{k}})(1+f_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^{Ph})f_{\mathbf{p}} \right] \\
& \left. \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \hbar\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) \right\} \quad (3.40)
\end{aligned}$$

mit den Exzitonenergien  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m + U(\mathbf{r}, t)$ , den Phononenergien  $\hbar\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} = \hbar v_s |\mathbf{p}-\mathbf{k}|$  und den Verteilungsfunktionen der thermischen Exzitonen  $f_{\mathbf{k}}$  bzw. der Phononen  $f_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{Ph}$ . Letztere ist gegeben über  $f_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{Ph} = [\exp(\hbar\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}/k_B T_{\text{Bad}})]^{-1}$ , da in diesem Modell von einem Phononenbad mit unendlicher Wärmekapazität ausgegangen wird. Das Übergangsmatrixelement ist gegeben durch

$$|M_{X-Ph}(\mathbf{p}-\mathbf{k})|^2 = \frac{\hbar D^2 |\mathbf{p}-\mathbf{k}|}{2V \rho v_s} \quad (3.41)$$

mit dem Deformationspotential  $D$ , der Schallgeschwindigkeit  $v_s$ , der Kristalldichte  $\rho$  und dem Volumen des Kristalls  $V$ . Gleichung (3.40) beschreibt sowohl Stokes- (erster Summand) als auch Anti-Stokes-Streuung (zweiter Summand).

Die Streuung von Exzitonen ins und aus dem Kondensat mittels Phononen ist in diesem Stoßterm enthalten. Hierzu muss vor dem Kontinuumsübergang der erste Summand der  $\mathbf{p}$ -Summe abgespalten werden. Da es sich bei diesem ausgezeichneten  $\mathbf{p}$  um das Kondensat handelt, ist die Energie entsprechend  $\varepsilon_p = \varepsilon_c$  und der Wellenvektor  $\mathbf{p} = \mathbf{k}_c = m\mathbf{v}_c/\hbar$ . Aufgrund der makroskopischen Besetzung des Kondensates gilt zudem  $f_{\mathbf{p}} = 1 + f_{\mathbf{p}} = Vn_c(\mathbf{r}, t)$ . Die entsprechenden Momente für den ersten Summanden lauten somit

$$\begin{aligned} \Gamma_{X_c-\text{Ph}}^{(n)} &= -\frac{\pi D^2 n_c}{\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |\mathbf{k}_c - \mathbf{k}| \Phi_n(\mathbf{k}) \left\{ \left[ f_{\mathbf{k}}(1 + f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_c}^{\text{Ph}}) - (1 + f_{\mathbf{k}})f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_c}^{\text{Ph}} \right] \right. \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_c - \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_c}) + \left[ f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}_c-\mathbf{k}}^{\text{Ph}} - (1 + f_{\mathbf{k}})(1 + f_{\mathbf{k}_c-\mathbf{k}}^{\text{Ph}}) \right] \\ &\quad \left. \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_c + \hbar\omega_{\mathbf{k}_c-\mathbf{k}}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

mit  $\Phi_0(\mathbf{k}) = 1$ ,  $\Phi_1(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}$  und  $\Phi_2(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/2m$ . Analog zu Gleichung (3.7) ist der Zusammenhang zwischen  $\Gamma_{X_c-\text{Ph}}^{(0)}$  und  $R_{X_c-\text{Ph}}$  über

$$\Gamma_{X_c-\text{Ph}}^{(0)} = \frac{2n_c}{\hbar} R_{X_c-\text{Ph}} \quad (3.43)$$

gegeben.

Für die restliche  $\mathbf{p}$ -Summe wird der Kontinuumsübergang durchgeführt und  $\mathbf{p}$  in  $\mathbf{k}'$  umbenannt. Die entsprechenden Momente ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \Gamma_{X-\text{Ph}}^{(n)} &= -\frac{2\pi \hbar D^2}{\hbar 2\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| \Phi_n(\mathbf{k}) \left\{ \left[ f_{\mathbf{k}}(1 + f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\text{Ph}})(1 + f_{\mathbf{k}'}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (1 + f_{\mathbf{k}})f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\text{Ph}}f_{\mathbf{k}'} \right] \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) + \left[ f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\text{Ph}}(1 + f_{\mathbf{k}'}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (1 + f_{\mathbf{k}})(1 + f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\text{Ph}})f_{\mathbf{k}'} \right] \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Vertauscht man im Stokes-Term  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k}'$ , so lassen sich Stokes- und Anti-Stokes-Term zu

$$\begin{aligned} \Gamma_{X-\text{Ph}}^{(n)} &= -\frac{2\pi D^2}{2\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| [\Phi_n(\mathbf{k}) - \Phi_n(\mathbf{k}')] \left[ f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\text{Ph}}(1 + f_{\mathbf{k}'}) \right. \\ &\quad \left. - (1 + f_{\mathbf{k}})(1 + f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\text{Ph}})f_{\mathbf{k}'} \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (3.45)$$

zusammenfassen. Das Verschwinden des nullten Moments ist in dieser Schreibweise sofort ersichtlich.

Da für die Verteilungsfunktionen der Exzitonen die Form einer lokalen Gleichgewichtsverteilung angenommen wird (siehe Gleichung (3.27)), hängen diese nach der Verschiebung

$\hbar\mathbf{k} - m\mathbf{v}_n = \hbar\tilde{\mathbf{k}}$  und  $\hbar\mathbf{k}' - m\mathbf{v}_n = \hbar\tilde{\mathbf{k}}'$  nur noch von den jeweiligen Beträgen ab,

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(n)} &= -\frac{2\pi D^2}{2\rho v_s} \int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}'}{(2\pi)^3} |\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}| [\Phi_n(\tilde{\mathbf{k}} + m\mathbf{v}_n/\hbar) - \Phi_n(\tilde{\mathbf{k}}' + m\mathbf{v}_n/\hbar)] \\ &\quad \times \left[ \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}} f_{\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}}^{\text{Ph}} (1 + \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'}) - (1 + \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}}) (1 + f_{\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}}^{\text{Ph}}) \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'} \right] \\ &\quad \times \delta\left(\frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \tilde{k}'^2}{2m} + \hbar(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}') \cdot \mathbf{v}_n + \hbar|\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}|v_s\right).\end{aligned}\quad (3.46)$$

Die Phononenverteilung ihrerseits hängt nur von  $|\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}|$  ab, und es bietet sich somit die Substitution  $\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}'$  an. Diese wird verwendet, um  $\tilde{\mathbf{k}}$  aus der Gleichung zu eliminieren.

Unter Verwendung der Abkürzung  $\hbar\Omega = \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_n + \hbar q v_s$  ergibt sich

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(n)} &= -\frac{2\pi D^2}{2\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}'}{(2\pi)^3} q [\Phi_n(\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}' + m\mathbf{v}_n/\hbar) - \Phi_n(\tilde{\mathbf{k}}' + m\mathbf{v}_n/\hbar)] \\ &\quad \times \left[ \tilde{f}_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'} f_q^{\text{Ph}} (1 + \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'}) - (1 + \tilde{f}_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'}) (1 + f_q^{\text{Ph}}) \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'} \right] \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'} - \varepsilon_{\tilde{\mathbf{k}}'} + \hbar\Omega).\end{aligned}\quad (3.47)$$

Führt man nun eine phononartige Boseverteilung mit der Temperatur der Exzitonen  $T$

$$f_{\Omega}^B = \left[ e^{\hbar\Omega/k_B T} - 1 \right]^{-1} \quad (3.48)$$

ein, so lässt sich der Ausdruck weiter umformen zu

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(n)} &= -\frac{2\pi D^2}{2\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}'}{(2\pi)^3} q [\Phi_n(\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}' + m\mathbf{v}_n/\hbar) - \Phi_n(\tilde{\mathbf{k}}' + m\mathbf{v}_n/\hbar)] \\ &\quad \times [f_q^{\text{Ph}} - f_{\Omega}^B] \delta(\varepsilon_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'} - \varepsilon_{\tilde{\mathbf{k}}'} + \hbar\Omega) [\tilde{f}_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'} - \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'}].\end{aligned}\quad (3.49)$$

In dieser Schreibweise wird das Verschwinden aller Momente im globalen Gleichgewicht deutlich. Dieses ist nämlich erreicht, wenn  $\mathbf{v}_n = 0$  und  $T(\mathbf{r}, t) = T_{\text{Bad}}$  gilt, und somit  $f_q^{\text{Ph}} = f_{\Omega}^B$  ist.

## Erstes Moment

Zur Berechnung des ersten Momentes wird  $\Phi_1(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}$  eingesetzt und das Stoßintegral lautet

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} &= -\frac{2\pi D^2}{2\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} q \hbar\mathbf{q} [f_q^{\text{Ph}} - f_{\Omega}^B] \\ &\quad \times \int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}'}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'} - \varepsilon_{\tilde{\mathbf{k}}'} + \hbar\Omega) [\tilde{f}_{\mathbf{q} + \tilde{\mathbf{k}}'} - \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'}].\end{aligned}$$

Die Integration über  $\tilde{\mathbf{k}}'$  lässt sich analytisch ausführen [97] und ergibt

$$\int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}'}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{k}}'} - \varepsilon_{\tilde{\mathbf{k}}'} + \hbar\Omega) [\tilde{f}_{\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{k}}'} - \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'}] = \frac{m^2 k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^4 q} \ln \left\{ \frac{1 - \exp[\beta(-E^-/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]}{1 - \exp[\beta(-E^+/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]} \right\}$$

mit  $E^\pm = (\pm \hbar q/2 - m\Omega/q)^2$  und der Annahme, dass die Verteilungsfunktion die Form  $\tilde{f}_k = \{\exp[\beta(\hbar^2 k^2/2m - \tilde{\mu}_{\text{eff}})] - 1\}^{-1}$  besitzt. Es ergibt sich also

$$\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} = -\frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho v_s (2\pi)^4 \hbar^3} \int d\mathbf{q} \mathbf{q} [f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B] \ln \left\{ \frac{1 - \exp[\beta(-E^-/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]}{1 - \exp[\beta(-E^+/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]} \right\}.$$

Für die Winkelintegration wird die  $z$ -Achse in  $\mathbf{v}_n$ -Richtung gelegt. Dadurch verschwinden bei der  $\phi$ -Integration alle Komponenten von  $\mathbf{q}$ , welche nicht parallel zu  $\mathbf{v}_n$  sind. Für die Richtung parallel zu  $\mathbf{v}_n$  ( $z$ -Komponente) ergibt die Integration  $2\pi$ . Das verbleibende Doppelintegral

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} &= -\mathbf{e}_v \frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho v_s (2\pi \hbar)^3} \int_0^\infty dq q^3 \int_{-1}^1 dz z [f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B] \\ &\quad \times \ln \left\{ \frac{1 - \exp[\beta(-E^-/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]}{1 - \exp[\beta(-E^+/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]} \right\} \end{aligned} \quad (3.50)$$

lässt sich nicht analytisch berechnen und muss numerisch ausgewertet werden. Die Winkelabhängigkeit ist, durch das Auftreten von  $z$ , dabei sowohl in  $E^\pm = [\pm \hbar q/2 - m(vz + v_s)]^2$  als auch in  $\Omega = qvz + v_s q$  enthalten.

## Zweites Moment

Zur Auswertung der Differenz von  $\Phi_n(\mathbf{k}) - \Phi_n(\mathbf{k}')$  ist es sinnvoll, Gleichung (3.46) zu betrachten. Für den speziellen Fall  $\Phi_2(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/2m$  kann nämlich unter Ausnutzung der Deltafunktion in (3.46) die Differenz auf folgende Form gebracht werden

$$\begin{aligned} \frac{(\hbar\tilde{\mathbf{k}} + m\mathbf{v}_n)^2}{2m} - \frac{(\hbar\tilde{\mathbf{k}}' + m\mathbf{v}_n)^2}{2m} &= \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \tilde{k}'^2}{2m} + \hbar(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}') \cdot \mathbf{v}_n \\ &= -\hbar|\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}|v_s. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Entsprechend lautet das zu berechnende Integral nach Einführung der Substitution  $\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}'$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{X-Ph}}^{(2)} &= \frac{2\pi D^2}{2\rho v_s} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \hbar q^2 v_s [f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B] \\ &\quad \times \int \frac{d\tilde{\mathbf{k}}'}{(2\pi)^3} \delta(e_{\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{k}}'} - e_{\tilde{\mathbf{k}}'} + \hbar\Omega) [\tilde{f}_{\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{k}}'} - \tilde{f}_{\tilde{\mathbf{k}}'}] \\ &= \frac{2\pi \hbar D^2}{2\rho} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} q^2 [f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B] \\ &\quad \times \frac{m^2 k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^4 q} \ln \left\{ \frac{1 - \exp[\beta(-E^-/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]}{1 - \exp[\beta(-E^+/2m + \tilde{\mu})]} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dq q^3 \int_{-1}^1 dz [f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B] \\
&\quad \times \ln \left\{ \frac{1 - \exp[\beta(-E^-/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]}{1 - \exp[\beta(-E^+/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})]} \right\}, \tag{3.52}
\end{aligned}$$

wobei wiederum die  $\tilde{\mathbf{k}}'$ -Integration analytisch ausgeführt wurde. Zur Berechnung der benötigten Momente müssen also die entsprechenden Doppelintegrale in (3.50) und (3.52) numerisch berechnet werden. Details zur Umsetzung dieser Rechnungen finden sich im Anhang B.3.

### 3.4.2. Stoßterm Kondensat-Thermische Exzitonen $C_{X_c-X}$

Der Stoßterm  $C_{X_c-X}$  beschreibt Stöße von Exzitonen, bei denen mindestens einer der Anfangs- oder Endzustände die kondensierte Phase ist. Nach Griffin *et al.* [74] ergibt sich dieser zu

$$\begin{aligned}
C_{X_c-X}[f, \Phi] &= \frac{2g^2 n_c}{(2\pi)^2 \hbar^4} \int d\mathbf{p}_1 \int d\mathbf{p}_2 \int d\mathbf{p}_3 \delta(m\mathbf{v}_c + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3) \\
&\quad \times \delta(\varepsilon_c + \varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}_3}) [\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) - \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_2) - \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_3)] \\
&\quad \times [(1 + f_{\mathbf{p}_1}) f_{\mathbf{p}_2} f_{\mathbf{p}_3} - f_{\mathbf{p}_1} (1 + f_{\mathbf{p}_2})(1 + f_{\mathbf{p}_3})]. \tag{3.53}
\end{aligned}$$

Die Energie der thermischen Exzitonen  $\varepsilon_{\mathbf{p}}$  ist über (3.15) und die Energie eines Teilchens im Kondensat  $\varepsilon_c$  durch (3.6) gegeben.

Unter der Annahme eines lokalen Gleichgewichts für die Verteilungsfunktion der thermischen Exzitonen ergibt sich das gesuchte nullte Moment des Stoßterms zu [74]

$$\begin{aligned}
\Gamma_{X_c-X}^{(0)} &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_{X_c-X} \\
&= -\frac{2g^2 n_c}{(2\pi)^5 \hbar^7} (1 - e^{-\beta[\tilde{\mu} - \mu_c - \frac{1}{2}m(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_c)^2]}) \int d\mathbf{p}_1 \int d\mathbf{p}_2 \int d\mathbf{p}_3 \\
&\quad \times \delta(m\mathbf{v}_c + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3) \delta(\varepsilon_c + \varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}_3}) \\
&\quad \times (1 + \tilde{f}_{\mathbf{p}_1}) \tilde{f}_{\mathbf{p}_2} \tilde{f}_{\mathbf{p}_3}. \tag{3.54}
\end{aligned}$$

Die Verteilungsfunktion in diesem Modell ist über Gleichung (3.27) gegeben. Aufgrund dieser Form liegt eine Verschiebung aller Impulse um  $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}_n = \hbar\mathbf{k}$  nahe. Das Argument der Impuls-Deltafunktion lautet nach der Verschiebung

$$\begin{aligned}
m\mathbf{v}_c + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 &= m(\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_n) + (\mathbf{p}_1 - m\mathbf{v}_n) - (\mathbf{p}_2 - m\mathbf{v}_n) - (\mathbf{p}_3 - m\mathbf{v}_n) \\
&= m\mathbf{v}'_c + \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}'_3 \\
&= \hbar(\mathbf{k}_c + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3). \tag{3.55}
\end{aligned}$$

Entsprechend gilt für das Argument der Energie-Deltafunktion

$$\begin{aligned}
\varepsilon_c + \varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}_3} &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}_c^2 + \mu_c + \frac{p_1^2}{2m} + U - \frac{p_2^2}{2m} - U - \frac{p_3^2}{2m} - U \\
&= \frac{1}{2}m\mathbf{v}_c^2 + \mu_c + \frac{1}{2}m\mathbf{v}_n^2 + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3) \cdot \mathbf{v}_n \\
&\quad + \frac{(\mathbf{p}_1 - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} + U - \frac{(\mathbf{p}_2 - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} - U - \frac{(\mathbf{p}_3 - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} - U \\
&= \frac{1}{2}m(\mathbf{v}_c^2 - 2\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_n + \mathbf{v}_n^2) + \mu_c + \varepsilon_{\mathbf{p}'_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}'_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}'_3} \\
&= \frac{1}{2}m(\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_n)^2 + \mu_c + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_3} \\
&= \varepsilon'_c + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_3}, \tag{3.56}
\end{aligned}$$

wobei die Impuls-Deltafunktion ausgenutzt wurde. Werden beide Ergebnisse in Gleichung (3.54) eingesetzt, ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Gamma_{X_c-X}^{(0)} &= -\frac{2g^2 n_c}{(2\pi)^5 \hbar} \left(1 - e^{-\beta[\tilde{\mu} - \varepsilon'_c]}\right) \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \\
&\quad \times \delta(\mathbf{k}_c + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \delta(\varepsilon'_c + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_3}) \\
&\quad \times (1 + \tilde{f}_{k_1}) \tilde{f}_{k_2} \tilde{f}_{k_3}. \tag{3.57}
\end{aligned}$$

In dieser Darstellung ist  $\Gamma_{X_c-X}^{(0)}$  formal analog zu  $C_{X-X}$  in Gleichung (3.29). Beide Integrale können somit durch die von Snoke *et al.* in [79] vorgeschlagene Methode berechnet werden. Diese und das numerische Vorgehen sind im Anhang B.2 genau erläutert.

### 3.4.3. Erzeugung und Vernichtung von Exzitonen $C_{E-V}$

Die Erzeugung und Vernichtung von Exzitonen geht über die Momente des Stoßterms  $C_{E-V}$  ( $\Gamma_{E-V}^{(n)}$ ) in die hydrodynamischen Gleichungen (3.36) ein. Diese berücksichtigen gemäß (3.13) die endliche Lebensdauer  $C_{\text{Rek}}$ , den Auger-Zerfall  $C_{\text{Auger}}$  und den Pumplaser  $C_{\text{Laser}}$ . In diesem Abschnitt soll die explizite Gestalt dieser Stoßterme sowie die der entsprechenden Momente angegeben bzw. berechnet werden.

#### Lebensdauer

Der Einfluss der endlichen Lebensdauer  $\tau$  wird üblicherweise über

$$C_{\text{Rek}} = -\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tau} \tag{3.58}$$

beschrieben. Mit den Definitionen in Gleichungen (3.19) und (3.20) ergeben sich die entsprechenden Momente zu

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{Rek}}^{(0)} &= -\frac{\tilde{n}(\mathbf{r}, t)}{\tau}, \\ \Gamma_{\text{Rek}}^{(1)} &= -m\tilde{n}(\mathbf{r}, t)\frac{\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t)}{\tau}, \\ \Gamma_{\text{Rek}}^{(2)} &= -\frac{E(\mathbf{r}, t)}{\tau}.\end{aligned}\quad (3.59)$$

Für die Lebensdauer wird  $\tau = 650$  ns verwendet [25].

### Pumplaser

Wie bereits in Abschnitt 1.2 dargelegt, erfolgt die Erzeugung der Paraexzitonen über die Konversion von primär angeregten Orthoexzitonen. Im Experiment werden durch den Pumplaser Orthoexzitonen am Rand der Falle erzeugt, welche sich unter Aussendung eines TA-Phonons zu Paraexzitonen umwandeln. Da Ortho- und Paraexzitonen energetisch einen Abstand von  $\Delta = 12,12$  meV haben und die kinetische Energie der Orthoexzitonen vor der Umwandlung vernachlässigbar ist, muss gelten

$$\Delta = \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m} + \hbar v_s^{\text{TA}} k_p. \quad (3.60)$$

Hierbei ist  $v_s^{\text{TA}}$  die Schallgeschwindigkeit der TA-Phononen,  $k_p$  der Wellenvektor und  $m$  die Masse des entstehenden Paraexzitons. Mit  $v_s^{\text{TA}} = 1300$  m/s ergibt sich  $k_p = 0,876$  nm<sup>-1</sup>. Die Verteilungsfunktion im  $\mathbf{k}$ -Raum ist also eine Gaußkurve der Form  $f_k = \exp[-(k-k_p)^2/\Delta k^2]$  mit dem Maximum bei  $k_p$  und einem Breitenparameter  $\Delta k = 0,0195$  nm<sup>-1</sup>. Die Breite der Verteilung ergibt sich hierbei aus den verschiedenen möglichen Werten für  $v_s^{\text{TA}}$  [75]. Die räumliche Verteilung der Exzitonen folgt ebenfalls einer Gaußkurve, wobei Maximum und Breite durch die Form des Lasers vorgegeben sind. Es wird davon ausgegangen, dass die Exzitonen bei ihrer Erzeugung noch keine Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t)$  besitzen. Um die Temperatur der Exzitonen zu bestimmen, wird die Relaxation der gegebenen Anfangsverteilung innerhalb der ersten Nanosekunde im homogenen System berechnet. Über die Anpassung an eine lokale Gleichgewichtsverteilung wird anschließend die Temperatur der neu in das System einzubringenden Exzitonen bestimmt. Typischerweise haben Paraexzitonen mit der oben erläuterten Verteilung im  $\mathbf{k}$ -Raum nach einer Nanosekunde Relaxation noch eine Temperatur von ungefähr 4 K. Die Momente lauten demnach

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{Laser}}^{(0)} &= \varrho_{\text{Laser}}(\mathbf{r}, t), \\ \Gamma_{\text{Laser}}^{(1)} &= 0, \\ \Gamma_{\text{Laser}}^{(2)} &= E_{\text{Laser}}(\mathbf{r}, t),\end{aligned}\quad (3.61)$$

wobei  $\varrho_{\text{Laser}}(\mathbf{r}, t)$  die Veränderung der Exzitonendichte pro Zeiteinheit und  $E_{\text{Laser}}(\mathbf{r}, t)$  die entsprechende eingebrachte Energie beschreiben.

### Auger-Zerfall

Beim augerartigen Zweikörperzerfall wird eines der beiden beteiligten Exzitonen durch Rekombination zerstört und das andere ionisiert. Das dabei entstehende Elektron-Loch-Paar bildet nach kurzer Zeit wieder ein hochenergetisches Exziton. Welche Art von Exziton entsteht (Ortho- oder Paraexziton), ist dabei zufällig. Da aber die Ortho(0)-Exzitonen ein repulsives Fallenpotential vorfinden, werden sie aus der Falle gedrängt. Die restlichen Orthoexzitonen wandeln sich wieder zu Paraexzitonen um. Unter der Annahme eines konstanten Augerkoeffizienten  $A$  lautet das nullte Moment somit

$$\Gamma_{\text{Auger}}^{(0)} = -2A\tilde{n}^2(\mathbf{r}, t) + \frac{3}{4}A\tilde{n}^2(\mathbf{r}, t). \quad (3.62)$$

Es wird im folgenden also davon ausgegangen, dass der Augerkoeffizient  $A$  nicht von der Temperatur  $T$ , der Wellenzahl  $k$  oder dem Ort  $\mathbf{r}$  abhängt. Die neu entstandenen Exzitonen müssen zunächst ins lokale Gleichgewicht relaxieren, bevor sie in das Gleichungssystem (3.36) eingespeist werden können. Diese Relaxation dauert typischerweise nicht länger als 1 ns [52]. Es wird angenommen, dass die neu entstandenen Exzitonen in dieser Zeit keine Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t)$  aufbauen können. Das erste Moment lautet daher

$$\mathbf{\Gamma}_{\text{Auger}}^{(1)} = -2A\tilde{n}^2(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}_n(\mathbf{r}, t). \quad (3.63)$$

Die Energie der neu entstandenen Exzitonen wird größtenteils sehr schnell durch optische und akustische Phononen abgeführt. Dieser Prozess wird über die Lösung einer homogenen Boltzmann-Gleichung modelliert und die Energie beim Erreichen des lokalen Gleichgewichts ermittelt. Dieses Verfahren ist insgesamt analog zur Erzeugung von Exzitonen durch den Laser und kann durch

$$\Gamma_{\text{Auger}}^{(2)} = -2A\tilde{n}(\mathbf{r}, t)E(\mathbf{r}, t) + \frac{3}{4}A\tilde{n}(\mathbf{r}, t)E_{\text{Auger}} \quad (3.64)$$

beschrieben werden. Hierbei steht  $E_{\text{Auger}}$  für die Energiedichte, welche neu in das System eingebracht wird. Der Auger-Zerfall bewirkt also zweierlei, es werden effektiv Exzitonen vernichtet und das System wird durch die neu entstandenen Exzitonen aufgeheizt. Dieser Effekt wird eine zentrale Rolle spielen, wenn es um die Frage der Thermalisierung und die Entstehung eines möglichen Kondensates geht.

