

Mikroskopische Theorie der Spinrelaxation und Spindphasierung in Halbleiter-Quantenstrukturen



Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
der Naturwissenschaftlichen Fakultät II - Physik
der Universität Regensburg

vorgelegt von
Christian Lechner
aus Tegernsee
September 2005



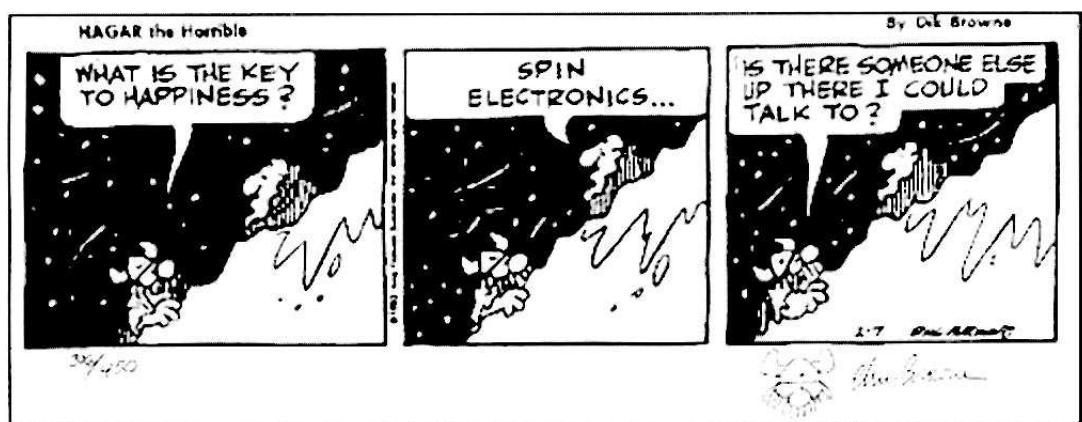
Die Arbeit wurde von Prof. Dr. Ulrich Rößler angeleitet.

Das Promotionsgesuch wurde am 06. September 2005 eingereicht.
Das Promotionskolloquium fand am 07. November 2005 statt.

Prüfungsausschuß:

Vorsitzender:	Prof. Dr. Christian Schüller
1. Gutachter:	Prof. Dr. Ulrich Rößler
2. Gutachter:	Prof. Dr. Milena Grifoni
Weiterer Prüfer:	Prof. Dr. Tilo Wettig

Meinem Großvater



INHALTSVERZEICHNIS

Einleitung und Motivation	1
1 Physikalische Grundlagen	5
1.1 Halbleiter-Quantenstrukturen	5
1.2 Experimentelle Methoden zur Untersuchung der Spindynamik	14
1.3 Das Konzept der Bloch-Gleichungen	16
1.4 Spinrelaxationsmechanismen in Halbleiter-Quantenstrukturen	22
1.4.1 Der Elliott-Yafet-Mechanismus	22
1.4.2 Der D'yakonov-Perel'-Mechanismus	23
1.4.3 Der Bir-Aronov-Pikus-Mechanismus	26
2 Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen	29
2.1 Die kohärente Spindynamik im Dichtematrixformalismus	29
2.1.1 Darstellung in der Spin-up/down Basis	29
2.1.2 Darstellung in der Eigenbasis	31
2.2 Spinrelaxation und -dephasierung im Dichtematrixformalismus	34
2.2.1 Die optische Orientierung	34
2.2.2 Die Erweiterung der optischen Bloch-Gleichungen: Ladungsträger-Phonon-Streuung	36
2.2.3 Die Erweiterung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen: Coulomb-Streuung	47
2.2.4 Ladungsträger-Störstellen-Streuung	60
2.3 Vergleich mit den Observablen des Experiments	64

3 Simulation der Spindynamik	69
3.1 Motivation	69
3.2 Die Modellsysteme	70
3.3 Die Bewegungsgleichungen der Spindichtematrix	72
3.4 Die Ergebnisse der Simulation	74
3.4.1 Spindynamik durch Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung	75
3.4.2 Spindynamik durch Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung .	83
3.4.3 Vergleich mit anderen mikroskopischen Theorien	90
Zusammenfassung und Ausblick	93
A Irreversible Dephasierung im Dichtematrixformalismus	97
B Elektron-Phonon-Streuung	99
C Coulomb-Streuung	105
D Elektron-Störstellen-Streuung	117
E Berechnung der Streuintegrale für die numerische Simulation	121
Literaturverzeichnis	123
Publikationsliste	135
Danksagung	137

EINLEITUNG UND MOTIVATION

„This looks like a fundamental limit.“

P. Gargini

Director of Technology Strategy, Intel
IEEE 2003

Mit diesen Worten kommentierte P. Gargini das im Rahmen der IEEE 2003 von Intel veröffentlichte Dokument, das anhand von realistischen Modellen die Grenzen der fortschreitenden Miniaturisierung von Halbleiterbauelementen bei gleichzeitig zunehmender Leistungsfähigkeit aufzeigt [136].