### 3.5. Ergebnisse

Das in den vorangegangenen Abschnitten entwickelte Modell lässt sich wie folgt zusammenfassen: Es wird von einer sphärischen Symmetrie ausgegangen und das Fallenpotential durch einen harmonischen Oszillator genähert. Für die Berechnung von Dichte, Impuls und Energie der Exzitonen müssen die Gleichungen (3.36) und (3.39) selbstkonsistent gelöst werden. Diese Gleichungen können verwendet werden, da die Verteilungsfunktion der thermischen Exzitonen innerhalb kürzester Zeit die Form einer lokalen Gleichgewichtsverteilung (3.27) annimmt. Die halbleiterspezifischen Stoßterme sind in den Gleichungen (3.36) enthalten und wurden gemäß den Angaben in Abschnitt 3.4 implementiert. Es wird für die Rechnungen davon ausgegangen, dass die Temperatur des Kristalls (der Phononen) und des umgebenden He-Bades stets gleich ist ( $T_{\text{Ph}} = T_{\text{Bad}}$ ). Für die Erzeugung der Exzitonen sind verschiedene Anregungsmethoden denkbar. Grundsätzlich ist zwischen einer gepulsten Anregung und einer Dauerstrichanregung zu unterscheiden. Bei der gepulsten Anregung zerfallen die Exzitonen kontinuierlich, während sie durch die Phononen gekühlt werden. Demnach sinken sowohl die Temperatur als auch die Zahl der Exzitonen mit fortschreitender Zeit ab. Im Gegensatz dazu werden bei der Dauerstrichanregung stetig neue Exzitonen erzeugt, welche die zerfallenden ersetzen können. Somit wird sich nach einer gewissen Zeit ein stationärer Zustand ausbilden, welcher durch eine konstante Exzitonenzahl gekennzeichnet ist. Es ist nicht zu erwarten, dass dieser stationäre Zustand die Form eines Quasigleichgewichts annimmt, da es sich hier um ein gepumptes System handelt. Aufgrund dieses fundamentalen Unterschiedes werden diese beiden Formen der Anregung getrennt voneinander behandelt und unterschiedlich charakterisiert.

Für die gepulste Anregung ist die Temperatur des Bades  $T_{\text{Bad}}$  und die Anzahl der anfänglich erzeugten Exzitonen  $N_0$  ausschlaggebend. Zusätzlich wird ein Maß für die Abweichung vom thermodynamischen Gleichgewicht über

$$\Delta = \frac{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{k} |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - \bar{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2}{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{k} |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2} \quad (3.65)$$

eingeführt. Hierbei ist  $\bar{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  die Verteilungsfunktion von Exzitonen mit der Temperatur des Bades  $T = T_{\text{Bad}}$  und der gleichen Teilchenzahl  $N(t)$  wie die der lokalen Gleichgewichtsverteilung  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ . Die Verteilung  $\bar{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  ist sozusagen der zu  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  korrespondierende Gleichgewichtszustand (siehe Abschnitt 2.1). Im folgenden werden die zu dieser Gleichgewichtsverteilung gehörigen Größen (Dichte, chemisches Potential,...) zu Vergleichszwecken herangezogen.

Bei der Dauerstrichanregung ist neben der Temperatur des Bades  $T_{\text{Bad}}$  die Erzeugungsrate der Exzitonen  $R_X$  entscheidend. Diese hat maßgeblichen Einfluss auf die Zahl der Exzitonen im stationären Zustand  $N_\infty$  und ist direkt mit der experimentell zugängliche Leistung des Pumplasers  $P_L$  verknüpft. Um Laserleistung und Exzitonenerzeugungsrate ineinander umzurechnen, wurde angenommen, dass jedes zweite Photon, welches auf den Kristall trifft, ein Exziton erzeugt [25]. Da bei dieser Art der Anregung stetig Exzitonen außerhalb der Falle er-

zeugt werden, wird im folgenden aufgrund der sphärischen Symmetrie neben der Dichte  $\tilde{n}(r, t)$  auch die gewichtete Dichte  $r^2\tilde{n}(r, t)$  gezeigt werden.

Darüber hinaus sind diverse Parameter und Variablen für die Diskussion der physikalischen Vorgänge in beiden Fällen relevant. Diese sollen im folgenden kurz eingeführt und erläutert werden. Da die Temperatur des Systems sowohl orts- als auch zeitabhängig ist, ist es sinnvoll, für verschiedene Fragestellungen verschiedene aus der lokalen Temperatur  $T(\mathbf{r}, t)$  abgeleitete Kenngrößen zu verwenden. Eine dieser Größen ist die mittlere Temperatur der Exzitonen  $\langle T(t) \rangle$ , welche über

$$\langle T(t) \rangle = \frac{1}{N} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} T(\mathbf{r}, t) f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \int d\mathbf{r} T(\mathbf{r}, t) \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \quad (3.66)$$

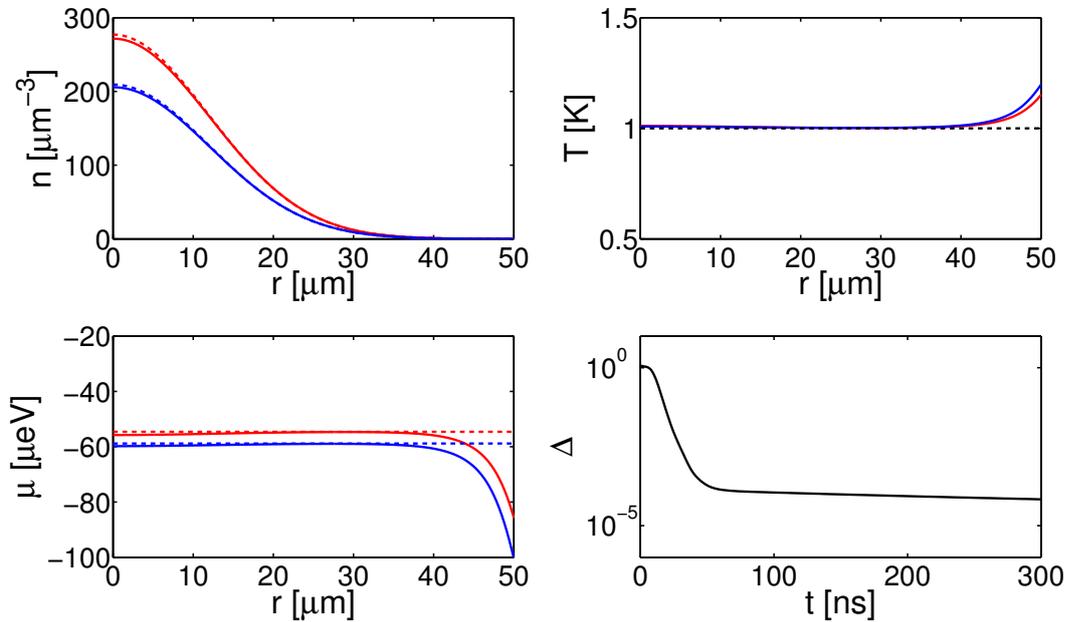
gegeben ist. Für die Vergleichbarkeit mit den experimentellen Resultaten wird zudem noch die spektrale Temperatur  $T_S$  eingeführt. Zur Bestimmung selbiger wird zunächst für eine feste Zeit  $t$  das räumlich integrierte Lumineszenzspektrum  $I_T(\omega)$  (siehe Abschnitt 2.2) berechnet und daraus mittels der bereits besprochenen *fit*-Prozedur die spektrale Temperatur  $T_S(t)$  bestimmt (siehe Abschnitt 2.4 und B.5). Da ein mögliches Kondensat vermutlich im Fallenzentrum auftreten wird, wird die Temperatur im Fallenzentrum  $T(0, t) = T_Z(t)$  als weitere Kenngröße eingeführt. Jedoch ist die Temperatur allein noch kein hinreichendes Kriterium für den Abstand zu einer möglichen Kondensationsgrenze, daher wird im folgenden ebenfalls das effektive chemische Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mu}(\mathbf{r}, t) - U(\mathbf{r}, t)$  betrachtet. Steigt dessen Wert gegen 0, so formiert sich ein Kondensat.

Im folgenden werden zunächst die Resultate der numerischen Rechnungen allgemein diskutiert. Dabei geht es vorrangig um die Thermalisierung der Exzitonen und den Einfluss des Auger-Effekts. Zudem soll untersucht werden, unter welchen Umständen ein mögliches Kondensat auftritt. Mit Hinblick auf diese Problemstellungen werden im folgenden typische Fälle für gepulste und Dauerstrichanregung gezeigt und diskutiert. Im Anschluss daran werden numerische Ergebnisse direkt mit experimentellen Resultaten aus [25, 26] verglichen.

### 3.5.1. Gepulste Anregung

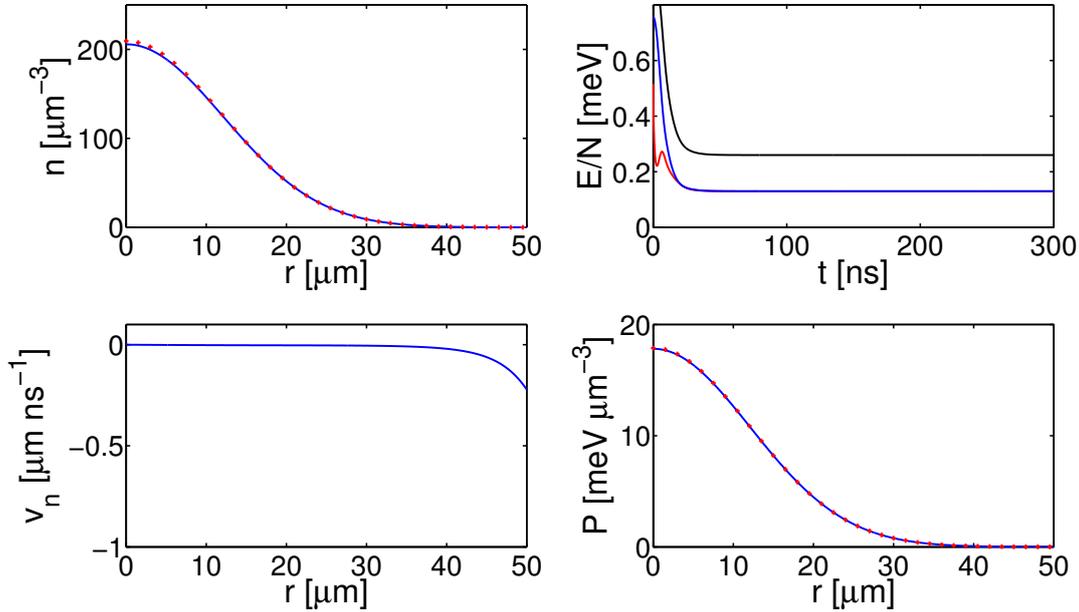
Der Anregungspunkt des Lasers wird  $50 \mu\text{m}$  vom Fallenzentrum entfernt positioniert und hat eine Breite von  $3 \mu\text{m}$ . Die Exzitonenverteilung ist so normiert, dass insgesamt  $N_0$  Exzitonen erzeugt werden. Die Krümmung der Falle ist durch  $\alpha = 0,3 \mu\text{eV}/\text{nm}^2$  gegeben. Für den Auger-Koeffizienten wird der Wert  $A = 3,7 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  verwendet [25].

Abbildung 3.4 zeigt zwei Momentaufnahmen für  $N_0 = 10^7$  und  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$ . Es ist deutlich zu erkennen, wie die Dichte sowohl bei  $t = 150 \text{ ns}$  als auch bei  $t = 300 \text{ ns}$  eine gaußförmige Verteilung um das Fallenzentrum bildet. Die Werte für Temperatur und chemisches Potential sind über weite Bereiche der Falle mit den Werten des entsprechenden Gleichgewichts (siehe  $\bar{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  in (3.65)) nahezu identisch. Lediglich am Rand und im Fallenzentrum sind Unterschie-



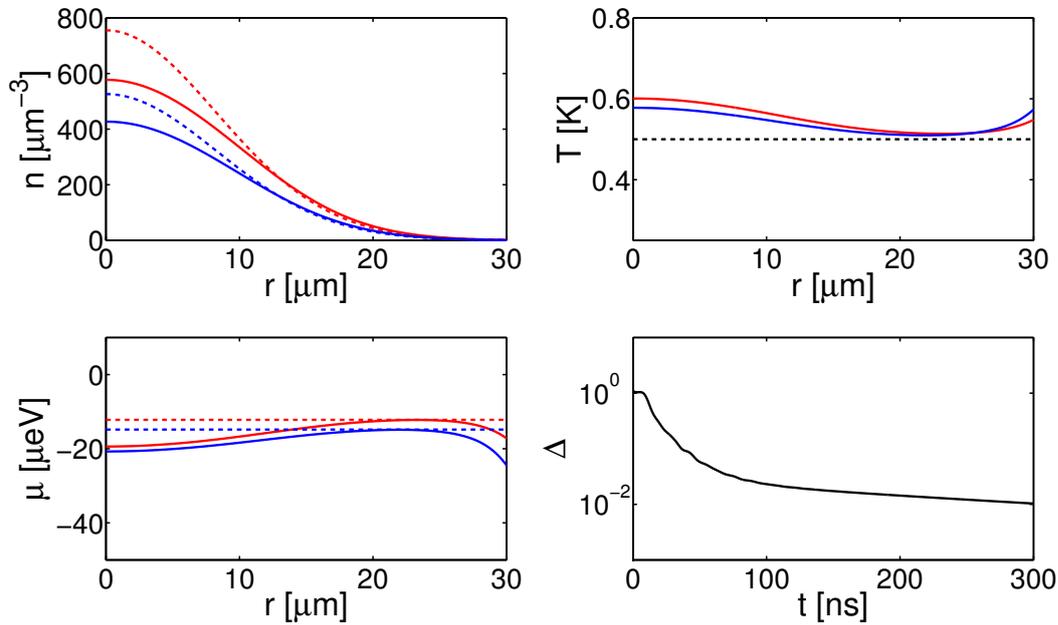
**Abbildung 3.4.:** Dichte  $\tilde{n}(r)$ , Temperatur  $T(r)$  und chemisches Potential  $\tilde{\mu}(r)$  bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$  und einer anfänglichen Exzitonzahl von  $N_0 = 10^7$  zu den Zeitpunkten  $t = 150 \text{ ns}$  (rote Kurve) und  $t = 300 \text{ ns}$  (blaue Kurve). Die Größe  $\Delta$  gibt gemäß Gleichung (3.65) die Abweichung der Verteilung zum Gleichgewicht an. Die gestrichelten Kurven in den entsprechenden Farben geben jeweils die Werte der Größen im Gleichgewicht ( $T = T_{\text{Bad}}$ ) mit der gleichen Exzitonzahl  $N(t)$  an.

de zu erkennen. Die Abweichungen am Fallenrand sind numerischen Ursprungs und kommen durch die dort verschwindende Dichte zustande. In dem numerischen Algorithmus zur Lösung der Gleichungen (3.36) wird zur Berechnung der Schallgeschwindigkeit durch die Dichte dividiert. Für den Fall  $\tilde{n}(\mathbf{r}, t) \approx 0$  kann dies zu Problemen führen. Für die Diskussion der Resultate können die daraus entstehenden Abweichungen allerdings ignoriert werden. Die Abweichungen im Fallenzentrum sind hingegen auf den Auger-Effekt sowie die sehr langsam ablaufende Thermalisierung zurückzuführen. Der Auger-Effekt ist in den Bereichen mit hoher Dichte am stärksten und führt dort zu einem lokalen Aufheizen der Exzitonen. Andererseits verläuft die Kühlung der Exzitonen aufgrund der geringen Temperaturdifferenz zwischen Bad- und Exzitonentemperatur sehr langsam. Die so zustande kommenden Abweichungen sind allerdings äußerst gering und die Thermalisierung der Exzitonen kann als nahezu abgeschlossen betrachtet werden. Der prinzipielle Verlauf der Thermalisierung kann anhand der Abweichungsgröße  $\Delta$  nachvollzogen werden. Zunächst driften die Exzitonen vom Rand in das Zentrum der Falle. In dieser kurzen Phase bleibt  $\Delta$  nahezu konstant. Im Fallenzentrum angekommen, bildet sich die typische gaußförmige Form der Dichte aus und der Großteil der Energie wird durch die Phononen schnell abgeführt. Diese zweite Phase ist durch ein starkes Absinken von  $\Delta$  gekennzeichnet. Da die Temperaturdifferenz zwischen lokaler Exzitonen- und Badtemperatur allerdings immer kleiner wird, verläuft der Thermalisierungsprozess immer langsamer. Die Folge



**Abbildung 3.5.:** Die Kurven oben links zeigen die Gesamtenergie pro Exziton  $E_G(t)/N(t)$  (schwarz), die kinetische Energie pro Exziton  $E_{\text{kin}}(t)/N(t)$  (rot) sowie die potentielle Energie pro Exziton  $E_{\text{pot}}(t)/N(t)$  (blau) als Funktion der Zeit. Die anderen Teilabbildungen zeigen Dichte  $\tilde{n}(r)$ , Geschwindigkeit  $v_n(r)$  und Druck  $P(r)$  der Exzitonen zum Zeitpunkt  $t = 300$  ns. Die roten Punkte markieren den Druck des klassischen idealen Gases (unten rechts) bzw. die Dichteverteilung des Gleichgewichts (oben rechts) unter den entsprechenden Bedingungen. Die Systemparameter sind die gleichen wie in Abbildung 3.4.

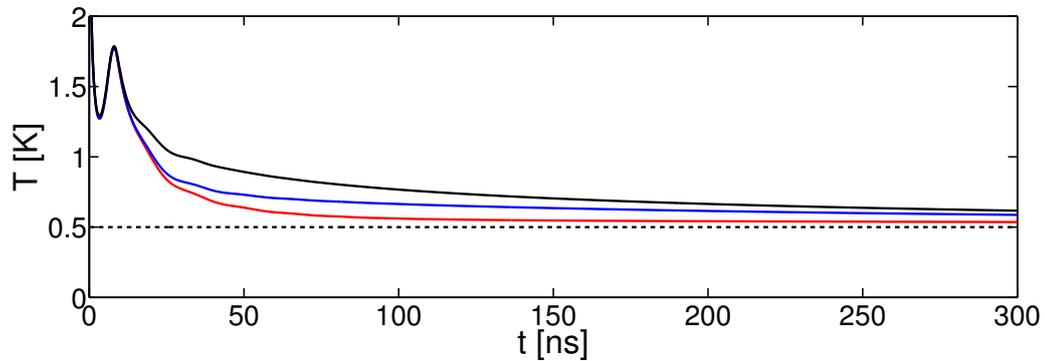
dessen ist der langsame Abfall von  $\Delta$  in der dritten Phase. Allerdings beträgt die Abweichung von lokaler Exziton- und Badtemperatur in dieser Phase nur noch wenige mK. Abbildung 3.4 zeigt somit, dass für Badtemperaturen von  $T_{\text{Bad}} \geq 1,0$  K und moderate Teilchenzahlen die Exzitonen eine Gleichgewichtsverteilung innerhalb ihrer Lebensdauer erreichen können. Dies ist auch in Abbildung 3.5 anhand der hydrodynamischen Größen gut zu erkennen. Die Dichte der Exzitonen folgt, bis auf minimale Abweichungen, der für das Gleichgewicht erwarteten Form einer Gaußverteilung. Die Energie pro Exziton fällt anfänglich rapide ab, bleibt dann aber konstant. Für große Zeiten sind die kinetische und die potentielle Energie pro Exziton nahezu gleich (es gibt einen kleinen, in der Abbildung nicht sichtbaren Unterschied). Da das verwendete Fallenpotential die Form  $V(r) \sim r^n$  besitzt, gilt nach dem Virialtheorem  $E_{\text{kin}} = \frac{n}{2} E_{\text{pot}}$  und da  $n = 2$  ist, folgt  $E_{\text{kin}} = E_{\text{pot}}$ . Für die Gültigkeit des Theorems muss das System allerdings abgeschlossen sein, was im vorliegenden Fall aufgrund der Phononen und des Auger-Effekts nicht der Fall ist. Die näherungsweise Erfüllung des Virialtheorems bedeutet also, dass die Thermalisierung im wesentlichen abgeschlossen und der Auger-Effekt sehr schwach sein muss. Die Geschwindigkeit der Exzitonen ist über weite Bereiche der Falle null, wie es für das Gleichgewicht zu erwarten ist. Die Abweichungen am Rand sind analog einzuordnen wie zuvor. Der Druck  $P$  folgt dem klassischen Gesetz des idealen Gases  $P = nk_B T$ .



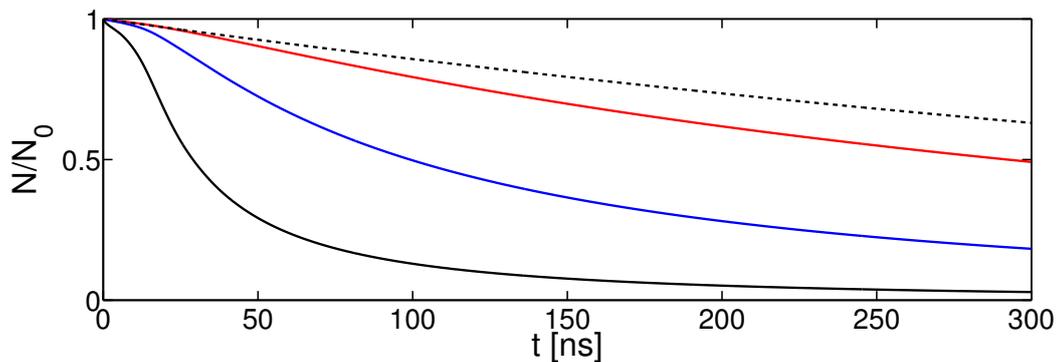
**Abbildung 3.6.:** Analoge Darstellung wie in Abbildung 3.4 bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,5$  K und einer anfänglichen Exzitonenzahl von  $N_0 = 10^7$ .

Zusammengefasst zeigen damit die Abbildungen 3.4 und 3.5 zwei wichtige Resultate. Zum einem ist die Thermalisierung der Exzitonen unter diesen Bedingungen innerhalb ihrer Lebensdauer abgeschlossen und zum anderen liefert das Programm für große Zeiten die korrekten asymptotischen Gleichgewichtslösungen. Numerische Probleme treten dabei nur am Rand der Falle bei verschwindenden Dichten auf.

Wird nun die Badtemperatur bei gleicher Exzitonenzahl halbiert, so ergeben sich die in Abbildung 3.6 dargestellten Resultate. Betrachtet man zunächst die Dichte, so fällt eine starke Abweichung von den entsprechenden Gleichgewichtswerten ins Auge. Dies liegt an der unvollständigen Thermalisierung der Exzitonen mit dem Bad. Zusätzlich zeigen die Temperaturkurven eine typische Abweichung gegenüber der Badtemperatur. Bei geringen Dichten (um  $r = 20 \mu\text{m}$ ) ist die Temperatur am niedrigsten, steigt zum Fallenzentrum an und erreicht ihr Maximum im Fallenzentrum selbst. Das chemische Potential verhält sich entsprechend umgekehrt. Diese Formen sind auf den Auger-Effekt zurückzuführen, da dieser bei hohen Dichten entsprechend stärker ist. Da die Kühlung durch die Phononen bei tiefer werdenden Temperaturen immer ineffizienter wird, ist die Diskrepanz zur Badtemperatur entsprechend größer (verglichen mit den Resultaten aus Abbildung 3.4). Dies spiegelt sich auch in der Abweichungsgröße  $\Delta$  wider, welche zwar einen ähnlichen Verlauf besitzt, aber drei Größenordnungen über den Werten aus Abbildung 3.4 liegt. Im wesentlichen verhindern also zwei Effekte eine schnelle Thermalisierung mit dem Bad. Zum einen wird die Kühlung durch die Phononen bei tiefen Temperaturen zunehmend schlechter („Ausfrieren“ der Phononen) und zum anderen heizt

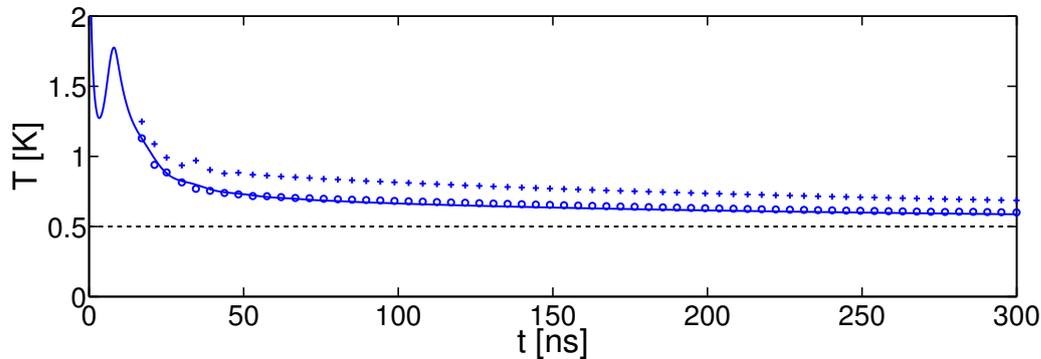


**Abbildung 3.7.:** Mittlere Temperatur der Exzitonen  $\langle T(t) \rangle$  bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,5$  K (schwarz gestrichelt) und einer anfänglichen Exzitonenzahl von  $N_0 = 10^7$  (rote Kurve),  $N_0 = 10^8$  (blaue Kurve) und  $N_0 = 10^9$  (schwarze Kurve).



**Abbildung 3.8.:** Zeitliche Entwicklung der normierten Exzitonenzahl bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,5$  K und einer anfänglichen Exzitonenzahl von  $N_0 = 10^7$  (rote Kurve),  $N_0 = 10^8$  (blaue Kurve) und  $N_0 = 10^9$  (schwarze Kurve). Die schwarz gestrichelte Kurve stellt die durch die Lebensdauer von  $\tau = 650$  ns gegebene Entwicklung der Exzitonenzahl dar.

der Auger-Effekt die Exzitonen lokal auf. Der Einfluss des Auger-Effekts verstärkt sich bei abnehmender Temperatur ebenfalls, da die Ausdehnung der thermischen Wolke abnimmt und somit bei gleicher Teilchenzahl die Dichte steigt. Der Einfluss des Auger-Effekts auf die Thermalisierung wird in Abbildung 3.7 deutlich, wo die mittlere Temperatur der Exzitonen für verschiedene Exzitonenzahlen dargestellt ist. Bei hohen Teilchenzahlen ist die mittlere Temperatur der Exzitonen deutlich höher als bei niedrigen. Die Unterschiede sind dabei von der Größenordnung einiger 100 mK, werden zu größeren Zeiten jedoch zusehends kleiner. Dies liegt vor allem an der abnehmenden Exzitonenzahl und somit einer zunehmenden Abschwächung des Auger-Effekts. Dieser hat bei gepulster Anregung einen maßgeblichen Einfluss auf die Gesamtteilchenzahl im System. In Abbildung 3.8 ist die Exzitonenzahl  $N(t)$  für verschiedene  $N_0$  dargestellt. In allen betrachteten Fällen zerfallen die Exzitonen deutlich schneller, als die Lebensdauer es erwarten lässt. Die Unterschiede aufgrund des Auger-Effekts sind bei hohen Anfangsexzitonenzahlen äußerst dramatisch. So fällt die Exzitonenzahl nach 300 ns für  $N_0 = 10^9$  Exzitonen mit Auger-Effekt um einen Faktor 20 stärker ab als ohne.



**Abbildung 3.9.:** Mittlere Temperatur  $\langle T(t) \rangle$  (blaue Kurve), Temperatur im Fallenzentrum  $T_Z$  (blaue Kreuze) und spektrale Temperatur  $T_S$  (blaue Kreise) bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,5$  K (schwarz gestrichelt) und einer anfänglichen Exzitonenzahl von  $N_0 = 10^8$  (entspricht der blauen Kurve in Abbildung 3.7).

Da, wie in Abbildung 3.6 ersichtlich, die Temperatur der Exzitonen typischerweise inhomogen verteilt ist, drängt sich die Frage auf, welche Temperatur unter diesen Umständen experimentell bestimmt werden wird. Wie bereits erwähnt, wird die Temperatur der Exzitonen im Experiment über das räumlich integrierte Spektrum  $I(\omega)$  ermittelt. Hierzu wird die Verteilung gemäß der in Abschnitt B.5 angegebenen Methode angepasst und die Temperatur extrahiert. Da diese Methode auf der Grundlage einer Gleichgewichtstheorie entwickelt wurde, ist zunächst unklar, ob sie hier angewendet werden darf. Um diese Frage zu klären, sind in Abbildung 3.9 verschiedene Temperaturen als Funktion der Zeit für eine typische Situation aufgetragen. Die Temperatur im Fallenzentrum ist, wie bereits zuvor diskutiert, aufgrund des Auger-Effekts höher als die mittlere Temperatur der Exzitonen. Letztere ist hierbei bis auf minimale Abweichungen identisch mit der spektralen Temperatur  $T_S$ . Dieses Ergebnis wurde für alle untersuchten Fälle bei gepulster Anregung festgestellt. Somit müsste die aus den experimentellen Spektren ermittelte Temperatur der mittleren Temperatur der Exzitonen entsprechen.

Nach diesen allgemeinen Betrachtungen zur gepulsten Anregung sind einige wichtige Punkte festzuhalten. Erstens: Das Programm liefert physikalisch sinnvolle numerische Resultate. Zweitens: Die Zeit bis zur Thermalisierung der Exzitonen hängt stark von der Badtemperatur und dem Auger-Effekt ab. Um eine Aussage für etwaige Experimente treffen zu können, ist es notwendig die Systemparameter (Fallenparameter, Badtemperatur,...) sorgfältig zu bestimmen und in die entsprechenden Rechnungen einzubauen. Eine generelle Aussage zur Thermalisierungszeit der Exzitonen kann nicht getroffen werden. Es ist aber davon auszugehen, dass diese zumindest einige 100 ns beträgt und unter entsprechenden Umständen auch ein Vielfaches der Lebensdauer betragen kann. Drittens: Die Absenkung der Badtemperatur auf Werte  $T_{\text{Bad}} \ll 1,0$  K führt aufgrund des „Ausfrierens“ der Phononen und des Auger-Effekts zu einer zunehmenden Diskrepanz zwischen der Temperatur der Exzitonen und der Badtemperatur (bei gleichen Zeiten).

### 3.5.2. Dauerstrichanregung

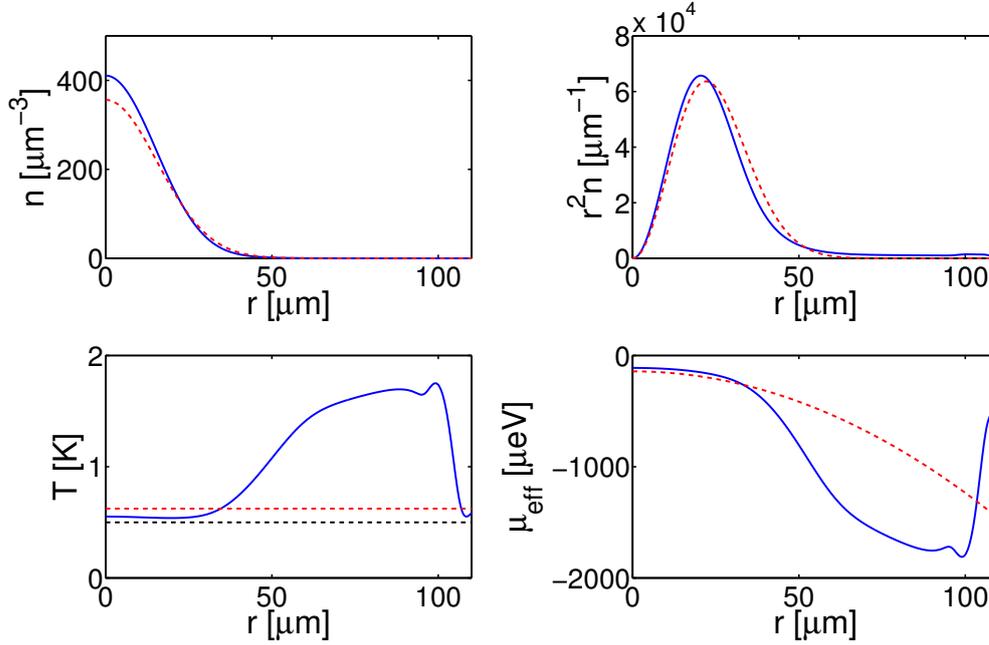
Für die folgenden Rechnungen wurde der Anregungslaser bei  $100\ \mu\text{m}$  außerhalb des Fallenzentrums mit einer gaußförmigen Dichteverteilung der Breite  $3\ \mu\text{m}$  simuliert. Die Krümmung der Falle ist durch  $\alpha = 0,11\ \mu\text{eV}/\text{nm}^2$  gegeben. Für den Auger-Koeffizienten wird der Wert  $A = 2,0 \times 10^{-18}\ \text{cm}^3/\text{ns}$  angenommen. Diese Parameter sind vergleichbar mit den Angaben aus [26].

#### Stationäre Zustände

Bei Experimenten dieser Art wird typischerweise nicht zeitaufgelöst gemessen, hier ist der stationäre Zustand zur Beschreibung der experimentellen Resultate maßgebend. Zur Charakterisierung desselben sind vor allem Temperatur- und Dichteverteilung in der Falle interessant. Diese sind wiederum abhängig von der Anregungsleistung des Pumplasers, der Badtemperatur und dem Wert des Auger-Koeffizienten. Um die allgemeinen Eigenschaften dieser stationären Zustände besser zu verstehen, sind in Abbildung 3.10 die Resultate der Berechnungen für eine Laserleistung von  $P_L = 26,4\ \mu\text{W}$  und eine Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,5\ \text{K}$  dargestellt.

Durch den Pumplaser werden bei  $r = 100\ \mu\text{m}$  ständig neue heiße Exzitonen erzeugt. Die Dichte der Exzitonen im Fallenzentrum ist gegenüber dem Gleichgewicht deutlich erhöht. Wie anhand der gewichteten Dichte erkennbar ist, befindet sich durch das ständige Pumpen des Systems immer eine gewisse Zahl von Exzitonen im äußeren Bereich der Falle ( $r > 60\ \mu\text{m}$ ). Bei einer entsprechenden Gleichgewichtsverteilung gäbe es dort keine Exzitonen. Anhand der Temperaturverteilung lassen sich die wesentlichen Vorgänge in der Falle gut verstehen. Die durch den Laser bei  $r = 100\ \mu\text{m}$  erzeugten heißen Exzitonen driften zum Fallenzentrum und kühlen auf dem Weg dorthin ab. Aufgrund der zum Fallenzentrum ansteigenden Dichte wird der Einfluss des Auger-Effektes immer stärker. Dieser führt durch die Entstehung hochenergetischer Exzitonen zu einer lokalen Aufheizung in Gebieten mit hoher Dichte. Dadurch entsteht die charakteristische Form der Temperaturverteilung. Die Temperatur der am Rand der Falle erzeugten Exzitonen nimmt zunächst kontinuierlich ab. An einem bestimmten Punkt der Falle erreicht die Temperatur jedoch ein Minimum, fängt im folgenden wieder an zu steigen und erreicht im Fallenzentrum ein lokales Maximum. An keinem Punkt der Falle wird dabei die Temperatur des Gitters tatsächlich erreicht. Aufgrund der heißen Exzitonen im Randbereich der Falle ist die Temperatur im Fallenzentrum jedoch trotzdem niedriger als die mittlere Temperatur aller Exzitonen. Trotz eines lokalen Maximums der Temperatur im Fallenzentrum ist das effektive chemische Potential bei  $r = 0$  am größten. Somit würde ein mögliches Kondensat im Zentrum der Falle entstehen.

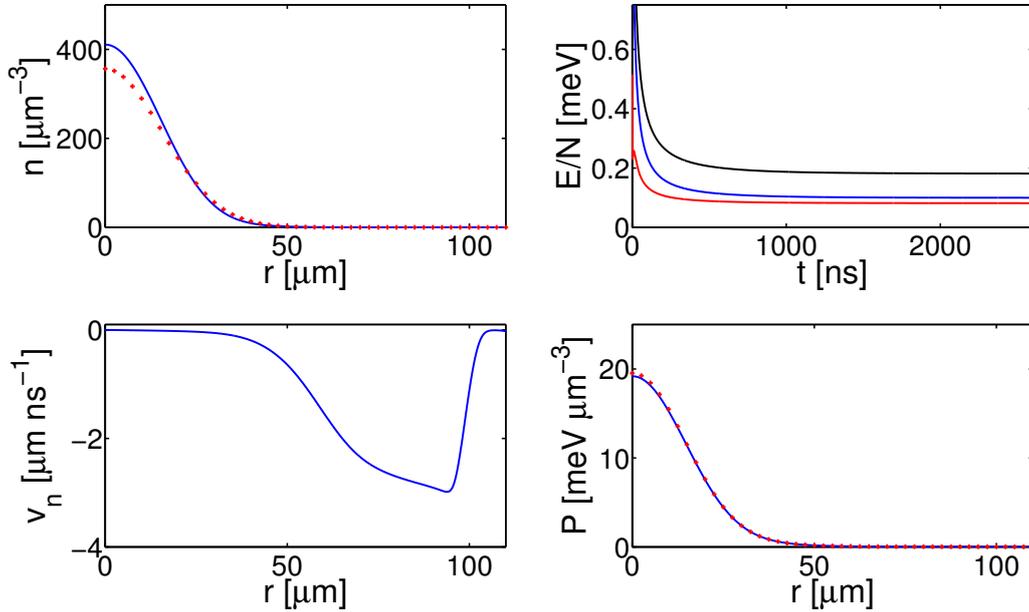
Demzufolge stellt der stationäre Zustand in Abbildung 3.10 einen deutlichen Nichtgleichgewichtszustand dar. Dies lässt sich auch sehr gut an den hydrodynamischen Größen in Abbildung 3.11 erkennen. Wie bereits diskutiert, weicht die Dichteverteilung in diesem Fall deutlich



**Abbildung 3.10.:** Dichte  $\tilde{n}(r)$ , gewichtete Dichte  $r^2\tilde{n}(r)$ , Temperatur  $T(r)$  und effektives chemisches Potential  $\mu_{\text{eff}}(r)$  für den stationären Zustand (jeweils die blauen durchgezogenen Linien) bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,5$  K und einer Laserleistung von  $P_L = 26,4$   $\mu\text{W}$  ( $N_\infty = 2,13 \times 10^7$ ). Die rot gestrichelten Kurven entsprechen einer Gleichgewichtsverteilung mit der mittleren Temperatur des stationären Zustandes und der gleichen Teilchenzahl. Die schwarz gestrichelte Temperaturkurve stellt die Badtemperatur dar.

von einer Gleichgewichtsverteilung ab. Die Energie pro Exziton sinkt zunächst rapide, ist für große Zeiten aber konstant. Weiterhin sind kinetische und potentielle Energie pro Exziton für alle Zeiten verschieden voneinander. Da bei diesem gepumpten System ständig Energie mit dem Phononbad ausgetauscht wird, kann die Voraussetzung der Abgeschlossenheit und somit das Virialtheorem nicht erfüllt sein. Den auffälligsten Unterschied zum Gleichgewicht stellt die Geschwindigkeit  $v_n(r)$  dar. Die Exzitonen bewegen sich nach ihrer Erzeugung sehr schnell in Richtung Fallenzentrum (negatives Vorzeichen), werden kurz vor dessen Erreichen stark abgebremst und sind im Fallenzentrum selbst nahezu in Ruhe. Ihre maximale Geschwindigkeit liegt dabei in der gleichen Größenordnung wie die Schallgeschwindigkeit ( $v_s^{\text{LA}} = 4,5$   $\mu\text{m}/\text{ns}$  bzw.  $v_s^{\text{TA}} = 1,3$   $\mu\text{m}/\text{ns}$ ). Im Gleichgewicht würde die Geschwindigkeit  $v_n(r)$  verschwinden. Der Druck im System ist leicht niedriger als der Wert des entsprechenden klassischen idealen Gases. Somit handelt es sich hier um ein System im Nichtgleichgewicht mit schwachem Einfluss von Wechselwirkung und/oder Quantenentartung.

Rechnungen mit veränderten Anregungsintensitäten und Badtemperaturen zeigen ein qualitativ ähnliches Verhalten, wobei bei steigenden Anregungsleistungen und sinkenden Badtemperaturen der Nichtgleichgewichtscharakter immer stärker ausgeprägt wird. Im folgenden soll nun untersucht werden, unter welchen Umständen es zu einer BEK kommt. Da die Exzitonen

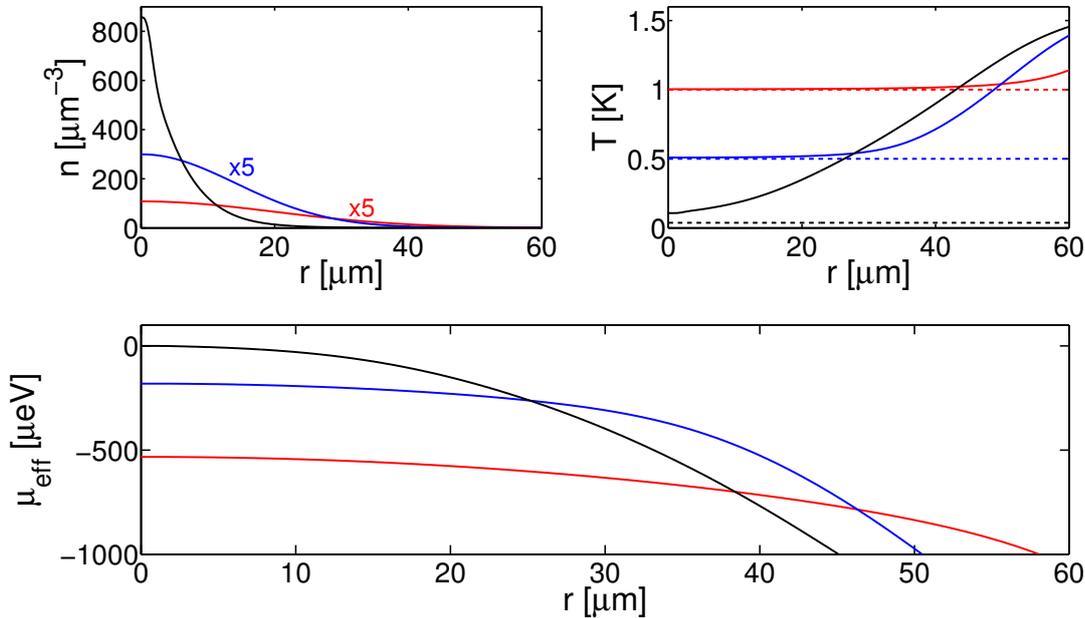


**Abbildung 3.11.:** Die Teilabbildungen zeigen die Dichte  $\bar{n}(r)$ , die Geschwindigkeit  $v_n(r)$  und den Druck  $P(r)$  der Exzitonen als Funktion des Ortes im stationären Zustand. Die Kurven oben rechts zeigen die Gesamtenergie pro Exziton  $E_G(t)/N(t)$  (schwarz), die kinetische Energie pro Exziton  $E_{\text{kin}}(t)/N(t)$  (rot) sowie die potentielle Energie pro Exziton  $E_{\text{pot}}(t)/N(t)$  (blau) als Funktion der Zeit. Die roten Kreuze markieren den Druck des klassischen idealen Gases (unten rechts) bzw. die Dichteverteilung des Gleichgewichts (oben links) unter den entsprechenden Bedingungen. Die Systemparameter sind die gleichen wie in Abbildung 3.10.

am Rand der Falle für die Frage der Entstehung eines Kondensates nicht interessant sind, wird im folgenden nur noch das Falleninnere ( $r < 60 \mu\text{m}$ ) dargestellt und diskutiert.

### Temperatur der Exzitonen

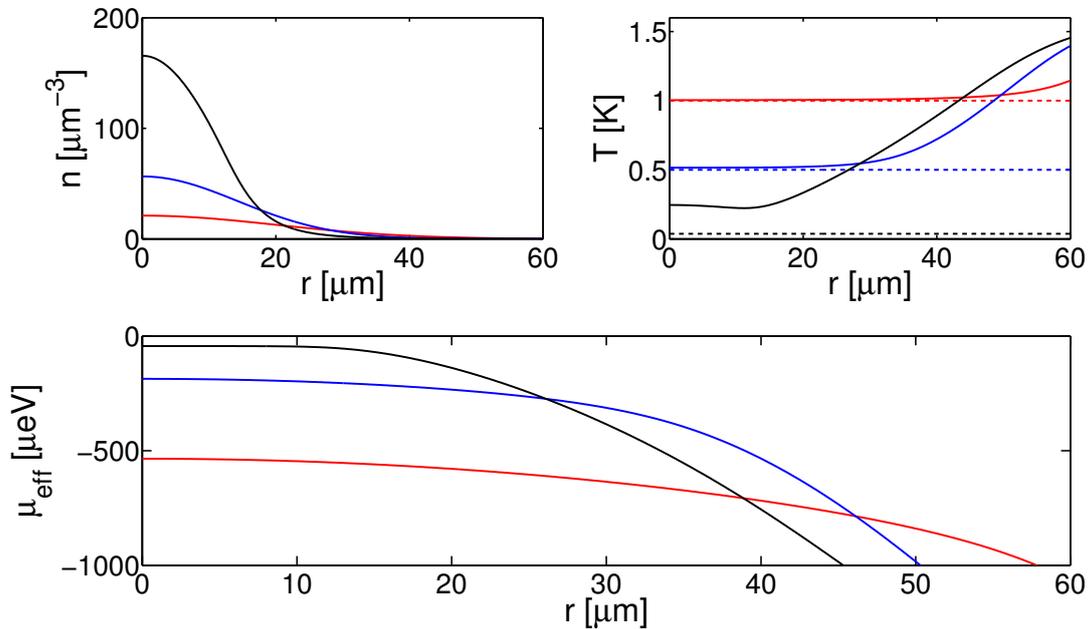
Die inhomogene Verteilung der Temperatur der Exzitonen in der Falle ist maßgeblich auf die endliche Thermalisierungszeit sowie den Auger-Effekt zurückzuführen. Um den Einfluss der Thermalisierungszeit unabhängig vom Auger-Effekt zu diskutieren, sind in Abbildung 3.12 die Ergebnisse für eine schwache Anregung und verschiedene Badtemperaturen mit  $A = 0$  dargestellt. Die Dichteverteilungen der Exzitonen für  $T_{\text{Bad}} \geq 0,5 \text{ K}$  besitzen das typische gaußförmige Profil. Demgegenüber verläuft die Dichte bei  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  deutlich steiler. Aufgrund der niedrigeren Temperatur ist die Ausdehnung der Exzitonenwolke kleiner, aber die Dichte entsprechend höher, da die Gesamtexzitonzahl in allen Fällen gleich ist. Für die Badtemperaturen  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$  und  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  erreichen die Exzitonen im Fallenzentrum die Temperatur des Bades. Bei der ultratiefen Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  ist dies nicht der Fall. Die Exzitonen kühlen zwar zum Fallenzentrum immer weiter ab, jedoch reicht die



**Abbildung 3.12.:** Dichte  $\tilde{n}(r)$ , Temperatur  $T(r)$  und effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}(r)$  für den stationären Zustand bei einer Laserleistung von  $P_L = 2,8 \mu\text{W}$  und einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$  (rote Kurven),  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  (blaue Kurven) und  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  (schwarze Kurven) ohne Auger-Effekt. Die gestrichelten Temperaturkurven stellen die jeweiligen Badtemperaturen dar.

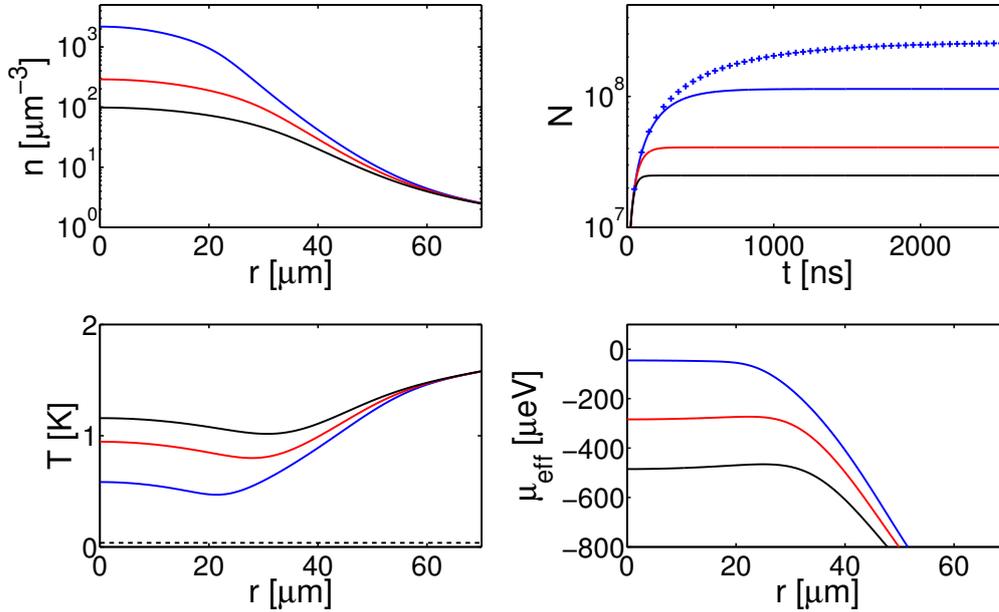
Lebensdauer nicht aus, um die Badtemperatur zu erreichen ( $T_Z = 0,11 \text{ K}$ ). Dennoch sind die Exzitonen bei  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  einem Kondensat deutlich näher als in den anderen beiden Fällen. In der Tat besitzt das effektive chemische Potential bei  $r = 0$  den Wert  $\tilde{\mu}_{\text{eff}} = -0,02 \mu\text{eV}$  und eine minimale Erhöhung der Laserleistung auf  $P_L = 3,0 \mu\text{W}$  würde bereits zum Auftreten eines Kondensats führen. Wie sich dieses Verhalten bei Berücksichtigung des Auger-Effektes ändert, ist in Abbildung 3.13 dargestellt. Die Ergebnisse für  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$  und  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  sind vergleichbar mit den in Abbildung 3.12 dargestellten Resultaten. Da die Dichte der Exzitonen in diesen Fällen ohnehin relativ niedrig ist, wirkt sich der Auger-Effekt kaum aus. Bei der tiefsten betrachteten Badtemperatur  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  hat der Auger-Effekt jedoch gravierende Auswirkungen. Die Exzitonenwolke ist viel weiter ausgedehnt als in Abbildung 3.12, was wiederum zu einer kleineren Dichte im Fallenzentrum führt. Zusätzlich wird die Dichte durch die Vernichtung von Exzitonen durch den Auger-Effekt weiter abgesenkt. Dies kommt in der von  $N_\infty = 2,83 \times 10^6$  auf  $N_\infty = 2,57 \times 10^6$  gefallen Exzitonzahl zum Ausdruck. Die Temperatur der Exzitonen sinkt zunächst monoton ab, steigt aber dann zum Fallenzentrum hin aufgrund des Auger-Effektes wieder an. Die Temperatur im Ursprung der Falle ist dabei mit  $T_Z = 0,24 \text{ K}$  mehr als doppelt so hoch wie zuvor. Dementsprechend fällt das effektive chemische Potential auf den Wert  $\tilde{\mu}_{\text{eff}} = -43,46 \mu\text{eV}$  bei  $r = 0$  und liegt damit weit weg von der Kondensationsgrenze.