Die beiden größten Probleme der verwendeten CMOS Technologie sind die Leckströme und die extreme Wärmeentwicklung der Bauteile. Die Leckströme haben ihren Ursprung in der Verringerung der Gateschichtdicke in den Transistoren, was Tunnelprozesse ermöglicht. Da die Funktion der Bauelemente auf einem vorhandenen oder nicht vorhandenen Stromfluss basiert, der die logischen Zustände „1“ und „0“ darstellt, führen die Tunnelprozesse von Ladungsträgern durch die Gateschicht zu einem Informationsverlust. Das zweite Problem ist die Erzeugung von Ohmscher Wärme in den Bauelementen, die durch die hohen Schaltfrequenzen hervorgerufen wird. Extrapoliert man die momentane Entwicklung entsprechend des Moorschen Gesetzes für Leistungsaufnahme („Moorsches Korollar“), so ergibt sich in den kommenden Generationen von integrierten Bauelementen eine Leistungsdichte, die der eines nuklearen Reaktors entspricht. Beide Punkte werden in Ref. [136] mit der Schlussfolgerung diskutiert, dass die Probleme von Halbleiterbauelementen von fundamentaler Natur sind und auch durch den Einsatz anderer Materialien, wie z. B. Karbon-Nanoröhrchen, nicht überwunden werden können.

Ein möglicher Ausweg aus dieser Sackgasse stellt das Gebiet der *Spintronik* dar [126]. In diesem seit einigen Jahren aktiven Forschungsgebiet wird im Unterschied zur herkömmlichen CMOS Technologie nicht nur die Ladung der Teilchen als Informationsträger verwendet, sondern explizit vom Spin der Ladungsträger Gebrauch gemacht.

Historisch gesehen hat das Feld der Spintronik seinen Ursprung in der Entdeckung

des Riesenmagnetowiderstands (GMR, *giant magneto resistance*) [11, 92]. Dieser Effekt beschreibt die starke Abhangigkeit des elektrischen Widerstands einer aus ferro- und nichtferromagnetischen Lagen bestehenden Schichtstruktur von der Magnetisierung benachbarter Schichten. Der GMR wird inzwischen industriell in Lesekopfen von Computer-Festplatten eingesetzt und ermoglicht eine sehr hohe Speicherdichte.

Die eigentliche Geburtsstunde der Spintronik wurde mit der viel zitierten Veroffentlichung von Datta und Das ausgelost [25]. In dieser Arbeit fuhren die Autoren das Paradigma der Spintronik, den *Spintransistor*, ein.

Der Vorschlag beruht auf einem Feldeffekttransistor mit ferromagnetischen *source*- und *drain*-Kontakten. Uber den *source*-Kontakt wird ein spinpolarisierter Strom in den Halbleiter injiziert. Die *gate*-Elektrode wird zur Manipulation der Prazessionsfrequenz der Spins mittels eines elektrischen Feldes uber die Spin-Bahn-Kopplung verwendet. In Analogie zur Optik wird der *drain*-Kontakt als Analysator benutzt, da er nur Spins einer bestimmten Richtung passieren lsst. Die Groe des Stroms ist folglich uber die angelegte Spannung an der *gate*-Elektrode und die Spinrichtung im *drain*-Kontakt regelbar. Der Vorschlag enthalt das Charakteristikum von spintronischen Bauelementen, namlich die Nutzung des Spinfreiheitsgrads der Ladungstrager zusatzlich zur oder anstelle der Ladung. Die Manipulation des Spins wird durch die Kopplung des orbitalen Freiheitsgrads der Ladungstrager an den Spin mittels der Spin-Bahn-Wechselwirkung ermoglicht. Ein enormer Vorteil dieses Konzepts ist, dass die hochentwickelten Techniken der Halbleiterfertigung weiter verwendet werden konnen.

Das Gebiet der Spintronik kann in zwei wesentliche Bereiche aufgeteilt werden. Der erste Bereich orientiert sich an der ursprunglichen Idee, Halbleiterbauelemente unter Nutzung des Spinfreiheitsgrads zu erweitern bzw. zu verbessern. Dieses Gebiet wird gewohnlich als Spintronik bezeichnet und umfasst verschiedene Ideen fur neue Bauelemente wie die Spin-LED (LED = *light emitting diode*) oder die Spin-RTD (RTD = *resonant tunneling diode*). Ein Uberblick uber die einzelnen Vorschlage und Konzepte gibt z. B. Ref. [24]. Ein erster Erfolg in der experimentellen Umsetzung eines spintronischen Bauelements stellt der Spin-VCSEL (VCSEL = *vertical cavity surface emitting laser*) dar [100]. Im Spin-VCSEL wurde die Herabsetzung der Laserschwelle in einem industriellen VCSEL unter Verwendung des Spins der Elektronen realisiert. Das zweite Gebiet ist das sogenannte *Quanten-Computing*. Hier wird die Idee der Miniaturisierung der Bauelemente maximiert, indem quantenmechanische Objekte in Form von Zwei-Niveau-Systemen als binare Basiseinheit des Computers dienen. Zusatzlich erzielt man durch die Verwendung der Quantenmechanik in den Algorithmen einen exponentiellen Gewinn in der Rechengeschwindigkeit. Folglich waren exakt die Ziele erfillt, die die Chipindustrie zu erreichen sucht. Auch in diesem Bereich werden Elektronen im Festkorper als potentielle Kandidaten einer Realisierung gehandelt [106], da sich uber deren Spinfreiheitsgrad ein Zwei-Niveau-System realisieren lsst.