Der Auger-Effekt spielt also bei ultratiefen Temperaturen ( $T_{\text{Bad}} \ll 0,5 \text{ K}$ ) selbst bei nied-



**Abbildung 3.13.:** Analoge Darstellung wie in Abbildung 3.12 mit einem Auger-Koeffizienten von  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ .

rigen Anregungsleistungen und Gesamtexzitonenzahlen eine wichtige Rolle. Es ist demnach nicht davon auszugehen, dass Exzitonen solche Badtemperaturen auch tatsächlich erreichen, da dies bereits bei Vernachlässigung des Auger-Effektes nicht passiert. Andererseits wäre in diesen Fällen selbst bei schwacher Anregungsleistung mit dem Auftreten eines Kondensats zu rechnen, wenn der Auger-Effekt keinen Einfluss hätte. Für die Entstehung eines exzitonischen Kondensates ist demnach der Wert des Auger-Koeffizienten von enormer Bedeutung. Wie in Abschnitt 1.2 allerdings bereits diskutiert wurde, weichen die aus der Literatur bekannten Werte stark voneinander ab. Daher wurden in Abbildung 3.14 die Ergebnisse für verschiedene experimentell bestimmten Auger-Koeffizienten bei gleichen Anregungsbedingungen dargestellt. Tabelle 3.1 enthält die Zahlenwerte aller wichtigen Kenngrößen aus Abbildung 3.14. Die Variation des Koeffizienten bewirkt starke quantitative Unterschiede in allen Größen. So unterscheidet sich die Dichte im Fallenzentrum um mehr als eine Größenordnung zwischen  $A = 4,0 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{ns}$  und  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ . Die stationäre Exzitonenzahl zwischen diesen beiden Fällen unterscheidet sich um einen Faktor 4,5. Die mittlere Temperatur der Exzitonen fällt fast doppelt so hoch aus. Beim effektiven chemischen Potential stellt sich sogar eine qualitative Änderung des Kurvenverlaufes ein. Während für  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  der Wert monoton ansteigt und im Fallenzentrum sein Maximum erreicht, steigt er in den anderen beiden Fällen zunächst an, erreicht dann aber bei ca.  $r = 30 \mu\text{m}$  sein Maximum und fällt zum Fallenzentrum hin wieder ab. Somit kompensiert die steigende Temperatur im Fallenzentrum die Zunahme der Dichte und der Abstand zur Kondensationsgrenze steigt sogar im



**Abbildung 3.14.:** Dichte  $\tilde{n}(r)$ , Temperatur  $T(r)$  und effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}(r)$  für den stationären Zustand bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037$  K und einer Laserleistung  $P_L = 262$   $\mu\text{W}$  sowie die Entwicklung der entsprechenden Exzitonenzahl  $N(t)$ . Die Auger-Koeffizienten sind  $A = 2,0 \times 10^{-18}$   $\text{cm}^3/\text{ns}$  [26] (blaue Kurven),  $A = 7,0 \times 10^{-17}$   $\text{cm}^3/\text{ns}$  [54, 55] (rote Kurven) und  $A = 4,0 \times 10^{-16}$   $\text{cm}^3/\text{ns}$  [56] (schwarze Kurven). Die blauen Kreuze bei der Teilchenzahlentwicklung geben die Werte ohne Auger-Effekt an. Die schwarz gestrichelte Temperaturkurve stellt die Badtemperatur dar.

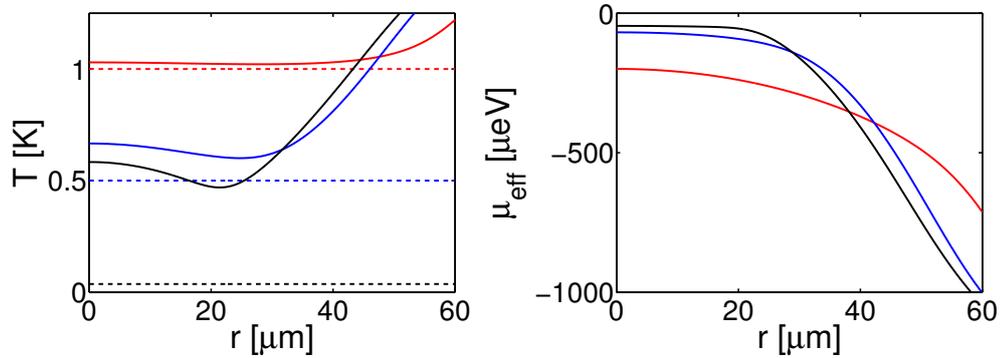
| $A$ [ $\text{cm}^3/\text{ns}$ ] | $N_\infty$         | $\langle T \rangle$ [K] | $T_Z$ [K] | $\mu_{\text{eff}}(r=0)$ [meV] | $\tilde{n}_Z$ [ $\mu\text{m}^{-3}$ ] | Quelle   |
|---------------------------------|--------------------|-------------------------|-----------|-------------------------------|--------------------------------------|----------|
| $2 \times 10^{-18}$             | $1,14 \times 10^8$ | 0,65                    | 0,58      | -45,32                        | 2175,6                               | [26]     |
| $7 \times 10^{-17}$             | $4,08 \times 10^7$ | 1,03                    | 0,95      | -283,94                       | 288,9                                | [54, 55] |
| $4 \times 10^{-16}$             | $2,49 \times 10^7$ | 1,24                    | 1,16      | -484,93                       | 98,2                                 | [56]     |

**Tabelle 3.1.:** Wichtige Kenngrößen aus Abbildung 3.14.

Fallenzentrum. Für diese Werte des Auger-Koeffizienten würde vermutlich nie ein Kondensat von Exzitonen entstehen. Im folgenden wird daher nur der niedrigste experimentell bestimmte Auger-Koeffizient von  $A = 2,0 \times 10^{-18}$   $\text{cm}^3/\text{ns}$  weiter betrachtet.

### Kondensationsgrenze

Durch Variation der Laserleistung  $P_L$  sowie der Badtemperatur  $T_{\text{Bad}}$  lassen sich diverse stationäre Zustände erzeugen. Für eine systematische Analyse wurden in Abbildung 3.15 exemplarisch die Temperatur und das effektive chemische Potential der stationären Zustände für

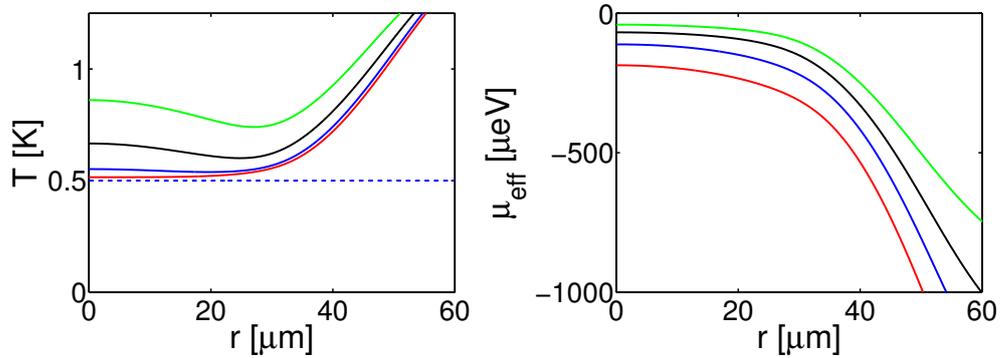


**Abbildung 3.15.:** Temperatur  $T(r)$  (links) und effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}(r)$  (rechts) im stationären Zustand für  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ ,  $P_L = 262 \text{ } \mu\text{W}$  und  $T_{\text{Bad}} = 1,0 \text{ K}$  ( $N_\infty = 1,59 \times 10^8$ ; rote Kurve),  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  ( $N_\infty = 1,26 \times 10^8$ ; blaue Kurve) und  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  ( $N_\infty = 1,14 \times 10^8$ ; schwarze Kurve). Die gestrichelten Geraden markieren die jeweiligen Badtemperaturen.

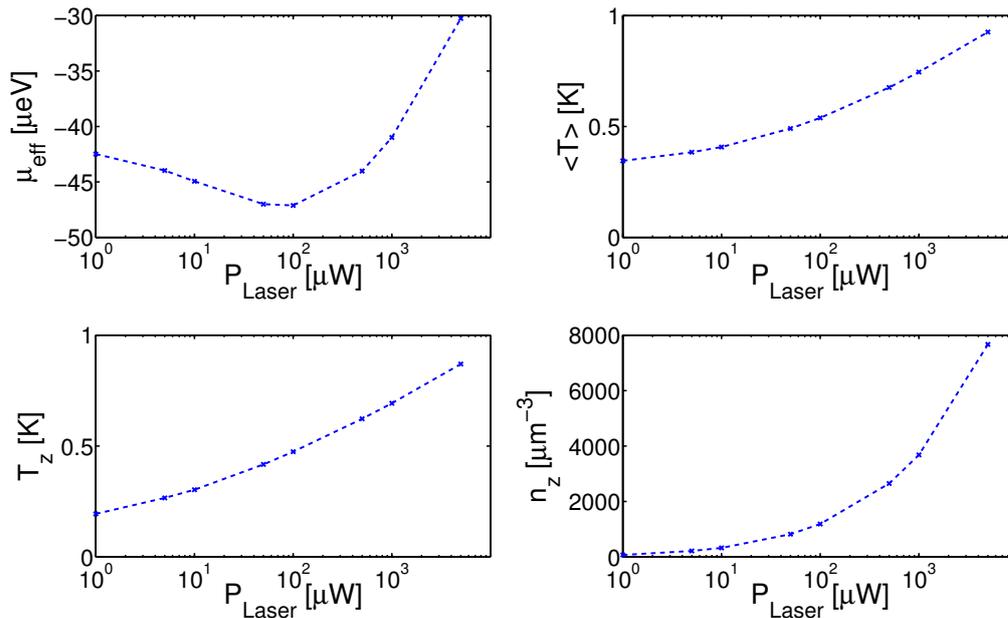
verschiedene Badtemperaturen bei gleicher Anregungsleistung dargestellt. Wie anhand der Temperaturkurven gut zu erkennen ist, führt ein Absenken der Badtemperatur zu einem steigenden Einfluss des Auger-Effekts, obwohl die Anregungsleistung des Lasers sich nicht ändert. Die Ursache hierfür ist die mit der Temperatur absinkende Ausdehnung der Exzitonenwolke, was wiederum zu einem Anstieg der Dichte führt. Besonders deutlich wird dies anhand des geringen Unterschiedes der Exzitonentemperaturen für die Fälle  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  und  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ . Dieser fällt deutlich geringer aus, als man es für eine um mehr als eine Größenordnung verringerte Badtemperatur erwarten würde. Auch die von  $N_\infty = 1,59 \times 10^8$  auf  $N_\infty = 1,14 \times 10^8$  sinkende Gesamtexzitonenzahl ist dem wachsenden Einfluss des Auger-Effekts geschuldet. Zusätzlich zum steigenden Einfluss des Auger-Effekts steigt die Thermalisierungszeit der Exzitonen bei sehr tiefen Temperaturen deutlich an. Durch diese beiden Effekte bringt die Absenkung der Badtemperatur auf  $T_{\text{Bad}} \ll 0,5 \text{ K}$  kaum Fortschritte bei der Absenkung der Temperatur der Exzitonen im stationären Zustand. Dies ist auch anhand des effektiven chemischen Potentials deutlich zu erkennen, welches zwischen diesen beiden Fällen nur unwesentlich ansteigt.

Der umgekehrte Fall einer festen Badtemperatur und verschiedener Anregungsleistungen ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Der Temperaturverlauf illustriert den wachsenden Einfluss des Auger-Effekts mit steigender Anregungsleistung. Bei sehr schwacher Anregung (rote Kurve) ist die Temperatur über weite Bereiche der Falle nahezu konstant und nur leicht erhöht gegenüber der Badtemperatur. Es findet eine fast vollständige Thermalisierung der Exzitonen in der Falle statt. Durch Erhöhung der Anregungsleistung steigt die Dichte der Exzitonen und infolgedessen auch der Einfluss des Auger-Effekts. Aufgrund der lokalen Erwärmung durch diesen entsteht die charakteristische Temperaturverteilung, welche anhand der grünen Kurve gut sichtbar ist. Das effektive chemische Potential steigt ebenfalls mit der Laserleistung an trotz steigender Temperatur. Die Abstände zwischen den einzelnen Kurven werden jedoch immer kleiner.

Für keinen der in Abbildung 3.15 und 3.16 gezeigten Fälle ist mit einem Kondensat zu

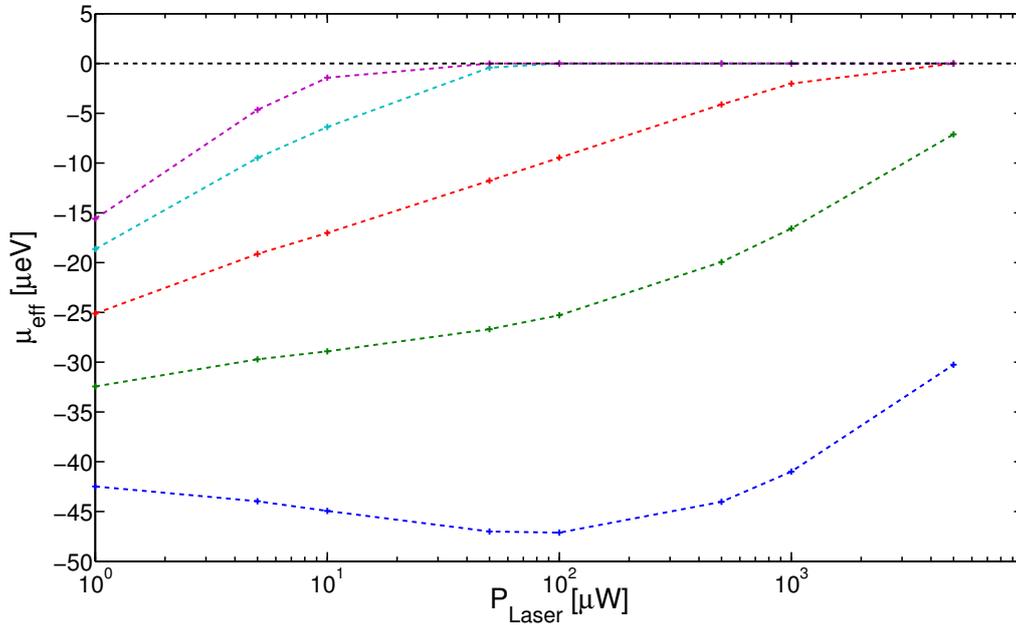


**Abbildung 3.16.:** Temperatur  $T(r)$  (links) und effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}(r)$  (rechts) im stationären Zustand für  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ ,  $T_{\text{Bad}} = 0,5 \text{ K}$  und  $P_L = 2,8 \mu\text{W}$  ( $N_\infty = 2,70 \times 10^6$ ; rote Kurve),  $P_L = 26 \mu\text{W}$  ( $N_\infty = 2,13 \times 10^7$ ; blaue Kurve),  $P_L = 262 \mu\text{W}$  ( $N_\infty = 1,26 \times 10^8$ ; schwarze Kurve) und  $P_L = 2,6 \text{ mW}$  ( $N_\infty = 6,10 \times 10^8$ ; grüne Kurve). Die blau gestrichelte Gerade markiert die Badtemperatur.



**Abbildung 3.17.:** Effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}(r = 0)$ , mittlere Temperatur  $\langle T \rangle$  sowie die Temperatur  $T_z$  und Dichte  $\tilde{n}_z$  der Exzitonen im Fallenzentrum als Funktion der Laserleistung  $P_L$  mit dem Auger-Koeffizienten  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ . Die Badtemperatur beträgt  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ .

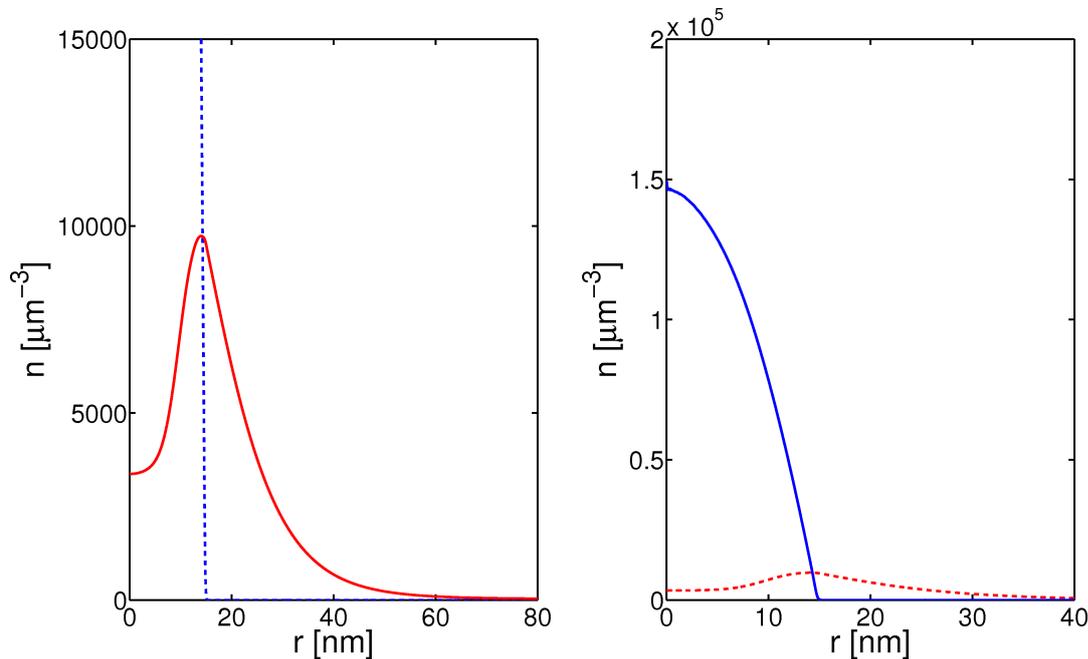
rechnen. Um zu klären, ob mit einem Auger-Koeffizienten von  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  überhaupt ein Kondensat zu erwarten ist, sind in Abbildung 3.17 das effektive chemische Potential, die Dichte und Temperatur im Fallenzentrum sowie die mittlere Temperatur der Exzitonen als Funktion der Laserleistung bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  dargestellt. Das effektive chemische Potential fällt zunächst ab und steigt erst bei großen Laserleistungen wieder an. Grund dafür ist der unterschiedliche Anstieg von Temperatur und Dichte im Fallenzentrum.



**Abbildung 3.18.:** Effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu}_{\text{eff}}$  als Funktion der Laserleistung  $P_L$  für die Auger-Koeffizienten  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  (blaue Kurve),  $A = 1,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  (grüne Kurve),  $A = 0,5 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  (rote Kurve),  $A = 0,2 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  (türkise Kurve) und  $A = 0,1 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  (violette Kurve). Die Badtemperatur beträgt  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ . Die schwarze Kurve markiert den Wert  $\mu_{\text{eff}} = 0$  und somit die Kondensationsgrenze.

Die Dichte steigt erst bei hohen Leistungen signifikant an, während die Temperatur fast gleichförmig zunimmt. Durch die steigende Temperatur fällt somit zunächst das effektive chemische Potential ab. Erst bei hohen Leistungen wird dieses Verhalten durch die steigende Dichte kompensiert. Obwohl die höchste hier betrachtete Leistung von  $P_L = 5 \text{ mW}$  schon deutlich über den in Experimenten typischerweise verwendeten Werten liegt und die Badtemperatur mit  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  die niedrigste in [26] gemessene darstellt, bildet sich dennoch kein Kondensat aus. Unter den hier verwendeten Modellannahmen und Parametern bildet sich demnach für  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  kein Kondensat aus.

Der Hauptgrund für dieses Ergebnis ist der Auger-Effekt. Um zu untersuchen, wie weit der Auger-Koeffizient abgesenkt werden müsste, um ein exzitonisches Kondensat zu erhalten, wurde dieser in Abbildung 3.18 variiert. Um bei experimentell realistischen Laserleistungen ( $P_L < 1 \text{ mW}$ ) ein Kondensat von Exzitonen zu erreichen, müsste der Auger-Koeffizient ungefähr eine Größenordnung ( $A \approx 2 \times 10^{-19} \text{ cm}^3/\text{ns}$ ) niedriger sein. Dieser Wert liegt zwar deutlich über den theoretisch berechneten Werten von  $A = 3 \times 10^{-22} \text{ cm}^3/\text{ns}$  [58, 59] bzw.  $A = 2 \times 10^{-21} \text{ cm}^3/\text{ns}$  [57], jedoch auch deutlich unter dem kleinsten jemals experimentell bestimmten Wert von  $A = 2 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  [26]. Das Auftreten einer BEK von Exzitonen innerhalb des hier verwendeten Modells ist somit theoretisch möglich, wäre aber für die experimentell angegebenen Parameter nicht zu erwarten.



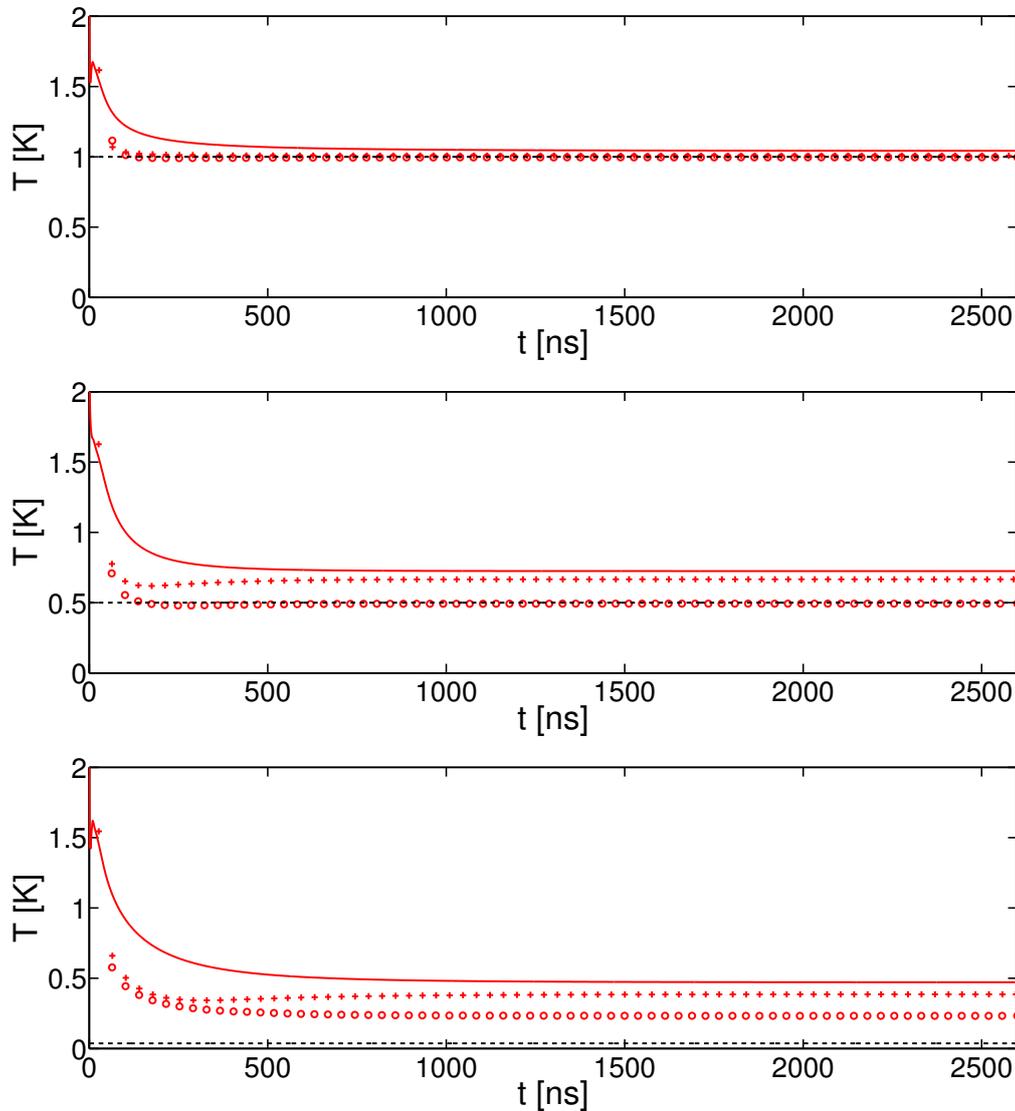
**Abbildung 3.19.:** Dichte der thermischen Exzitonen  $\tilde{n}(r)$  (rote Kurven) und Dichte der kondensierten Exzitonen (blaue Kurven) im stationären Zustand bei einer Laserleistung von  $P_L = 524 \mu\text{W}$  und einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ . Für den Auger-Koeffizienten wurde der Wert  $A = 2 \times 10^{-19} \text{ cm}^3/\text{ns}$  verwendet. Die Gesamtteilchenzahl beträgt  $N_\infty = 3,1 \times 10^8$  und die Kondensatsfraktion ist  $N_c/N_\infty = 0,66$ .

### Kondensat

Um die expliziten Resultate der theoretischen Rechnung mit Kondensat zu diskutieren, wird für den Auger-Koeffizienten der Wert  $A = 2 \times 10^{-19} \text{ cm}^3/\text{ns}$  verwendet. Exemplarisch sind die Dichten der Exzitonen im stationären Zustand bei einer Laserleistung von  $P_L = 524 \mu\text{W}$  und einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$  in Abbildung 3.19 dargestellt. Die Verteilungen der thermischen und der kondensierten Dichten sind den entsprechenden Resultaten im Gleichgewicht sehr ähnlich. Das Kondensat befindet sich im Fallenzentrum und verdrängt von dort die meisten thermischen Exzitonen. Die Dichte der thermischen Exzitonen bildet dadurch eine kraterartige Form aus. Da innerhalb dieses Modells die Thomas-Fermi-Näherung nicht angewendet wurde, verlaufen die Kurven stetig und die Kondensatsdichte verschwindet nicht abrupt.

### Spektrale Temperatur

Die stationären Zustände des gepumpten Systems sind offenbar nicht durch ein Quasigleichgewicht zu beschreiben. Umso drängender ist die Frage, welche spektrale Temperatur in diesem Fall beobachtet werden würde. In Abbildung 3.20 sind typische Fälle für verschiedene



**Abbildung 3.20.:** Mittlere Temperatur  $\langle T(t) \rangle$  (durchgezogene Kurve), Temperatur im Fallenzentrum  $T_Z$  (Kreuze), spektrale Temperatur  $T_S$  (Kreise) und Badtemperatur  $T_{\text{Bad}}$  (schwarz gestrichelt) bei verschiedenen Laserleistungen. Von oben nach unten sind die Parameter:  $T_{\text{Bad}} = 1,0\text{ K}$  und  $P_L = 26\ \mu\text{W}$  ( $N_\infty = 2,37 \times 10^7$ );  $T_{\text{Bad}} = 0,5\text{ K}$  und  $P_L = 262\ \mu\text{W}$  ( $N_\infty = 1,26 \times 10^8$ );  $T_{\text{Bad}} = 0,037\text{ K}$  und  $P_L = 26\ \mu\text{W}$  ( $N_\infty = 1,89 \times 10^7$ ).

Anregungsbedingungen dargestellt. Für niedrige Anregungsraten und hohe Badtemperaturen (Abbildung 3.20 oben) fallen Badtemperatur, Temperatur im Fallenzentrum und spektrale Temperatur ungefähr zusammen. Die mittlere Temperatur ist gegenüber diesen leicht erhöht. Für den Fall einer nicht entarteten Gleichgewichtsverteilung mit Badtemperatur müssten alle diese Temperaturen übereinstimmen. Die Abweichung der mittleren Temperatur ist somit ein Indiz für den Nichtgleichgewichtscharakter des stationären Zustandes. Wird nun die Badtemperatur abgesenkt und die Anregungsleistung erhöht (Abbildung 3.20 Mitte), so fällt die spektrale Temperatur weiterhin mit der Badtemperatur zusammen. Allerdings sind Tempera-

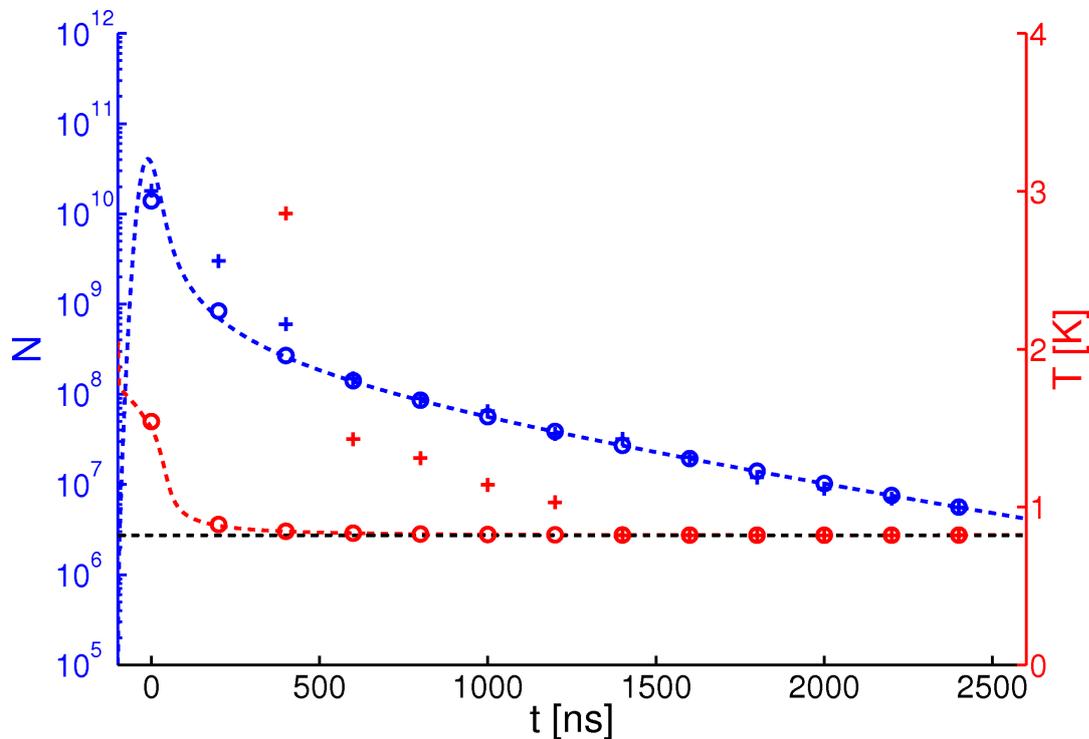
tur im Fallenzentrum und mittlere Temperatur deutlich höher und voneinander verschieden. Senkt man die Badtemperatur noch weiter ab und betrachtet eine moderate Anregungsleistung (Abbildung 3.20 unten), so sind alle betrachteten Temperaturen verschieden. Dabei ist die Badtemperatur die niedrigste, gefolgt von der spektralen Temperatur, der Temperatur im Fallenzentrum und der mittleren Temperatur. Diese Reihenfolge bleibt auch bei anderen Anregungsleistungen erhalten. Es ergibt sich also folgendes Bild: die spektrale Temperatur ist immer mindestens so groß wie die Badtemperatur, aber typischerweise sowohl niedriger als die Temperatur im Fallenzentrum als auch die mittlere Temperatur, wobei der Unterschied zwischen spektraler und mittlerer Temperatur typischerweise ein Faktor 2 ist, falls erstere nicht durch die Badtemperatur beschränkt ist.

Die Ursache für dieses Verhalten ist eine gegenüber dem Gleichgewicht deutlich veränderte räumliche und energetische Verteilung des Spektrums. Die inhomogene Verteilung von Temperatur und Dichte führen zu einem deutlich steileren Abfall des räumlich integrierten Lumineszenzspektrums und somit zu der tieferen spektralen Temperatur der Exzitonen. Dieses Ergebnis ist allerdings intuitiv nicht zu verstehen. Besonders die Tatsache, dass die spektrale Temperatur unter der tiefsten im System vorkommenden Exzitonentemperatur liegen soll, ist merkwürdig. Für den im unteren Graphen von Abbildung 3.20 dargestellten Fall liegt beispielsweise die minimale Temperatur der Exzitonen bei 0,32 K und die spektrale Temperatur beträgt lediglich  $T_S = 0,23$  K. Eine mögliche Erklärung ist, dass die verwendete Methode zur Berechnung des Spektrums in diesem Fall nicht anwendbar ist. Dies ist durchaus vorstellbar, da die in Abschnitt 2.2 abgeleiteten Formeln für Exzitonen im Gleichgewicht gelten. Allerdings befinden sich die Exzitonen auch in diesem hydrodynamischen Modell zumindest in einem lokalen Gleichgewicht. Zudem lieferte die spektrale Temperatur unter gepulster Anregung vernünftige Resultate. Es ist daher wahrscheinlicher, dass es sich um ein Artefakt der vereinfachten sphärischen Symmetrie handelt. Bei gepulster Anregung befinden sich nach kurzer Zeit alle Exzitonen im Zentrum der Falle und bilden eine kugelförmige thermische Wolke. Im Gegensatz dazu existieren bei Dauerstrichanregung zu jeder Zeit weit außerhalb des Fallenminimums heiße Exzitonen, welche zum Zentrum der Falle driften. Aufgrund der sphärischen Symmetrie erfolgt die Erzeugung neuer Exzitonen auf einer Kugelschale, was die realen Anregungsbedingungen nur schlecht reproduziert. Auf die meisten Größen, wie z.B. mittlere Temperatur, Dichte und Teilchenzahl, dürfte dies jedoch kaum Einfluss haben, da die Exzitonen sich mehrheitlich im Fallenzentrum befinden. Es könnte jedoch die Ursache für das Verhalten der spektralen Temperatur bei Dauerstrichanregung sein. Zur Klärung dieses Problems ist eine gegenüber der in 2.2 angegebenen verbesserte Lumineszenztheorie bzw. die Verwendung einer anderen Geometrie (Zylindersymmetrie) nötig. Da dies aber den Rahmen dieser Arbeit übersteigt, lässt sich zum jetzigen Zeitpunkt dieses Problem nicht lösen.

### 3.6. Vergleich von Experiment und Theorie

Bei dem Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen [25, 26] soll es um einige ausgewählte Probleme gehen. Dabei sind folgende Fragestellungen von besonderem Interesse: (i) Stimmt die experimentell bestimmte Entwicklung der Paraexzitonenzahl sowie deren Temperatur (Abbildungen 8 und 9 in [25]) unter gepulster Anregung mit den theoretisch berechneten Werten überein? (ii) Kann die große Diskrepanz zwischen gemessener Exzitonentemperatur und der Badtemperatur (Abbildung 3 in [26]) unter Dauerstrichanregung mittels der theoretischen Resultate erklärt werden? (iii) Können das Abknicken der Lumineszenz sowie die bimodale Verteilung (Abbildungen 9 und 12 in [26]) durch Effekte des Nichtgleichgewichts erklärt werden? Besonders die dritte Frage ist von großer Bedeutung, da sich die Behauptung, ein Kondensat von Exzitonen gefunden zu haben, im wesentlichen auf diese beiden Punkte stützt.

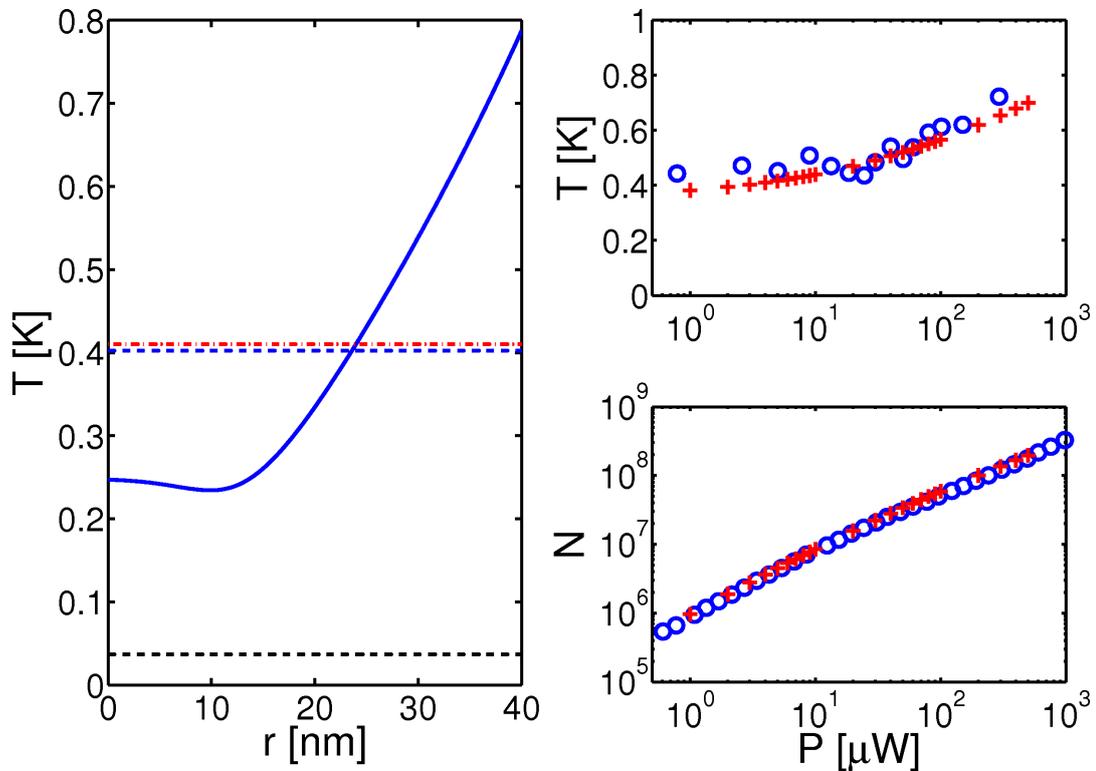
Zur Beantwortung der ersten Frage wird wie folgt vorgegangen: Da im Experiment anisotrope Fallen vorkommen, wird der für die theoretischen Rechnungen verwendete Fallenparameter aus dem arithmetischen Mittel der anisotropen Fallenparameter gebildet. Für die Werte in [25] ergibt dies  $\alpha = 0,104 \mu\text{eV}/\text{nm}^2$ . Die zeitliche Modulation des Laserpulses ist gaußförmig mit dem Breitenparameter  $\Delta_t = 25 \text{ ns}$ . Räumlich wird der Laserspot  $100 \mu\text{m}$  außerhalb des Fallenzentrums positioniert. Die Normierung wird so gewählt, dass insgesamt  $6 \times 10^{10}$  Exzitonen erzeugt werden. Der Wert des Auger-Koeffizienten wird auf  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  festgelegt. Dies ist zwar niedriger als der in [25] angegebene Wert von  $A = 3,7 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ , aber innerhalb der Fehlergrenzen des experimentell bestimmten Wertes. Die sich aus diesen Werten ergebende Teilchenzahl und mittlere Temperatur ist in Abbildung 3.21 dargestellt. Die experimentellen und theoretischen Ergebnisse für die Exzitonenzahl stimmen gut überein. Lediglich der zweite und dritte Punkt zeigen eine deutliche Abweichung. Die Ursache hierfür ist vermutlich die in den theoretischen Rechnungen nicht enthaltene Ortho-Para-Konversion. Diese führt auch nach dem Abschalten des Lasers noch zur Generation neuer Paraexzitonen und zu den genannten Abweichungen. Die Verwendung eines größeren Auger-Koeffizienten führt zu einer Verschiebung der Kurve nach unten und somit zu systematischen Abweichungen. Geht man also von einem leicht schwächeren Auger-Koeffizienten aus, so stimmen die theoretische und experimentelle Entwicklung der Exzitonenzahlen gut überein. Die Temperatur der Exzitonen ist jedoch anhand des hier verwendeten Modells nicht erklärbar. Die ersten beiden Werte der spektralen Temperatur sind sogar jenseits der verwendeten Skala (die Werte sind 12,5 K und 6,0 K). Nach den Ergebnissen der Rechnungen in Abschnitt 3.2 sollten Exzitonen bereits nach einer Nanosekunde auf Temperaturen um 4 K abgekühlt sein. In diesem Fall jedoch beträgt die spektrale Temperatur selbst nach mehreren 100 ns noch immer 6 K. Auch mit einem deutlich erhöhten Auger-Koeffizienten könnte eine so langsam verlaufende Abkühlung nicht annähernd reproduziert werden. Andererseits wurde in Abschnitt 3.5.1 gezeigt, dass die spektrale Temperatur unter gepulster Anregung tatsächlich die mittlere Temperatur der Exzitonen widerspiegelt. Es liegt somit die Vermutung nahe, dass die Kristalltemperatur nicht der Tem-



**Abbildung 3.21.:** Exzitonzahl  $N(t)$  (blau gestrichelte Kurve) unter gepulster Anregung bei einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,82$  K (schwarz gestrichelte Kurve). Die zeitliche Modulation des Pulses und die Zahl der erzeugten Exzitonen wurden gemäß den Angaben in [25] modelliert. Die blauen Kreise sind die entsprechenden Werte bei einer Gatebreite von 200 ns. Die blauen Kreuze sind die experimentell bestimmten Werte der Teilchenzahl mit der gleichen Gatebreite. Zusätzlich sind die entsprechenden Werte für die berechnete mittlere Exzitonentemperatur  $\langle T \rangle$  (rot gestrichelte Kurve und rote Kreise) sowie die gemessene spektrale Temperatur  $T_S$  (rote Kreuze) dargestellt.

peratur des He-Bades entspricht. Ein durch den Laserpuls stark aufgeheizter und erst langsam abkühlender Kristall könnte das in [25] gezeigte Verhalten erklären. Da für die theoretischen Rechnungen allerdings von einer konstanten Temperatur der Phononen ausgegangen wird, lässt sich dieses Ergebnis nicht reproduzieren.

Für die zweite Frage wird auf Dauerstrichanregung gewechselt. Die Systemparameter wurden gemäß der in [26] gemachten Angaben implementiert ( $\alpha = 0,093 \mu\text{eV}/\text{nm}^2$  und  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$ ). Das Resultat dieser mit den in Abbildung 3 und 11 von [26] dargestellten Situation vergleichbaren Rechnung findet sich in Abbildung 3.22. Unter diesen Umständen ist die Temperatur in der Falle inhomogen verteilt und stets deutlich höher als die Badtemperatur. Die berechnete mittlere Temperatur der Exzitonen  $\langle T \rangle$  stimmt über weite Bereiche der Pumpleistung gut mit der experimentell ermittelten spektralen Temperatur  $T_S$  überein. Auch die berechnete Teilchenzahl zeigt Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Die Ergebnisse in Abbildung 3.22 legen somit den Schluss nahe, dass die experimentell ermittelte spektrale Temperatur der mittleren Temperatur der Exzitonen entspricht  $T_S^{\text{Exp}} = \langle T \rangle$ . Dieser Zusammenhang erscheint intuitiv plausibel und stützt die in [26] gemachte Hypothese,

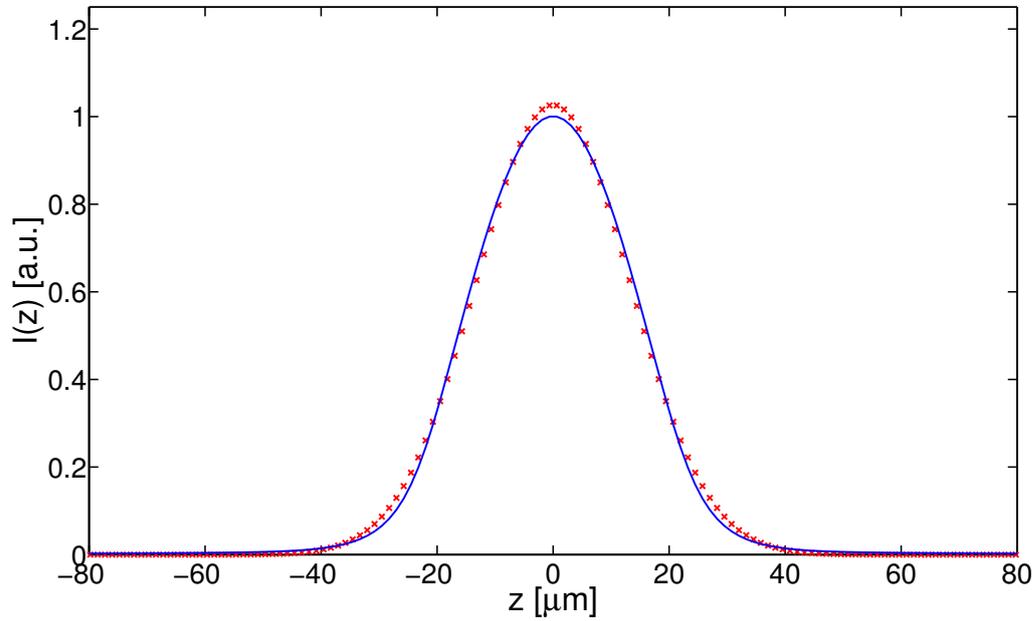


**Abbildung 3.22.:** Linke Spalte: Temperatur  $T(r)$  (blaue Kurve) und mittlere Temperatur  $\langle T(t) \rangle$  (blau gestrichelte Kurve) der Exzitonen im stationären Zustand unter Dauerstrichanregung bei einer Laserleistung von  $P_L = 3 \mu\text{W}$  und einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037$  K (schwarz gestrichelte Kurve). Die rot gestrichelte Kurve markiert die experimentell bestimmte spektrale Temperatur. Rechte Spalte: Berechnete mittlere Temperatur und Teilchenzahl (rote Kreuze) verglichen mit den experimentell ermittelten spektralen Temperaturen und Teilchenzahlen (blaue Kreise) für verschiedene Pumpleistungen. Die Systemparameter wurden entsprechend den Angaben aus [26] gewählt.

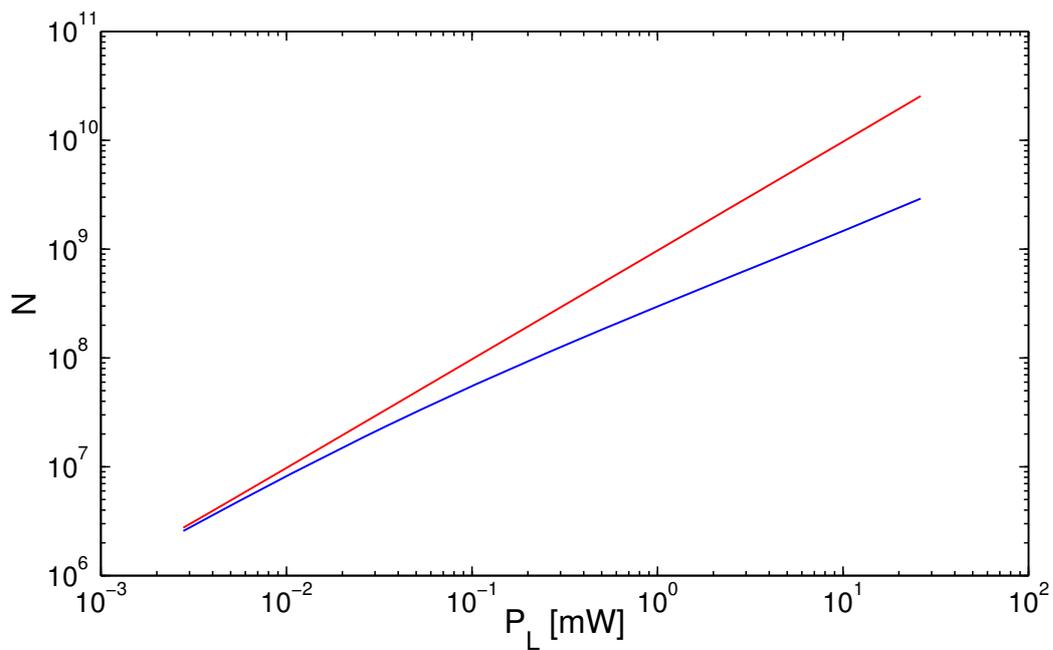
dass die experimentell ermittelte spektrale Temperatur höher sei als die Temperatur der Exzitonen im Fallenzentrum. Zudem untermauert dieses Ergebnis die bereits zuvor geäußerte Vermutung, dass die Berechnung des Spektrums unter Dauerstrichanregung zu fehlerhaften Resultaten führt. Eine endgültige Klärung der Ursachen ist, wie bereits diskutiert, an dieser Stelle leider nicht möglich.

Zur Beantwortung der dritten Frage werden die gleichen Systemparameter wie zuvor verwendet. Ein typisches  $z$ -aufgelöstes Spektrum und der dazugehörige *fit* sind in Abbildung 3.23 dargestellt. Der *fit* und die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  zeigen dabei keine markanten Abweichungen. Lediglich die Spitze des *fits* ragt leicht über  $I(z)$  hinaus. Es lassen sich jedoch keine Anzeichen einer bimodalen Verteilung ausmachen. Wie bereits zuvor diskutiert, scheint die Berechnung des Spektrums allerdings problematisch zu sein. Es lässt sich im Moment somit noch nicht endgültig klären, ob die bimodale Verteilung nicht doch durch das Nichtgleichgewicht erklärt werden kann.

Das Absinken der Teilchenzahl aufgrund des Auger-Effekts ist in Abbildung 3.24 dargestellt. Für die verwendeten Parameter wurden die gleichen Werte wie zuvor angenommen. Da



**Abbildung 3.23.:**  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  (blaue Kurve) und entsprechender *fit* (rote Kreuze) unter Dauerstrichanregung bei einer Laserleistung von  $P_L = 262 \mu\text{W}$  und einer Badtemperatur von  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ .



**Abbildung 3.24.:** Entwicklung der Exzitonenzahl  $N$  im stationären Zustand als Funktion der Leistung des Pump lasers  $P_L$  ohne Auger-Effekt (rote Kurve) und mit  $A = 2,0 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  (blaue Kurve). Die Badtemperatur liegt bei  $T_{\text{Bad}} = 0,037 \text{ K}$ .

in diesem Fall kein Kondensat vorliegt, sollte sich ein Absinken der Teilchenzahl direkt in der total integrierten Lumineszenz widerspiegeln. Ohne Auger-Effekt verläuft der Anstieg der Exzitonzahl mit der Laserleistung linear. Verglichen damit sinkt die Teilchenzahl bedingt durch den Auger-Effekt ab. Dieser Prozess ist allerdings kontinuierlich und es tritt kein abruptes Abknicken ein. Andererseits besitzen Knickkurven, wie sie in Abbildung 2.3 dargestellt sind, einen scharfen Übergang zwischen zwei verschiedenen Anstiegen. Beide Fälle sollten demnach gut zu unterscheiden sein. Der in Abbildung 12 von [26] gezeigte Verlauf ist demnach nicht durch den hier untersuchten Effekt zu erklären.



## Kapitel 4.

### Zusammenfassung

Unter der Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichts wurden diverse Signaturen eines exzitonischen Bose-Einstein-Kondensates gefunden. Diese sind (i) die flache Kante des  $z$ -aufgelösten Lumineszenzspektrums am chemischen Potential, (ii) das Auftreten des  $v^2(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ -Terms im Spektrum, (iii) die Bildung eines Plateaus in der  $z$ -aufgelösten Lumineszenz und (iv) das Abknicken der total integrierten Lumineszenz nach Auftreten eines Kondensats. Im folgenden wurde untersucht wie sich verschiedene Aspekte auf die Spektren der Exzitonen und speziell auf die gefundenen Signaturen des Kondensates auswirken. Untersucht wurden unter anderem der Einfluss der Stärke der Wechselwirkung, der gemachten Näherungen, eines umgebenden Elektron-Loch-Plasmas und eines schwach leuchtenden Kondensats. Hierbei wurde festgestellt, dass diverse Faktoren die Form der Spektren beeinflussen können, die Signaturen qualitativ aber in den meisten Fällen erhalten bleiben. Allerdings kann ein schwach leuchtendes Kondensat die Signaturen (i), (ii) und (iii) überdecken. Lediglich das Abknicken der total integrierten Lumineszenz hat sich demgegenüber als robust erwiesen. Dieser Effekt ist auch die einzige der theoretisch vorhergesagten Signaturen (i)-(iv) welche jemals experimentell beobachtet wurde [26].

Auf Grundlage dieser theoretischen Ergebnisse wurde ein *fit*-Algorithmus zur Ermittlung der physikalischen Parameter (Temperatur und chemisches Potential) aus den gemessenen Spektren entwickelt. Dieser wurde erfolgreich an theoretischen Daten getestet und auf experimentelle Spektren angewendet. Das Resultat der Analyse ergab eine deutliche Diskrepanz zwischen ermittelten spektralen Temperaturen der Exzitonen und den gemessenen Badtemperaturen. Dies bedeutet, dass die Exzitonen sich in einem Nichtgleichgewichtszustand befinden müssen. Daher wurde im folgenden ein Modell zur dynamischen Beschreibung der Exzitonen entwickelt.

Zu diesem Zweck wurden die von Griffin *et al.* in [74] abgeleiteten Gleichungen zur Beschreibung von Atomen in Fallen durch halbleiterspezifische Terme ergänzt und somit eine Anwendung auf Exzitonen möglich gemacht. Es wurde gezeigt, dass die thermischen Exzitonen unter den gegebenen Anregungsbedingungen innerhalb kürzester Zeit auf eine lokale Gleichgewichtsverteilung der Form (3.27) relaxieren. Dies ermöglicht eine Beschreibung der

thermischen Exzitonen über die in (3.35) angegebenen hydrodynamischen Gleichungen. Die kondensierte Phase wird über die Gross-Pitajewski-Gleichung (3.39) beschrieben. In diesem Modell sind neben den Exziton-Exziton- und Exziton-Phonon-Stößen auch die endliche Lebensdauer, der auferartige Zweikörperzerfall und die Erzeugung der Exzitonen enthalten. Es sind also Prozesse wie die Thermalisierung, die Driftbewegung ins Fallenminimum und der Zerfall der Exzitonen orts- und zeitaufgelöst beschreibbar. Somit geht das in dieser Arbeit entwickelte Modell zur Beschreibung der Exzitonen in der Falle bei ultratiefen Temperaturen über alle bisherigen Arbeiten [51, 79, 80, 81, 82] hinaus.

Die wichtigsten Resultate der numerischen Rechnungen sind die folgenden Punkte. Die Thermalisierungszeit der Exzitonen unter gepulster Anregung kann zwischen wenigen 100 ns und mehreren Lebensdauern liegen. Es kann demnach im Allgemeinen nicht davon ausgegangen werden, dass die Exzitonen die gleiche Temperatur besitzen wie der Kristall. Speziell bei ultratiefen Temperaturen ( $T_{\text{Bad}} \ll 0,5 \text{ K}$ ) führen das „Ausfrieren“ der Phononen und der Auger-Effekt zu deutlichen Abweichungen. Es konnte außerdem gezeigt werden, dass bei gepulster Anregung die spektrale Temperatur der mittleren Temperatur der Exzitonen entspricht.

Unter Dauerstrichanregung bilden sich stationäre Zustände aus, die nicht durch einen Quasigleichgewichtszustand beschrieben werden können. Insbesondere stellen sich inhomogene Temperaturverteilungen ein, welche zu mittleren Exzitonentemperaturen deutlich über der Badtemperatur führen. Der direkte Vergleich von theoretischen Rechnungen und gemessenen Spektren legt nahe, dass unter Dauerstrichanregung die experimentell ermittelte spektrale Temperatur ebenfalls der mittleren Temperatur der Exzitonen entspricht. Die berechneten Exzitonenzahlen stimmen sowohl für gepulste als auch für Dauerstrichanregung gut mit den experimentellen Ergebnissen des Ratenmodells überein. Für die Frage, ob und unter welchen Umständen ein Kondensat von Exzitonen auftritt, ist der Auger-Effekt von überragender Bedeutung. Unter den für dieses Modell gemachten Annahmen und typischen Laserleistungen, sollte für keinen der experimentell bestimmten Auger-Koeffizienten ein Kondensat von Exzitonen auftreten. Erst eine Absenkung auf  $A \approx 2 \times 10^{-19} \text{ cm}^3/\text{ns}$  liefert bei moderaten Anregungsleistungen ein Kondensat von Exzitonen. Dieser Wert liegt mehrere Größenordnungen über den in [58, 59, 57] theoretisch berechneten Auger-Koeffizienten. Das prinzipielle Erreichen eines exzitonischen Bose-Einstein-Kondensates sollte somit möglich sein.

## 4.1. Ausblick

Trotz der Fortschritte in der theoretischen Beschreibung der Experimente gibt es noch einige offene Probleme. Wenn der mit  $A = 2 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{ns}$  in [26] angegebene Wert des Auger-Koeffizienten korrekt ist, sollte laut den hier vorgestellten Rechnungen keine der Messungen in [26] ein Kondensat aufweisen. Allerdings stellen das Abknicken der integrierten Lumines-

zenz und das Auftreten der bimodalen Verteilung deutliche Signaturen für ein Kondensat dar. Diese beiden Signaturen konnten auch nicht durch mögliche Nichtgleichgewichtseffekte erklärt werden. Ein weiteres Problem stellt die Berechnung der spektralen Temperatur unter Dauerstrichanregung dar. Laut den theoretischen Ergebnissen sollte die spektrale Temperatur tiefer sein als alle im System vorkommenden Temperaturen der Exzitonen. Es wird vermutet, dass es sich hierbei um ein Artefakt der vereinfachten Symmetrie handelt.

Für die Klärung dieser wichtigen Frage und zur weiteren Verbesserung des Modells sind verschiedene Erweiterungen denkbar. Die experimentell verwendeten Fallen besitzen Zylindersymmetrie, ein wichtiger Punkt wäre daher die Verwendung entsprechender Koordinaten. Dadurch könnten die Anregungsbedingungen realistischer gestaltet und mögliche Artefakte bei der Berechnung des Lumineszenzspektrums ausgeschlossen werden. Aus den Experimenten ist bekannt, dass sich bei hohen Anregungsleistungen der Kristall und sogar das umgebende Heliumbad erwärmen können. Ein solcher Effekt könnte durch die Verwendung einer leistungsabhängigen Phonontemperatur in das Modell einbezogen werden. Allerdings ist die experimentelle Bestimmung der Kristalltemperatur äußerst schwierig und wurde bisher noch nie durchgeführt. Wie gezeigt wurde, kommt dem Auger-Effekt eine überragende Bedeutung zu. Ein besseres theoretisches Verständnis dieses Effekts ist daher erforderlich. So könnte die Einbeziehung einer möglichen  $k$ -Abhängigkeit des Auger-Koeffizienten die numerischen Resultate deutlich beeinflussen. Zudem könnte die gesamte kinetische Relaxation der durch den Auger-Effekt erzeugten Exzitonen modelliert werden, statt nur des niederenergetischen Anteils. Dazu müssten neben akustischen auch optische Phononen betrachtet werden. Auch die explizite Einbeziehung der Orthoexzitonen in die Rechnungen ist eine denkbare Erweiterung. Dadurch würde das System zu einem mehrkomponentigen Bosegas und es könnten Konversionsprozesse direkt modelliert werden. Die Erweiterung der entsprechenden Gleichungen ist von theoretischer Seite leicht durchzuführen, allerdings steigt der numerische Aufwand zur Lösung dieser drastisch. Als letzter Punkt ist die Entwicklung einer verbesserten Lumineszenztheorie zu nennen. Diese ist für den direkten Vergleich zwischen Experiment und Theorie ein wichtiger Baustein. Für die Klärung der offenen Fragen bezüglich der experimentellen Ergebnisse sind dieser letzte Punkt und die Verwendung einer Zylindersymmetrie vermutlich am wichtigsten.

Trotz dieser vielen möglichen Erweiterungen und der noch offenen Fragen liefert das bisherige Modell bereits vielversprechende Resultate. So erklärt es bereits diverse experimentell beobachtete Effekte, wie zum Beispiel die Abweichung der Exzitonentemperatur von der Temperatur des Heliumbades. Zusätzlich stimmen die numerischen Ergebnisse gut mit den experimentellen Werten überein. Die Kondensationsgrenze im theoretischen Modell kann sich durch eine verbesserte Modellierung des Auger-Effekts leicht ändern. Zusätzlich zeigten die experimentellen Befunde in [26] deutlich Signaturen eines Kondensates. Somit ist  $\text{Cu}_2\text{O}$  nach wie vor der beste Kandidat für eine experimentelle Umsetzung der Bose-Einstein-Kondensation

von Exzitonen in einem Volumenmaterial. Dank der erfolgreichen Verbindung von Theorie und Experiment ist dieses alte Ziel in greifbare Nähe gerückt.

# Anhang A.

## Publikationen

### A.1. Veröffentlichte Artikel

- (I) S. Sobkowiak, D. Semkat, H. Stolz, Th. Koch und H. Fehske  
Interacting multicomponent exciton gases in a potential trap: Phase separation and Bose-Einstein condensation  
Phys. Rev. B **82**, 064505 (2010).
- (II) S. Sobkowiak, D. Semkat, H. Stolz, Th. Koch und H. Fehske  
Phase separation of multicomponent excitonic Bose-Einstein condensates  
Phys. Status Solidi C **8**, 1178 (2011).
- (III) D. Semkat, S. Sobkowiak, G. Manzke und H. Stolz  
Comment on “Condensation of Excitons in a Trap”  
Nano Lett. **12** (9), 5055 (2012).
- (IV) H. Stolz, R. Schwartz, F. Kieseling, S. Som, M. Kaupsch, S. Sobkowiak, D. Semkat, N. Naka, Th. Koch und H. Fehske  
Condensation of excitons in Cu<sub>2</sub>O at ultracold temperatures: experiment and theory  
New J. Phys. **14** 105007 (2012).
- (V) S. Sobkowiak, D. Semkat und H. Stolz  
Modeling of the thermalization of trapped paraexcitons in Cu<sub>2</sub>O at ultralow temperatures  
Phys. Rev. B **90** , 075206 (2014).

## A.2. Eingereichte Artikel

- (I) S. Sobkowiak, D. Semkat und H. Stolz  
Dynamics of trapped ultracold paraexcitons in  $\text{Cu}_2\text{O}$   
Eingereicht bei Phys. Rev. B.

## A.3. Sonstiges

- (I) Titelseite zu Phys. Status Solidi C 4/2011 (Volume 8, Issue 4).  
Auswahl des Artikels Phys. Status Solidi C 8, 1178 (2011) durch die Editoren als Titel-  
thema.

## A.4. Konferenzbeiträge

- (a) DPG Spring Meeting 2010 (Condensed Matter Section)  
Regensburg, Germany, March 21-26, 2010  
Poster: S. Sobkowiak, D. Semkat, H. Stolz, Th. Koch und H. Fehske  
Optical signatures of a Bose-Einstein condensate of excitons in a potential trap
- (b) 10th International Workshop on Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconduc-  
tors (NOEKS 10)  
Paderborn, Germany, August 16-19, 2010  
Poster: S. Sobkowiak, D. Semkat, H. Stolz, Th. Koch und H. Fehske  
Phase separation and Bose-Einstein condensation of excitons in cuprous oxide
- (c) Fundamental Optical Processes in Semiconductors (FOPS 2011)  
Lake Junaluska, North Carolina, USA, August 1-5, 2011  
Poster: S. Sobkowiak, D. Semkat, Th. Koch, H. Fehske und H. Stolz  
Spectral signatures of Bose-Einstein condensation of excitons in cuprous oxide
- (d) International Conference on Correlation Effects in Radiation Fields (CERF 2011)  
Rostock, Germany, September 12-16, 2011  
Poster: D. Semkat, S. Sobkowiak, Th. Koch, H. Stolz und H. Fehske  
Spectral signatures of Bose-Einstein condensation of excitons in cuprous oxide
- (e) 11th International Workshop on Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconduc-  
tors (NOEKS 11)  
Stuttgart, Germany, September 23-27, 2012  
Poster: D. Semkat, S. Sobkowiak, W.-D. Kraeft und H. Stolz

Exciton-exciton scattering in cuprous oxide: interaction potentials and s-wave scattering lengths

- (g) 13th International Conference on Optics of Excitons in Confined Systems (OECS 13)  
Rome, Italy, September 9-13, 2013

Poster: S. Sobkowiak, D. Semkat, Th. Bornath, W.-D. Kraeft und H. Stolz  
Hydrodynamics of trapped ultracold excitons  $\text{Cu}_2\text{O}$

- (h) 7th International Conference on Spontaneous Coherence in Excitonic Systems (ICSCE 7)  
Hakone, Japan, April 21-25, 2014

Poster: S. Sobkowiak, D. Semkat und H. Stolz  
Thermalisation of trapped ultracold excitons and the possibility of Bose-Einstein condensation in  $\text{Cu}_2\text{O}$



# Anhang B.

## B.1. Abkürzungen

| Abkürzung | Bedeutung                              |
|-----------|----------------------------------------|
| BEK       | Bose-Einstein-Kondensation             |
| GPG       | Gross-Pitajewski-Gleichung             |
| HFBN      | Hartree-Fock-Bogoljubow-Näherung       |
| HFBNP     | Hartree-Fock-Bogoljubow-Popow-Näherung |
| HFBG1N    | Hartree-Fock-Bogoljubow-G1-Näherung    |
| HFBG2N    | Hartree-Fock-Bogoljubow-G2-Näherung    |
| LA        | longitudinal-akustisch                 |
| LDN       | Lokaldichtenäherung                    |
| TA        | transversal-akustisch                  |
| TFN       | Thomas-Fermi-Näherung                  |
| X-Ph      | Exziton-Phonon                         |
| X-X       | Exziton-Exziton                        |

**Tabelle B.1.:** Abkürzungen in alphabetischer Reihenfolge.

## B.2. Berechnung der Exziton-Exziton-Stoßintegrale

Bei den X-X-Stößen muss zwischen zwei Fällen unterschieden werden, nämlich Stoßprozesse, in denen einer der Anfangs- oder Endzustände das Kondensat ist und Stöße, bei denen dies nicht der Fall ist. Für die Rechnungen wird zum einen  $C_{X-X}$  und zum anderen  $\Gamma_{Xc-X}^{(0)}$  benötigt. Beide Fälle lassen sich auf die Form

$$\Gamma = \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \times \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_3} - \varepsilon_{\mathbf{k}_4}) \tilde{F}(k, k_2, k_3, k_4) \quad (\text{B.1})$$

bringen, wobei  $\tilde{F}$  für ein Produkt aus Verteilungsfunktionen steht. Integrale dieser Art können mit der von Snoke *et al.* in [79] vorgeschlagene Methode berechnet werden, wenn die Verteilungsfunktionen nur vom Betrag des jeweiligen Wellenvektors abhängen. Da alle exzitonischen Verteilungsfunktionen die Form einer lokalen Gleichgewichtsverteilung besitzen (3.27), ist diese Voraussetzung erfüllt. Weiterhin wird davon ausgegangen, dass die Energie der thermischen Exzitonen durch (3.15) gegeben ist. Somit wird aus Gleichung (B.1) nach Einsetzen der Dispersion

$$\Gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \times \delta(A^2 + k_2^2 - k_3^2 - k_4^2) \tilde{F}(k, k_2, k_3, k_4) \quad (\text{B.2})$$

mit  $A^2 = 2m(\varepsilon - U)/\hbar^2$ . Als nächster Schritt wird die Impuls-Deltafunktion ausgenutzt, um die  $\mathbf{k}_4$ -Integration auszuführen. Dabei wird die Differenz aus  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_3$  als neuer Vektor  $\tilde{\mathbf{k}}$  eingeführt:

$$\Gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \delta\left(A^2 + k_2^2 - k_3^2 - (\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{k}_2)^2\right) \tilde{F}\left(k, k_2, k_3, |\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{k}_2|\right).$$

Durch Ausmultiplizieren des quadratischen Termes  $(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{k}_2)^2 = \tilde{k}^2 + 2\tilde{k}k_2 \cos \angle(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{k}_2) + k_2^2$  mit anschließendem Ausklammern von  $2\tilde{k}k_2$  ergibt sich

$$\Gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \frac{1}{2\tilde{k}k_2} \delta\left(\frac{A^2 - k_3^2 - \tilde{k}^2}{2\tilde{k}k_2} - \cos \angle(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{k}_2)\right) \times \tilde{F}\left(k_2, k_3, \sqrt{\tilde{k}^2 + 2\tilde{k}k_2 \cos \angle(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{k}_2) + k_2^2}\right).$$

Die Integration über den Raumwinkel der  $\mathbf{k}_2$ -Integration ( $d\Omega_2$ ) ergibt mit der Wahl  $\cos \angle(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{k}_2) = \vartheta_2$

$$\Gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{2\pi}{2} \int dk_2 k_2 \int d\mathbf{k}_3 \tilde{k}^{-1} \Theta\left(\frac{A^2 - k_3^2 - \tilde{k}^2}{2\tilde{k}k_2} + 1\right) \Theta\left(\frac{k_3^2 + \tilde{k}^2 - A^2}{2\tilde{k}k_2} + 1\right) \times \tilde{F}\left(k_2, k_3, \sqrt{A^2 + k_2^2 - k_3^2}\right).$$

Die Thetafunktionen entstehen hierbei, da  $\cos \angle(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{k}_2) \in [-1, 1]$  gilt. Als nächstes lässt sich die Integration über den Raumwinkel  $d\Omega_3$  ausführen. Die Integration über  $\phi_3$  ergibt lediglich einen Faktor  $2\pi$ , während die Integration über  $\vartheta_3$  umgewandelt wird in eine Integration über  $\tilde{k}$ . Es gilt  $\tilde{k} = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_3| = \sqrt{k^2 - 2kk_3 \cos \angle(\mathbf{k}, \mathbf{k}_3) + k_3^2}$  und somit  $d\tilde{k}/dz = (-2kk_3)/(2\sqrt{k^2 - 2kk_3z + k_3^2})$ . Die Integration kann also folgendermaßen umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 dz &= - \int_{\tilde{k}(-1)}^{\tilde{k}(1)} \frac{\tilde{k}}{kk_3} d\tilde{k} \\ &= \int_{|k-k_3|}^{k+k_3} \frac{\tilde{k}}{kk_3} d\tilde{k}. \end{aligned}$$

Eingesetzt in die Ausgangsgleichung ergibt sich

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{(2\pi)^2}{2k} \int dk_2 k_2 \int dk_3 k_3 \tilde{F} \left( k_2, k_3, \sqrt{A^2 + k_2^2 - k_3^2} \right) \\ &\quad \times \int_{|k-k_3|}^{k+k_3} d\tilde{k} \Theta \left( \frac{A^2 - k_3^2 - \tilde{k}^2}{2\tilde{k}k_2} + 1 \right) \Theta \left( \frac{k_3^2 + \tilde{k}^2 - A^2}{2\tilde{k}k_2} + 1 \right). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Die Integration über  $d\tilde{k}$  ergibt nur einen Beitrag, wenn die Argumente beider Thetafunktionen positiv sind. Mit der Abkürzung  $\tilde{k}_4 = \sqrt{A^2 + k_2^2 - k_3^2}$  lassen sich die Nullstellen der Thetafunktionen angeben mit  $\tilde{k}_{1/2} = k_2 \pm \tilde{k}_4$  und  $\tilde{k}_{3/4} = -k_2 \pm \tilde{k}_4$ . Das Ergebnis der Integration lässt sich somit schreiben als

$$\begin{aligned} \tilde{k}_{\text{diff}} &= \tilde{k}_{\text{up}} - \tilde{k}_{\text{lo}} \\ &= \min(k + k_3, k_2 + \tilde{k}_4) - \max(|k - k_3|, |k_2 - \tilde{k}_4|). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Es verbleibt somit eine Doppelintegration der Form

$$\Gamma = \frac{m(2\pi)^2}{\hbar^2 k} \int dk_2 k_2 \int dk_3 k_3 \tilde{k}_{\text{diff}} \tilde{F}(k, k_2, k_3, \tilde{k}_4), \quad (\text{B.5})$$

welches numerisch berechnet werden muss.

### B.2.1. $C_{X-X}$ -Stoßterm

Die Stöße zwischen thermisch angeregten Exzitonen können über den in (3.29) angegebenen Stoßterm beschrieben werden. In diesem Fall gilt  $A = k$  und

$$\tilde{F}_{X-X}(k, k_2, k_3, k_4) = (1 + f_k)(1 + f_{k_2})f_{k_3}f_{k_4} - f_k f_{k_2}(1 + f_{k_3})(1 + f_{k_4}). \quad (\text{B.6})$$

Unter Verwendung der Resultate des vorangegangenen Abschnittes lässt sich also schreiben

$$C_{X-X} = \frac{g^2 m}{(2\pi\hbar)^3 k} \int dk_2 k_2 \int dk_3 k_3 \tilde{k}_{\text{diff}} \tilde{F}_{X-X}(k, k_2, k_3, \tilde{k}_4). \quad (\text{B.7})$$

Die weitergehende numerische Behandlung erfolgt analog zu dem im folgenden diskutierten  $C_{X_c-X}$ -Stoßterm und wird deswegen nicht weiter ausgeführt.

### B.2.2. $C_{X_c-X}$ -Stoßterm

Der Einfluss der Stöße zwischen kondensierten und nicht-kondensierten Exzitonen lässt sich auf  $\Gamma_{X_c-X}^{(0)}$  zurückführen. Wie bereits gezeigt wurde, kann  $\Gamma_{X_c-X}^{(0)}$  auf die gleiche Form wie

Gleichung (B.1) gebracht werden (siehe Gleichung (3.57)). Es gilt also

$$\begin{aligned} A^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon'_c - U), \\ \tilde{F}_{X_c-X}(k_2, k_3, k_4) &= (1 + f_{k_2})f_{k_3}f_{k_4}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Unter Verwendung der Ergebnisse in Gleichung (B.5) ergibt sich somit

$$\Gamma_{X_c-X}^{(0)} = -\frac{g^2 n_c 2m}{(2\pi\hbar)^3 k_c} \left(1 - e^{-\beta[\tilde{\mu} - \varepsilon'_c]}\right) \int dk_2 k_2 \int dk_3 k_3 \tilde{k}_{\text{diff}} \tilde{F}_{X_c-X}(k_2, k_3, \tilde{k}_4). \quad (\text{B.9})$$

Es ist wichtig, an dieser Stelle zu bemerken, dass  $\tilde{k}_4^2$  eine positive Größe sein muss. Dies bedeutet, die Integration bezüglich  $k_3$  läuft lediglich bis zur Stelle  $k_3^{\text{max}} = \sqrt{k_2^2 + A^2}$ , da hier  $\tilde{k}_4^2$  verschwindet und für größere  $k_3$  negativ werden würde. Um das Integral numerisch zu berechnen, sind weitere Umformungen notwendig.

### B.2.3. Numerische Behandlung

Um die innere Integration über  $k_3$  weiter umzuformen, kann die bekannte Form der Verteilungsfunktionen (3.27) ausgenutzt werden. Um die Ableitungen etwas übersichtlicher zu gestalten, werden die Fugazität  $z = \exp(\beta\tilde{\mu}_{\text{eff}})$  (mit  $\tilde{\mu}_{\text{eff}} = \tilde{\mu} - U$ ) und die Abkürzung  $\beta(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2/2m = \beta p'^2/2m = \beta\hbar^2 k^2/2m = ak^2$  eingeführt. Mit diesen lässt sich die innere Integration schreiben als

$$\begin{aligned} I_{\text{Innen}} &= \int_0^{k_3^{\text{max}}} dk_3 k_3 \tilde{k}_{\text{diff}} (1 + \tilde{f}_{k_2}) \tilde{f}_{k_3} \tilde{f}_{k_4} \\ &= (1 + \tilde{f}_{k_2}) \int_0^{k_3^{\text{max}}} dk_3 \frac{k_3 \tilde{k}_{\text{diff}}}{(z^{-1} e^{ak_3^2} - 1)(z^{-1} e^{a\tilde{k}_4^2} - 1)} \\ &= (1 + \tilde{f}_{k_2}) \int_0^{k_3^{\text{max}}} dk_3 \frac{k_3 \tilde{k}_{\text{diff}} e^{-ak_3^2} e^{-a\tilde{k}_4^2}}{(z^{-1} - e^{-ak_3^2})(z^{-1} - e^{-a\tilde{k}_4^2})} \\ &= (1 + \tilde{f}_{k_2}) e^{-a(A^2 + k_2^2)} \int_0^{k_3^{\text{max}}} dk_3 \frac{k_3 \tilde{k}_{\text{diff}}}{(z^{-1} - e^{-ak_3^2})(z^{-1} - e^{-a\tilde{k}_4^2})} \\ &= (1 + \tilde{f}_{k_2}) e^{-a(A^2 + k_2^2)} I_{k_3}(k_2, A), \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

wobei zu beachten ist, dass  $I_{k_3}$  sowohl durch  $\tilde{k}_4$  als auch durch die obere Grenze  $k_3^{\text{max}}$  von  $k_2$  abhängt. Für den gesamten Stoßterm ergibt sich somit

$$\begin{aligned} \Gamma_{X_c-X}^{(0)} &= -\frac{g^2 n_c 2m}{(2\pi\hbar)^3 k_c} \left(1 - e^{-\beta[\tilde{\mu} - \varepsilon'_c]}\right) \int_0^\infty dk_2 k_2 (1 + \tilde{f}_{k_2}) e^{-a(A^2 + k_2^2)} I_{k_3}(k_2, A) \\ &= -\frac{g^2 n_c 2m}{(2\pi\hbar)^3 k_c} \left(1 - e^{-\beta[\tilde{\mu} - \varepsilon'_c]}\right) e^{-aA^2} \int_0^\infty dk_2 k_2 (1 + \tilde{f}_{k_2}) e^{-ak_2^2} I_{k_3}(k_2, A) \end{aligned}$$

$$= -\frac{g^2 n_c 2m}{(2\pi\hbar)^3 k_c} \left( e^{-\beta(\varepsilon'_c - U)} - z^{-1} \right) \int_0^\infty dk_2 k_2 e^{-ak_2^2} \frac{I_{k_3}(k_2, A)}{1 - ze^{-ak_2^2}}. \quad (\text{B.11})$$

An dieser Stelle bietet sich die Substitution  $x = ak_2^2$  an. Unter Beachtung der Funktionaldeterminante ergibt sich der Ausdruck

$$\begin{aligned} \Gamma_{X_c-X}^{(0)} &= -\frac{g^2 n_c 2m}{(2\pi\hbar)^3 k_c} \left( e^{-\beta(\varepsilon'_c - U)} - z^{-1} \right) \frac{1}{2a} \int_0^\infty dx e^{-x} \frac{I_{k_3}(\sqrt{x/a}, A)}{1 - ze^{-x}} \\ &= -\frac{g^2 n_c 2m}{(2\pi)^3 \beta \hbar^4 |\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_n|} \left( e^{-\beta(m(\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_n)^2/2 + \mu_c - U)} - z^{-1} \right) \\ &\quad \times \int_0^\infty dx e^{-x} \frac{I_{k_3}(\sqrt{x/a}, A)}{1 - ze^{-x}}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Das Integral in dieser Form wurde numerisch berechnet. Die Stützstellen der äußeren Integration ( $x$ ) werden gemäß Gauß-Laguerre-Gewichten festgelegt. Die innere Integration verläuft nach der Regel von Milne.

### B.3. Berechnung der Exziton-Phonon-Stoßintegrale

Die Integrale in (3.50) und (3.52) lassen sich durch eine gegenüber [97] leicht geänderte Notation noch kompakter schreiben. Hierzu wird zunächst die neue Größe  $\varepsilon^\pm$  über

$$\begin{aligned} \frac{E^\pm}{2m} &= \frac{1}{2m} \left[ \pm \frac{\hbar q}{2} - m(vz + v_s) \right]^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar q}{2} \mp mv_s \left( 1 + \frac{v}{v_s} z \right) \right]^2 \\ &= \frac{1}{2m} [p^\mp]^2 \\ &= \varepsilon^\mp \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

eingeführt. Unter Beachtung von

$$\begin{aligned} 1 - \exp[\beta(-E^\pm/2m + \tilde{\mu}_{\text{eff}})] &= 1 - \exp[\beta(-\varepsilon^\mp + \tilde{\mu}_{\text{eff}})] \\ &= \exp[-\beta(\varepsilon^\mp - \tilde{\mu}_{\text{eff}})] \{ \exp[\beta(\varepsilon^\mp - \tilde{\mu}_{\text{eff}})] - 1 \} \\ &= \frac{1}{1 + f(\varepsilon^\mp)} \end{aligned}$$

ergibt sich eine einfache Form für die zu berechnenden Integranden mittels der Funktion

$$G\left(\frac{v}{v_s}\right) = [f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B] \ln \left\{ \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} \right\}. \quad (\text{B.14})$$

Somit haben die Momente des Phononstoßterms die folgende Form

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} &= -\mathbf{e}_v \frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho v_s (2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dq q^3 \int_{-1}^1 dz z G, \\ \Gamma_{\text{X-Ph}}^{(2)} &= \frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho (2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dq q^3 \int_{-1}^1 dz G.\end{aligned}\quad (\text{B.15})$$

Beachtet man zudem, dass  $\Omega = qvz + v_s q = qv_s(1 + v/v_s z)$  gilt, so liegt es nahe, die Ausdrücke in (B.15) nach  $v/v_s$  zu entwickeln, falls  $v_s \gg v$  gilt.

### B.3.1. Entwicklung

Für die Ableitung einer Boseverteilung gilt im allgemeinen

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx} f[E(x)] = f'(E) &= -\frac{1}{(\exp[\beta(E - \mu)] - 1)^2} \exp[\beta(E - \mu)] \beta E' \\ &= -f(E)(1 + f(E))\beta E' .\end{aligned}$$

Damit wird die erste Ableitung von  $G$  bezüglich  $v/v_s$

$$\begin{aligned}G' \left( \frac{v}{v_s} \right) &= (-f_\Omega^B) \ln \left\{ \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} \right\} \\ &\quad + (f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B) \frac{1 + f(\varepsilon^+)}{1 + f(\varepsilon^-)} \left( \frac{f'(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} - \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{[1 + f(\varepsilon^+)]^2} f'(\varepsilon^+) \right) \\ &= \beta v_s z \left\{ (f_q^{\text{Ph}} - f_\Omega^B) [f(\varepsilon^-) p^- + f(\varepsilon^+) p^+] \right. \\ &\quad \left. + f_\Omega^B (1 + f_\Omega^B) \ln \left[ \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} \right] \hbar q \right\}.\end{aligned}\quad (\text{B.16})$$

Entwickelt man also die Ausdrücke in (B.15) bis zum Term erster Ordnung, so lässt sich die Integration über  $z$  analytisch ausführen. Da das erste Moment bereits eine Potenz in  $z$  enthält, verschwindet die nullte Ordnung und die erste Ordnung ergibt  $2/3$ . Genau entgegengesetzt verhält es sich beim zweiten Moment, hier liefert die nullte Ordnung einen Faktor 2 und die erste Ordnung nichts. Es verbleibt somit jeweils nur eine Integration über den Betrag von  $q$ . Die linearisierte Form der Gleichungen in (B.15) lauten demnach

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} &\approx -\mathbf{e}_v \frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho v_s (2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dq q^3 \frac{2}{3} \frac{v}{v_s} G'(0) \Big|_{z=1}, \\ \Gamma_{\text{X-Ph}}^{(2)} &\approx \frac{D^2 m^2 k_B T}{2\rho (2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dq q^3 2G(0).\end{aligned}\quad (\text{B.17})$$

Die Güte der Näherung wurde numerisch getestet; die Abweichungen werden erst bei Größenordnungen von  $v \geq 0,1 v_s$  relevant. Zum Beispiel beträgt bei einem Verhältnis von  $v = 0,01 v_s$

und typischen Temperaturen und chemischen Potentialen die Größenordnung des Fehlers der Näherung lediglich  $10^{-4}$ . Daher werden alle Fälle mit  $v \leq 0,01 v_s$  über die oben gemachte Entwicklung berechnet, während bei höheren Geschwindigkeiten das volle Doppelintegral berechnet wird.

### B.3.2. Numerische Behandlung

Für die numerische Berechnung werden die Integrale in (B.15) über die Substitution  $x = \beta \hbar q v_s$  dimensionslos gemacht. Somit nehmen die beiden Momente die Form

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} &= -e_v \frac{D^2 m^2}{2 \rho v_s^5 \beta^5 (2\pi)^3 \hbar^7} \int_0^\infty dx x^3 e^{-x} \int_{-1}^1 dz z F_1(x, z), \\ \Gamma_{\text{X-Ph}}^{(2)} &= \frac{D^2 m^2}{2 \rho v_s^4 \beta^5 (2\pi)^3 \hbar^7} \int_0^\infty dx x^3 e^{-x} \int_{-1}^1 dz F_1(x, z)\end{aligned}\quad (\text{B.18})$$

mit

$$F_1(x, z) = \frac{1}{e^{zxv/v_s} - e^{-x}} \ln \left[ \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} \right] \left( \frac{f_q^{\text{Ph}}}{f_\Omega^B} - 1 \right)$$

an. Die identische Substitution für die entwickelten Terme führt auf

$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{X-Ph}}^{(1)} &\approx -e_v \frac{D^2 m^2 v}{3 \rho v_s^5 \beta^4 (2\pi)^3 \hbar^7} \int_0^\infty dx x^3 e^{-x} F_2(x) \Big|_{v=0}, \\ \Gamma_{\text{X-Ph}}^{(2)} &\approx \frac{D^2 m^2}{\rho v_s^4 \beta^5 (2\pi)^3 \hbar^7} \int_0^\infty dx x^3 e^{-x} F_3(x) \Big|_{v=0}\end{aligned}\quad (\text{B.19})$$

mit den Funktionen

$$F_2(x) = \frac{1}{1 - e^{-x}} \left\{ \frac{x}{\beta v_s} (1 + f_\Omega^B) \ln \left[ \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} \right] + \left( \frac{f_q^{\text{Ph}}}{f_\Omega^B} - 1 \right) [f(\varepsilon^-) p^- + f(\varepsilon^+) p^+] \right\}$$

und

$$F_3(x) = \frac{1}{1 - e^{-x}} \ln \left[ \frac{1 + f(\varepsilon^-)}{1 + f(\varepsilon^+)} \right] \left( \frac{f_q^{\text{Ph}}}{f_\Omega^B} - 1 \right).$$

Nach der Substitution nehmen die zuvor definierten Größen  $p^\pm$ ,  $f_q^{\text{Ph}}$  und  $f_\Omega^B$  die folgende Form an

$$\begin{aligned}p^\pm &= \frac{x}{2\beta v_s} \pm m v_s \left( 1 + z \frac{v}{v_s} \right), \\ f_q^{\text{Ph}} &= \left[ \exp \left( x \frac{T}{T_{\text{Ph}}} \right) - 1 \right]^{-1},\end{aligned}$$

$$f_{\Omega}^B = \left[ \exp \left[ x \left( 1 + z \frac{v}{v_s} \right) \right] - 1 \right]^{-1},$$

wobei bei der Berechnung der entwickelten Terme ( $F_2(x)$  und  $F_3(x)$ ) jeweils  $v = 0$  gesetzt werden muss. In dieser Form wurden die Integrale über Stützstellen im Gauß-Laguerre-Verfahren berechnet.

## B.4. Bestimmung von Temperatur und chemischem Potential aus den hydrodynamischen Größen

Zur Berechnung einiger Stoßterme ist es nötig, die lokalen Werte von Temperatur  $T$  und chemischem Potential  $\tilde{\mu}$  zu kennen, obwohl diese in den hydrodynamischen Größen nicht explizit enthalten sind. Daher wird in diesem Abschnitt die Frage behandelt, wie aus den hydrodynamischen Größen die lokale Temperatur und das lokale chemische Potential bestimmt werden können.

Aus der hydrodynamischen Rechnung sind  $\tilde{n}$ ,  $E$ ,  $v_n$  sowie daraus abgeleitete Größen wie  $\tilde{\epsilon}$  bekannt. Die Verbindung der hydrodynamischen Größen mit der Verteilungsfunktion ist über

$$\begin{aligned} \tilde{n}(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\ \tilde{\epsilon}(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \end{aligned}$$

gegeben. Die Verteilungsfunktion selbst hat die Form eines lokalen Gleichgewichts

$$\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = [e^{\beta(\mathbf{r}, t)[(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2/2m + U(\mathbf{r}, t) - \tilde{\mu}(\mathbf{r}, t)]} - 1]^{-1}.$$

Das zu lösende Problem ist also das folgende: die Größen  $\tilde{n}(\mathbf{r}, t)$  und  $\tilde{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$  sind zu einer festen Zeit  $t$  an jedem Ort  $\mathbf{r}$  bekannt. Zu bestimmen sind die entsprechende Temperatur  $T(\mathbf{r}, t)$  und das chemische Potential  $\tilde{\mu}(\mathbf{r}, t)$ .

### Ansatz

Zunächst werden die Funktionen  $f_{\tilde{n}}$  und  $f_{\tilde{\epsilon}}$  folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} f_{\tilde{n}}(\tilde{\mu}, T) &= \tilde{n}(\mathbf{r}, t) - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \\ f_{\tilde{\epsilon}}(\tilde{\mu}, T) &= \tilde{\epsilon}(\mathbf{r}, t) - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v}_n)^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Für den korrekten Wert von  $\tilde{\mu}$  und  $T$  muss  $f_{\tilde{n}}(\tilde{\mu}, T) = f_{\tilde{\epsilon}}(\tilde{\mu}, T) = 0$  gelten. Es handelt sich somit um eine zweidimensionale Nullstellensuche. Wie schon zuvor ist es sinnvoll, die Verschiebung  $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}_n$  einzuführen. Zusammen mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}\beta' &= \frac{\hbar^2\beta}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mk_B T}, \\ \mu' &= \mu_{\text{eff}}\beta = \frac{\tilde{\mu} - U}{k_B T}\end{aligned}\quad (\text{B.21})$$

nimmt die Verteilungsfunktion die besonders einfache Form

$$f_k = \left[ \exp(\beta' k^2 - \mu') - 1 \right]^{-1} \quad (\text{B.22})$$

an. Auch die Ausdrücke in (B.20) vereinfachen sich weiter zu

$$\begin{aligned}f_{\tilde{n}}(\mu', \beta') &= \tilde{n} - \frac{1}{2\pi^2} \int dk k^2 f_k = \tilde{n} - \frac{1}{2\pi^2} I_0, \\ f_{\tilde{\epsilon}}(\mu', \beta') &= \tilde{\epsilon} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} \int dk k^4 f_k = \tilde{\epsilon} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} I_1\end{aligned}\quad (\text{B.23})$$

mit  $I_n = \int dk k^{2(n+1)} f_k$ . Der nächste Schritt des Nullstellenverfahrens ( $\Delta\mu'$  bzw.  $\Delta\beta'$ ) kann über [78]

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \mu'} & \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \beta'} \\ \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \mu'} & \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \beta'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mu' \\ \Delta\beta' \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_{\tilde{n}} \\ f_{\tilde{\epsilon}} \end{pmatrix} \quad (\text{B.24})$$

bestimmt werden. Hierzu werden zunächst die Ableitungen in (B.24) berechnet

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \mu'} &= -\frac{1}{2\pi^2} \int dk k^2 f_k (1 + f_k) = -\frac{1}{2\pi^2} J_0, \\ \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \mu'} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} \int dk k^4 f_k (1 + f_k) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} J_1, \\ \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \beta'} &= \frac{1}{2\pi^2} \int dk k^4 f_k (1 + f_k) = \frac{1}{2\pi^2} J_1, \\ \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \beta'} &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} \int dk k^6 f_k (1 + f_k) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} J_2\end{aligned}$$

mit  $J_n = \int dk k^{2(n+1)} f_k (1 + f_k)$ . Somit ergeben sich

$$\begin{aligned}D &= \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \mu'} \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \beta'} - \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \beta'} \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \mu'} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi^2)^2} (J_1^2 - J_0 J_2), \\ D_{\mu'} &= \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \beta'} f_{\tilde{\epsilon}} - f_{\tilde{n}} \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \beta'} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi^2)^2} [I_0 J_2 - I_1 J_1] + \frac{1}{2\pi^2} [J_1 \tilde{\epsilon} - J_2 \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{n}], \\ D_{\beta'} &= \frac{\partial f_{\tilde{\epsilon}}}{\partial \mu'} f_{\tilde{n}} - \frac{\partial f_{\tilde{n}}}{\partial \mu'} f_{\tilde{\epsilon}} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi^2)^2} [I_0 J_1 - I_1 J_0] + \frac{1}{2\pi^2} [J_0 \tilde{\epsilon} - J_1 \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{n}]\end{aligned}$$

und dadurch der nächste Schritt der Nullstellensuche  $\Delta\mu' = D_{\mu'}/D$  und  $\Delta\beta' = D_{\beta'}/D$  [78]. Ausgehend von gegebenen Startwerten können also über die Integrale  $I_n$  und  $J_n$  die Nullstellen schrittweise angenähert und bei einer bestimmten Genauigkeit die Iteration abgebrochen werden.

### B.4.1. Integrale

Die Integrale  $I_n$  können durch

$$\begin{aligned} I_n &= \int dk k^{2(n+1)} f_k \\ &= \int dk k^{2(n+1)} [\exp(\beta' k^2 - \mu') - 1]^{-1} \\ &= \int dk k^{2(n+1)} \frac{\exp(-\beta' k^2)}{\exp(-\mu') - \exp(-\beta' k^2)} \\ &= \frac{1}{2\beta'^{n+3/2}} \int dx x^{n+1/2} e^{-x} \frac{1}{z^{-1} - e^{-x}} \end{aligned}$$

mit der Substitution  $x = \beta' k^2$  und  $z = e^{\mu'}$  umgeformt werden. Durch analoges Vorgehen ergibt sich für  $J_n$

$$\begin{aligned} J_n &= \int dk k^{2(n+1)} f_k (1 + f_k) \\ &= \int dk k^{2(n+1)} \frac{\exp(-\beta' k^2)}{\exp(-\mu') - \exp(-\beta' k^2)} \frac{\exp(-\mu')}{\exp(-\mu') - \exp(-\beta' k^2)} \\ &= \frac{1}{2z\beta'^{n+3/2}} \int dx x^{n+1/2} e^{-x} \left( \frac{1}{z^{-1} - e^{-x}} \right)^2. \end{aligned}$$

Somit entsprechen sowohl  $I_n$  als auch  $J_n$  der Form  $\int_0^\infty dx x^\alpha e^{-x} f(x)$  mit  $\alpha = n + 1/2$ . Solche Integrale können wiederum mittels Gauß-Laguerre-Stützstellen numerisch berechnet werden.

### B.4.2. Startwerte

Bei mehrdimensionalen Nullstellensuchen ist die Wahl der Startwerte von großer Bedeutung. Eine physikalisch sinnvolle Möglichkeit besteht darin, die entsprechenden Werte der Boltzmannverteilung zu berechnen und diese als Startwerte zu verwenden. In diesem Fall ist die Verteilung durch  $f_B(k) = \exp(-\beta' k^2 + \mu')$  gegeben und alle Integrale sind analytisch auswertbar:

$$\begin{aligned} \tilde{n} &= \frac{e^{\mu'}}{2\pi^2} \int dk k^2 e^{-\beta' k^2} = \frac{e^{\mu'}}{8} (\pi\beta')^{-3/2}, \\ \tilde{\epsilon} &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{e^{\mu'}}{2\pi^2} \int dk k^4 e^{-\beta' k^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{16\pi^{3/2}} \frac{e^{\mu'}}{\beta'^{5/2}}. \end{aligned}$$

Somit lassen sich  $\mu'$  und  $\beta'$  explizit berechnen. Das Umstellen obiger Gleichungen ergibt

$$\begin{aligned}\beta'_0 &= \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \tilde{n}}{2m \tilde{\epsilon}}, \\ \mu'_0 &= \ln \left[ \tilde{n} \left( \frac{3\pi \hbar^2 \tilde{n}}{m \tilde{\epsilon}} \right)^{3/2} \right]\end{aligned}$$

und somit die gesuchten Startwerte, wobei  $\mu'_0 \leq 0$  zu beachten ist. Aufgrund der Eigenschaften des Newton-Verfahrens ist die Verwendung einer Iterationsbremse sinnvoll. Mittels der hier dargelegten Überlegungen wurde ein Algorithmus zur Lösung des Inversionsproblems implementiert.

## B.5. *fit*-Formel für das Spektrum

Zur Entwicklung einer *fit*-Formel für das Spektrum wird davon ausgegangen, dass sich die Exzitonen im thermodynamischen Gleichgewicht befinden und es kein Kondensat im System gibt. Unter diesen Voraussetzungen gilt

$$I(\omega, \mathbf{r}) \sim n_B(\hbar\omega - \mu) \delta(\hbar\omega - \mu - E(k_0, \mathbf{r})), \quad (\text{B.25})$$

wobei die Energie  $E(k_0, \mathbf{r})$  durch  $E(k_0, \mathbf{r}) = \hbar^2 k_0^2 / 2m + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r})$  gegeben ist. Um eine möglichst einfache Formel zu erhalten, müssen einige Näherungen gemacht werden. Es wird angenommen, dass das externe Potential durch  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = V_0 + \alpha_z z^2 + \alpha_\rho \rho^2$  beschrieben werden kann und dass der Einfluss der Wechselwirkung durch eine ortsunabhängige Konstante  $C_{\text{XX}} \approx 2g\tilde{n}(\mathbf{r})$  zusammengefasst werden kann. Somit lautet die Energierelation

$$\begin{aligned}E(k_0, \mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g\tilde{n}(\mathbf{r}) - \mu \\ &\approx \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + C_X + \alpha_z z^2 + \alpha_\rho \rho^2 + V_0 - \mu \\ &\approx \Delta E + \alpha_z z^2 + \alpha_\rho \rho^2 - \mu.\end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Demnach ergibt sich

$$\begin{aligned}I_{\text{fit}}(\omega) &= \int d\mathbf{r} n_B(\hbar\omega - \mu) \delta(\hbar\omega - \mu - E(k_0, \mathbf{r})) \\ &= n_B(\hbar\omega - \mu) \int d\mathbf{r} \delta(\hbar\omega - \Delta E - \alpha_z z^2 - \alpha_\rho \rho^2) \\ &= n_B(\hbar\omega - \mu) \int_{-\Delta x}^{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz \delta(E' - \alpha_z z^2 - \alpha_\rho \rho^2) \\ &= \frac{n_B(\hbar\omega - \mu)}{\sqrt{\alpha_z}} \int_{-\Delta x}^{\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy (E' - \alpha_\rho [x^2 + y^2])^{-1/2} \Theta(E' - \alpha_\rho [x^2 + y^2])\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2n_B(\hbar\omega - \mu)}{\sqrt{\alpha_z\alpha_\rho}} \int_{-\Delta x}^{\Delta x} \int_0^{y_{max}} dx dy (y_{max}^2 - y^2)^{-1/2} \\
&= \frac{\pi n_B(\hbar\omega - \mu)}{\sqrt{\alpha_z\alpha_\rho}} \int_{-\Delta x}^{\Delta x} dx \Theta(E' - \alpha_\rho x^2) \\
&= \frac{2\pi n_B(\hbar\omega - \mu)}{\sqrt{\alpha_z\alpha_\rho}} \Theta(\hbar\omega - \Delta E) \begin{cases} \sqrt{\frac{\hbar\omega - \Delta E}{\alpha_\rho}} & \text{für } \sqrt{\frac{\hbar\omega - \Delta E}{\alpha_\rho}} < \Delta x \\ \Delta x & \text{sonst.} \end{cases}
\end{aligned}$$

Da der Proportionalitätsfaktor des Spektrums unbekannt ist, wird folgendes Modell zur Anpassung der Spektren benutzt:

$$I_{\text{fit}}(\omega) \sim I_0 n_B(\hbar\omega - \mu) \Theta(\hbar\omega - \Delta E) \begin{cases} \sqrt{\frac{\hbar\omega - \Delta E}{\alpha_\rho}} & \text{für } \sqrt{\frac{\hbar\omega - \Delta E}{\alpha_\rho}} < \Delta x \\ \Delta x & \text{sonst} \end{cases} + I_U. \quad (\text{B.27})$$

Hierbei ist zu beachten, dass  $\Delta x$  und  $\alpha_\rho$  vorzugebende Parameter sind. Im Gegensatz dazu sind die Temperatur  $T$ , das chemische Potential  $\mu$ , die energetische Verschiebung  $\Delta E$ , die Konstante  $I_0$  und die Untergrundkorrektur  $I_U$  freie Parameter, welche es anzupassen gilt. Die *fit*-Formel aus Gleichung (B.27) muss noch mit der effektiven spektralen Auflösung  $\Delta$  gefaltet werden, was zum Auftreten eines weiteren *fit*-Parameters führt.

Da das chemische Potential im wesentlichen Einfluss auf die absolute Höhe des Spektrums hat, hat der Vorfaktor  $I_0$  eine ähnliche Wirkung. Um beide Effekte sauber voneinander zu trennen, muss der Vorfaktor geeicht werden. Hierzu wird zur ersten Messung einer Messreihe zunächst über das Ratenmodell die Exzitonzahl ermittelt und anschließend das chemische Potential zur gegebenen Temperatur theoretisch berechnet. Mit diesem chemischen Potential wird dann der Vorfaktor  $I_0$  geeicht. Für alle späteren Spektren der Messreihe wird dieser dann konstant gehalten. Für die  $z$ -aufgelöste Lumineszenz  $I(z)$  verläuft die Rechnung analog.





# Literaturverzeichnis

- [1] EINSTEIN, A.: In: *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., Phys. Math. Kl.* 3 (1925)
- [2] NOLTING, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*. Springer Berlin Heidelberg, 2007
- [3] ANDERSON, M. H. ; ENSHER, J. R. ; MATTHEWS, M. R. ; WIEMAN, C. E. ; CORNELL, E. A.: Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. In: *Science* 269 (1995), S. 198–201. <http://dx.doi.org/10.1126/science.269.5221.198>. – DOI 10.1126/science.269.5221.198
- [4] DAVIS, K. B. ; MEWES, M. O. ; ANDREWS, M. R. ; DRUTEN, N. J. ; DURFEE, D. S. ; KURN, D. M. ; KETTERLE, W.: Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. In: *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995), Nov, 3969–3973. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.3969>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.75.3969
- [5] ZWIERLEIN, M. W. ; STAN, C. A. ; SCHUNCK, C. H. ; RAUPACH, S. M. F. ; GUPTA, S. ; HADZIBABIC, Z. ; KETTERLE, W.: Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules. In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), Dec, Nr. 25, S. 250401. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.250401>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.91.250401
- [6] DEMOKRITOV, S. O. ; DEMIDOV, V. E. ; DZYAPKO, O. ; MELKOV, G. A. ; SERGA, A. A. ; HILLEBRANDS, B. ; SLAVIN, A. N.: Bose-Einstein condensation of quasi-equilibrium magnons at room temperature under pumping. In: *Nature* 443 (2006), S. 430–433. <http://dx.doi.org/10.1038/nature05117>. – DOI 10.1038/nature05117
- [7] MOSKALENKO, S. A.: In: *Fiz. Tverd. Tela* 4 (1962), 276 S.
- [8] BLATT, John M. ; BÖER, K. W. ; BRANDT, Werner: Bose-Einstein Condensation of Excitons. In: *Phys. Rev.* 126 (1962), Jun, Nr. 5, S. 1691–1692. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.126.1691>. – DOI 10.1103/PhysRev.126.1691
- [9] CASELLA, R. C.: Excitons in InP at High Excitation Levels. In: *J. Appl. Phys.* 36 (1965), S. 2485. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1714516>. – DOI 10.1063/1.1714516
- [10] DENG, Hui ; HAUG, Hartmut ; YAMAMOTO, Yoshihisa: Exciton-polariton Bose-Einstein condensation. In: *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010), May, 1489–1537. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3211111>.

- 1103/RevModPhys.82.1489. – DOI 10.1103/RevModPhys.82.1489
- [11] KURODA, H. ; SHIONOYA, S. ; SAITO, H. ; HANAMURA, E.: Observation of the Bose condensation of excitonic molecules in CdSe. In: *Solid State Communications* 12 (1973), S. 533–539
- [12] GOTO, T. ; ANZAI, T. ; UETA, M.: The Possibility of the Bose Condensation of Excitons in CuCl. In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 35 (1973), S. 940
- [13] NAGASAWA, N. ; NAKATA, N. ; DOI, Y. ; UETA, M.: The Bose Condensation of Excitonic Molecules in CuCl Crystals. In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 38 (1975), S. 593
- [14] NAGASAWA, N. ; NAKATA, N. ; DOI, Y. ; UETA, M.: Generation of Excitonic Molecules by Giant Two-Photon Absorption in CuCl and Their Bose Condensation. In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 39 (1975), S. 987–993
- [15] MYSYROWICZ, A. ; HULIN, D. ; ANTONETTI, A.: Long Exciton Lifetime in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. Lett.* 43 (1979), Oct, Nr. 15, S. 1123–1126. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.43.1123>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.43.1123
- [16] FORTIN, E. ; FAFARD, S. ; MYSYROWICZ, André: Exciton transport in Cu<sub>2</sub>O: Evidence for excitonic superfluidity? In: *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993), Jun, 3951–3954. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.3951>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.70.3951
- [17] SNOKE, D. ; WOLFE, J. P. ; MYSYROWICZ, A.: Quantum saturation of a Bose gas: Excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987), Aug, 827–830. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.827>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.59.827
- [18] SNOKE, D.: Spontaneous Bose Coherence of Excitons and Polaritons. In: *Science* 298 (2002), S. 1368–1372. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1078082>. – DOI 10.1126/science.1078082
- [19] TRAUERNICHT, D. P. ; WOLFE, J. P. ; MYSYROWICZ, A.: Thermodynamics of strain-confined paraexcitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. B* 34 (1986), Aug, Nr. 4, S. 2561–2575. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.34.2561>. – DOI 10.1103/PhysRevB.34.2561
- [20] SNOKE, D. W. ; WOLFE, J. P. ; MYSYROWICZ, A.: Evidence for Bose-Einstein condensation of a two-component exciton gas. In: *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990), May, 2543–2546. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.2543>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.64.2543
- [21] LIN, Jia L. ; WOLFE, J. P.: Bose-Einstein condensation of paraexcitons in stressed Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993), Aug, 1222–1225. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.1222>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.71.1222
- [22] SNOKE, D. W. ; NEGOITA, V.: Pushing the Auger limit: Kinetics of excitons in traps in Cu<sub>2</sub>O.

- In: *Phys. Rev. B* 61 (2000), Jan, 2904–2910. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.2904>. – DOI 10.1103/PhysRevB.61.2904
- [23] YOSHIOKA, Kosuke ; CHAE, Eunmi ; KUWATA-GONOKAMI, Makoto: Transition to a Bose–Einstein condensate and relaxation explosion of excitons at sub-Kelvin temperatures. In: *Nature Communications* 2 (2011), S. 328. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms1335>. – DOI 10.1038/ncomms1335
- [24] SNOKE, D. W.: When should we say we have observed Bose condensation of excitons? In: *Phys. Status Solidi B* 238 (2003), S. 389–396. <http://dx.doi.org/10.1002/pssb.200303151>. – DOI 10.1002/pssb.200303151
- [25] SCHWARTZ, Rico ; NAKA, Nobuko ; KIESELING, Frank ; STOLZ, Heinrich: Dynamics of excitons in a potential trap at ultra-low temperatures: paraexcitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *New J. Phys.* 14 (2012), S. 023054. <http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/2/023054>. – DOI 10.1088/1367-2630/14/2/023054
- [26] STOLZ, Heinrich ; SCHWARTZ, Rico ; KIESELING, Frank ; SOM, Sunipa ; KAUPSCH, Maria ; SOBKOWIAK, Siegfried ; SEMKAT, Dirk ; NAKA, Nobuko ; KOCH, Thomas ; FEHSKE, Holger: Condensation of excitons in Cu<sub>2</sub>O at ultracold temperatures: experiment and theory. In: *New J. Phys.* 14 (2012), S. 105007. <http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/10/105007>. – DOI 10.1088/1367-2630/14/10/105007
- [27] SEMKAT, D. ; SOBKOWIAK, S. ; MANZKE, G. ; STOLZ, H.: Comment on “Condensation of Excitons in a Trap”. In: *Nano Lett.* 12 (2012), S. 5055–5057
- [28] SANDFORT, C.: *Acoustic and optical phonon scattering of the yellow 1S excitons in Cu<sub>2</sub>O: A high resolution spectroscopy study*, Technische Universität Dortmund, Diss., 2010
- [29] MADELUNG, O.: *Semiconductors: Data Handbook*. Springer Verlag, 2004
- [30] KAVOULAKIS, G. M. ; CHANG, Yia-Chung ; BAYM, Gordon: Fine structure of excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. B* 55 (1997), Mar, Nr. 12, S. 7593–7599. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.55.7593>. – DOI 10.1103/PhysRevB.55.7593
- [31] FRENCH, M. ; SCHWARTZ, R. ; STOLZ, H. ; REDMER, R.: Electronic band structure of Cu<sub>2</sub>O by spin density functional theory. In: *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009), S. 015502
- [32] FRÖHLICH, D. ; DASBACH, G. ; HÖGERSTHAL, G. Baldassarri Höger v. ; BAYER, M. ; KLIEBER, R. ; SUTER, D. ; STOLZ, H.: High resolution spectroscopy of yellow 1S excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Solid State Communications* 134 (2005), S. 139–142
- [33] WATERS, R. G. ; POLLAK, Fred H. ; BRUCE, R. H. ; CUMMINS, H. Z.: Effects of uniaxial stress on excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. B* 21 (1980), Feb, 1665–1675. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.21.1665>. – DOI 10.1103/PhysRevB.21.1665

- [34] STOLZ, Heinrich ; SEMKAT, Dirk: Unique signatures for Bose-Einstein condensation in the decay luminescence lineshape of weakly interacting excitons in a potential trap. In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), Feb, Nr. 8, S. 081302. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.081302>. – DOI 10.1103/PhysRevB.81.081302
- [35] WOLFE, J. P. ; LIN, J. L. ; SNOKE, D. W. ; GRIFFIN, A. (Hrsg.) ; SNOKE, D.W. (Hrsg.) ; S.STRINGARI (Hrsg.): *Bose-Einstein Condensation*. Cambridge University Press, 1995
- [36] BRANDT, Jan ; FRÖHLICH, Dietmar ; SANDFORT, Christian ; BAYER, Manfred ; STOLZ, Heinrich ; NAKA, Nobuko: Ultranarrow Optical Absorption and Two-Phonon Excitation Spectroscopy of Cu<sub>2</sub>O Paraexcitons in a High Magnetic Field. In: *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007), Nov, Nr. 21, S. 217403. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.217403>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.99.217403
- [37] FRÖHLICH, D. ; KULIK, A. ; UEBBING, B. ; MYSYROWICZ, A. ; LANGER, V. ; STOLZ, H. ; OSTEN, W. von d.: Coherent propagation and quantum beats of quadrupole polaritons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991), Oct, 2343–2346. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.67.2343>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.67.2343
- [38] ALVERMANN, A. ; LITTLEWOOD, P. B. ; FEHSKE, H.: Variational discrete variable representation for excitons on a lattice. In: *Phys. Rev. B* 84 (2011), Jul, 035126. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.84.035126>. – DOI 10.1103/PhysRevB.84.035126
- [39] SEMKAT, D. ; RICHTER, F. ; KREMP, D. ; MANZKE, G. ; KRAEFT, W.-D. ; HENNEBERGER, K.: Ionization equilibrium in an excited semiconductor: Mott transition versus Bose-Einstein condensation. In: *Phys. Rev. B* 80 (2009), Oct, Nr. 15, S. 155201. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.80.155201>. – DOI 10.1103/PhysRevB.80.155201
- [40] MANZKE, G. ; SEMKAT, D. ; RICHTER, F. ; KREMP, D. ; HENNEBERGER, K.: Mott transition versus Bose-Einstein condensation of excitons. In: *J. Phys.: Conf. Ser.* 210 (2010), S. 012020
- [41] SHEBOUL, M. I. ; EKARDT, W: Theory of Biexcitons Using the Boson Formalism: The Ground State Binding Energy. In: *Phys. Status Solidi B* 73 (1976), S. 165
- [42] CIUTI, C. ; SAVONA, V. ; PIERMAROCCHI, C. ; QUATTROPANI, A. ; SCHWENDIMANN, P.: Role of the exchange of carriers in elastic exciton-exciton scattering in quantum wells. In: *Phys. Rev. B* 58 (1998), S. 7926
- [43] SHUMWAY, J. ; CEPERLEY, D. M.: Quantum Monte Carlo treatment of elastic exciton-exciton scattering. In: *Phys. Rev. B* 63 (2001), Apr, Nr. 16, S. 165209. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.63.165209>. – DOI 10.1103/PhysRevB.63.165209
- [44] OKUMURA, Satoru ; OGAWA, Tetsuo: Boson representation of two-exciton correlations:

- An exact treatment of composite-particle effects. In: *Phys. Rev. B* 65 (2001), Dec, Nr. 3, S. 035105. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.035105>. – DOI 10.1103/PhysRevB.65.035105
- [45] SCHINDLER, Ch. ; ZIMMERMANN, R.: Analysis of the exciton-exciton interaction in semiconductor quantum wells. In: *Phys. Rev. B* 78 (2008), S. 045313
- [46] COMBESCOT, M. ; BETBEDER-MATIBET, O. ; DUBIN, F.: The many-body physics of composite bosons. In: *Phys. Rep.* 463 (2008), S. 215
- [47] MARKIEWICZ, R. S. ; WOLFE, J. P. ; JEFFRIES, C. D.: Strain-confined electron-hole liquid in germanium. In: *Phys. Rev. B* 15 (1977), Feb, 1988–2005. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.15.1988>. – DOI 10.1103/PhysRevB.15.1988
- [48] NAKA, N. ; NAGASAWA, N.: Two-photon diagnostics of stress-induced exciton traps and loading of 1s-yellow excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), Jan, 075209. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.075209>. – DOI 10.1103/PhysRevB.65.075209
- [49] SCHWARTZ, R.: *persönliche Mitteilung*
- [50] BRANDT, J.: *Interactions of 1S Excitons in Cu<sub>2</sub>O: A High Resolution Spectroscopy Study*, Technische Universität Dortmund, Diss., 2010
- [51] YOSHIOKA, Kosuke ; MORITA, Yusuke ; FUKUOKA, Kenta ; KUWATA-GONOKAMI, Makoto: Generation of ultracold paraexcitons in cuprous oxide: A path toward a stable Bose-Einstein condensate. In: *Phys. Rev. B* 88 (2013), Jul, 041201. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.041201>. – DOI 10.1103/PhysRevB.88.041201
- [52] SOBKOWIAK, S. ; SEMKAT, D. ; STOLZ, H.: Modeling of the thermalization of trapped paraexcitons in Cu<sub>2</sub>O at ultralow temperatures. In: *Phys. Rev. B* 90 (2014), Aug, 075206. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.075206>. – DOI 10.1103/PhysRevB.90.075206
- [53] HULIN, D. ; MYSYROWICZ, A. ; GUILLAUME, C. B. I.: Evidence for Bose-Einstein Statistics in an Exciton Gas. In: *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980), Dec, 1970–1973. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.1970>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.45.1970
- [54] O'HARA, K. E. ; GULLINGSRUD, J. R. ; WOLFE, J. P.: Auger decay of excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. B* 60 (1999), Oct, 10872–10885. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.60.10872>. – DOI 10.1103/PhysRevB.60.10872
- [55] WARREN, J. T. ; O'HARA, K. E. ; WOLFE, J. P.: Two-body decay of thermalized excitons in Cu<sub>2</sub>O. In: *Phys. Rev. B* 61 (2000), Mar, 8215–8223. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.8215>. – DOI 10.1103/PhysRevB.61.8215

- [56] YOSHIOKA, Kosuke ; IDEGUCHI, Takuro ; MYSYROWICZ, André ; KUWATA-GONOKAMI, Makoto: Quantum inelastic collisions between paraexcitons in  $\text{Cu}_2\text{O}$ . In: *Phys. Rev. B* 82 (2010), Jul, 041201. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.041201>. – DOI 10.1103/PhysRevB.82.041201
- [57] JANG, J. I. ; WOLFE, J. P.: Exciton decay in  $\text{Cu}_2\text{O}$  at high density and low temperature: Auger recombination, spin-flip scattering, and molecule formation. In: *Solid State Communications* 137 (2006), S. 91–96. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2005.10.001>. – DOI 10.1016/j.ssc.2005.10.001
- [58] KAVOULAKIS, G. M. ; BAYM, G.: Auger decay of degenerate and Bose-condensed excitons in  $\text{Cu}_2\text{O}$ . In: *Phys. Rev. B* 54 (1996), Dec, 16625–16636. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.16625>. – DOI 10.1103/PhysRevB.54.16625
- [59] KAVOULAKIS, G. M. ; BAYM, G. ; WOLFE, J. P.: Quantum saturation and condensation of excitons in  $\text{Cu}_2\text{O}$ : A theoretical study. In: *Phys. Rev. B* 53 (1996), Mar, 7227–7243. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.7227>. – DOI 10.1103/PhysRevB.53.7227
- [60] WOLFE, J. P. ; JANG, J. I.: New perspectives on kinetics of excitons in  $\text{Cu}_2\text{O}$ . In: *Solid State Communications* 134 (2005), S. 143–149
- [61] JANG, J. I. ; WOLFE, J. P.: Auger recombination and biexcitons in  $\text{Cu}_2\text{O}$ : A case for dark excitonic matter. In: *Phys. Rev. B* 74 (2006), Jul, 045211. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.74.045211>. – DOI 10.1103/PhysRevB.74.045211
- [62] SOBKOWIAK, S. ; SEMKAT, D. ; STOLZ, H. ; KOCH, Th. ; FEHSKE, H.: Interacting multicomponent exciton gases in a potential trap: Phase separation and Bose-Einstein condensation. In: *Phys. Rev. B* 82 (2010), Aug, 064505. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.064505>. – DOI 10.1103/PhysRevB.82.064505
- [63] SOBKOWIAK, S. ; SEMKAT, D. ; STOLZ, H. ; KOCH, Th. ; FEHSKE, H.: Phase separation of multicomponent excitonic Bose-Einstein condensates. In: *Phys. Status Solidi C* 8 (2011), S. 1178–1181. <http://dx.doi.org/10.1002/pssc.201000839>. – DOI 10.1002/pssc.201000839
- [64] PROUKAKIS, N. P. ; JACKSON, B.: Finite-temperature models of Bose-Einstein condensation. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 41 (2008), S. 1–66
- [65] PETHICK, C. J. ; SMITH, H.: *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002
- [66] REIDL, Jürgen ; CSORDÁS, András ; GRAHAM, Robert ; SZÉPFALUSY, Péter: Finite-temperature excitations of Bose gases in anisotropic traps. In: *Phys. Rev. A* 59 (1999), May, Nr. 5, S. 3816–3822. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.59.3816>. – DOI

10.1103/PhysRevA.59.3816

- [67] GRIFFIN, A.: Conserving and gapless approximations for an inhomogeneous Bose gas at finite temperatures. In: *Phys. Rev. B* 53 (1996), Apr, Nr. 14, S. 9341–9347. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.9341>. – DOI 10.1103/PhysRevB.53.9341
- [68] BERGEMAN, T. ; FEDER, D. L. ; BALAZS, N. L. ; SCHNEIDER, B. I.: Bose condensates in a harmonic trap near the critical temperature. In: *Phys. Rev. A* 61 (2000), May, Nr. 6, S. 063605. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.61.063605>. – DOI 10.1103/PhysRevA.61.063605
- [69] DALFOVO, F. ; GIORGINI, S. ; PITAEVSKII, L. P. ; STRINGARI, S.: Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. In: *Reviews of Modern Physics* 71 (1999), S. 463–512
- [70] PARKINS, A. S. ; WALLS, D. F.: The physics of trapped dilute-gas Bose-Einstein condensates. In: *Physics Reports* 303 (1998), S. 1–80
- [71] SNOKE, D. W. ; BRAUN, D. ; CARDONA, M.: Carrier thermalization in Cu<sub>2</sub>O: Phonon emission by excitons. In: *Phys. Rev. B* 44 (1991), Aug, 2991–3000. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.44.2991>. – DOI 10.1103/PhysRevB.44.2991
- [72] SHI, H. ; VERECHAKA, G. ; GRIFFIN, A.: Theory of the decay luminescence spectrum of a Bose-condensed interacting exciton gas. In: *Phys. Rev. B* 50 (1994), Jul, Nr. 2, S. 1119–1125. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.50.1119>. – DOI 10.1103/PhysRevB.50.1119
- [73] FETTER, A. L. ; WALECKA, J. D.: *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971
- [74] GRIFFIN, A. ; NIKUNI, T. ; ZAREMBA, E.: *Bose-Condensed Gases at Finite Temperatures*. Cambridge University Press, 2009
- [75] STOLZ, H.: *persönliche Mitteilung*
- [76] NAKA, N.: Exciton-exciton scattering studied by time-resolved cyclotron resonance. In: *CERF*, 2011
- [77] MANZKE, G.: *persönliche Mitteilung*
- [78] PRESS, W. H. ; TEUKOLSKY, S. A. ; VETTERLING, W. T. ; FLANNERY, B. P.: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1999
- [79] SNOKE, D. W. ; WOLFE, J. P.: Population dynamics of a Bose gas near saturation. In: *Phys. Rev. B* 39 (1989), Mar, 4030–4037. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.39.4030>. – DOI 10.1103/PhysRevB.39.4030

- [80] SNOKE, D. W. ; RÜHLE, W. W. ; LU, Y.-C. ; BAUSER, E.: Evolution of a nonthermal electron energy distribution in GaAs. In: *Phys. Rev. B* 45 (1992), May, 10979–10989. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.45.10979>. – DOI 10.1103/PhysRevB.45.10979
- [81] IVANOV, A. L. ; ELL, C. ; HAUG, H.: Phonon-assisted Boltzmann kinetics of a Bose gas: Generic solution for  $T \leq T_c$ . In: *Phys. Rev. E* 55 (1997), Jun, 6363–6369. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.55.6363>. – DOI 10.1103/PhysRevE.55.6363
- [82] O'HARA, K. E. ; WOLFE, J. P.: Relaxation kinetics of excitons in cuprous oxide. In: *Phys. Rev. B* 62 (2000), Nov, Nr. 19, S. 12909–12922. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.62.12909>. – DOI 10.1103/PhysRevB.62.12909
- [83] ZAREMBA, E. ; NIKUNI, T. ; GRIFFIN, A.: Dynamics of Trapped Bose Gases at Finite Temperatures. In: *J. Low Temp. Phys.* 116 (1999), S. 277–345
- [84] KIRKPATRICK, T. R. ; DORFMAN, J. R.: Transport theory for a weakly interacting condensed Bose gas. In: *Phys. Rev. A* 28 (1983), Oct, 2576–2579. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.28.2576>. – DOI 10.1103/PhysRevA.28.2576
- [85] KIRKPATRICK, T. R. ; DORFMAN, J. R.: Transport in a dilute but condensed nonideal Bose gas: Kinetic equations. In: *J. Low Temp. Phys.* 58 (1985), S. 301–331
- [86] KIRKPATRICK, T. R. ; DORFMAN, J. R.: Transport coefficients in a dilute but condensed Bose gas. In: *J. Low Temp. Phys.* 58 (1985), S. 399–415
- [87] PROUKAKIS, N. P. ; K., Burnett: Generalized Mean Field for Trapped Atomic Bose-Einstein Condensates. In: *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* 101 (1996), S. 457
- [88] PROUKAKIS, N. P. ; BURNETT, K. ; STOOFF, H. T. C.: Microscopic treatment of binary interactions in the nonequilibrium dynamics of partially Bose-condensed trapped gases. In: *Phys. Rev. A* 57 (1998), Feb, 1230–1247. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.57.1230>. – DOI 10.1103/PhysRevA.57.1230
- [89] MADELUNG, E.: Quantentheorie in hydrodynamischer Form. In: *Zeitschrift für Physik* 40 (1927), S. 322–326
- [90] BOHM, David: A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I. In: *Phys. Rev.* 85 (1952), Jan, 166–179. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.85.166>. – DOI 10.1103/PhysRev.85.166
- [91] BOHM, David: A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. II. In: *Phys. Rev.* 85 (1952), Jan, 180–193. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.85.180>. – DOI 10.1103/PhysRev.85.180
- [92] KADANOFF, L. P. ; BAYM, G.: *Quantum Statistical Mechanics*. W. A. Benjamin, Inc., Menlo

Park, California, 1962

- [93] GIORGINI, S. ; PITAEVSKII, L. P. ; STRINGARI, S.: Thermodynamics of a trapped Bose-condensed gas. In: *J. Low Temp. Phys.* 109 (1997), S. 309–355
- [94] TORO, Eleuterio F.: *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997
- [95] LEVEQUE, Randall J.: *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002
- [96] HAUG, H. ; DOAN, T. D. ; TRAN THOAI, D. B.: Quantum kinetic derivation of the nonequilibrium Gross-Pitaevskii equation for nonresonant excitation of microcavity polaritons. In: *Phys. Rev. B* 89 (2014), Apr, 155302. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.155302>. – DOI 10.1103/PhysRevB.89.155302
- [97] KREMP, D. ; SCHLANGES, M. ; KRAEFT, W. D.: *Quantum Statistics of Nonideal Plasmas*. Springer Berlin Heidelberg, 2005



## Danksagung

An dieser Stelle soll allen gedankt werden, die zum Entstehen dieser Dissertation beigetragen haben. Besonderer Dank gilt dabei Prof. H. Stolz der durch das zur Verfügung stellen dieses hoch interessanten Themas und die hervorragende Betreuung diese Arbeit erst möglich gemacht hat. Aber auch Dirk Semkat, Günter Manzke, Wolf-Dietrich Kraeft, Thomas Bornath, Thomas Koch und Prof. H. Fehske gebührt Dank für die vielen Anregungen, Diskussionen und konstruktive Kritik. Weiterhin möchte ich allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Halbleiteroptik danken. Insbesondere Rico Schwartz und Maria Kaupsch, welche die experimentellen Arbeiten durchgeführt haben. Mein Dank gebührt ebenfalls Philipp Sperling für seine Hilfe bei der numerischen Lösung der hydrodynamischen Gleichungen.

Abschließend möchte ich meiner Freundin und meiner Familie danken, die mich auf meinem Weg stets unterstützt und ermutigt haben. Weiterhin danke ich allen meinen Freunden für die vielen Abende der Erholung und des Ausgleichs.