Das grundlegende Prinzip der Spintronik macht deutlich, dass die Machbarkeit der vorgestellten Ideen eine exakte Kenntnis der Spindynamik in den Bauelementen, sprich in Halbleiter-Quantenstrukturen, voraussetzt. Ein wichtiger Punkt ist dabei neben der Injektion von spinpolarisierten Ladungstragern, die noch ein groes

Problem darstellt [105], deren Erhaltung bzw. die Kenntnis der möglichen Zerfallsmechanismen und deren Zeitskalen. Für die bauelementorientierte Seite der Spindtronik spielt daher die Spinrelaxation, d. h. der Abbau der Spinpolarisation, die entscheidende Rolle, während im Bereich des Quanten-Computings die Spindphasierung, d. h. der Abbau der Spinkohärenz, von zentraler Bedeutung ist. Bisher wurde die Spinrelaxation und die Spindphasierung im Halbleiter hauptsächlich mit Hilfe von phänomenologischen Modellen [3, 52] untersucht. Dies ist im Vergleich zur exakten mikroskopischen Kenntnis der Ladungsträgerdynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen [94] nicht befriedigend.

Das Ziel dieser Arbeit ist es daher, die Beschreibung der Spindynamik bzw. der Spinrelaxation und der Spindphasierung auf der Basis einer mikroskopischen Theorie für Halbleiter-Quantenstrukturen zu formulieren. Wir orientieren uns dabei an dem in der Ladungsträgerdynamik verwendeten Konzept der Bloch-Gleichungen und formulieren eine konsistente Darstellung der Spindynamik im Dichtematrixformalismus.

Dieses Ziel kann in zwei Bereiche unterteilt werden. Einer der beiden wird auf mikroskopischer Ebene die Spindynamik für einzelne Spins durch die Bloch-Gleichungen beschreiben und die Ergebnisse mit den Observablen des Experiments vergleichen. Hierfür existieren phänomenologische Vorhersagen [35], jedoch keine exakte Theorie. Der zweite Bereich widmet sich der numerische Simulation der Spindynamik in einfachen Modellsystemen, um die Unterschiede und Vorteile in Bezug auf die bisher verwendeten phänomenologischen Modelle aufzuzeigen.

Gliederung der Arbeit

- In KAPITEL 1 werden die Grundlagen der Arbeit erläutert. Wir beginnen mit einer Einführung in die Physik der zweidimensionalen Halbleiter-Quantenstrukturen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Berechnung der Bandstruktur unter Berücksichtigung des Spinfreiheitsgrads der Ladungsträger sowie der Manifestation der Spin-Bahn-Wechselwirkung in derselben. Darauf aufbauend erläutern wir die experimentellen Methoden zur Erzeugung und Untersuchung der Spindynamik in Halbleitern. Da diese stets auf optischen Messungen beruhen, beschreibt der nächste Abschnitt die Ladungsträgerdynamik in optisch getriebenen Halbleitern auf der Basis der Bloch-Gleichungen, die das zentrale Konzept unserer Arbeit darstellen. Hier geben wir einen Überblick über die ursprüngliche Verwendung der Bloch-Gleichungen, um die Nomenklatur einzuführen. Darauf aufbauend werden die Bloch-Gleichungen in optisch getriebenen Halbleitern erläutert. Das Kapitel schließt mit einem Überblick über die relevanten Modelle für die Spinrelaxation und Spindphasierung in Halbleiter-Quantenstrukturen.
- Thema von KAPITEL 2 ist die Formulierung einer mikroskopischen Theorie der Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen mit Hilfe der Bloch-Gleichungen. Nach der Wahl der für die Anwendung der Bloch-Gleichungen geeigneten Basis wird die kohärente Dynamik unter Einbeziehung der spinselektiven optischen Anregung diskutiert. Im Anschluss daran leiten wir die

inkohärente Spindynamik im Rahmen des Dichtematrixformalismus ab. Wir behandeln die in Halbleiter-Quantenstrukturen dominierenden Streumechanismen separat und interpretieren die sich ergebenden Streuraten. Das Kapitel schließt mit dem Vergleich der mikroskopischen Observablen der Theorie mit den makroskopischen Observablen des Experiments und den phänomenologischen Vorhersagen.

- Die numerische Simulation der Spindynamik wird in **KAPITEL 3** präsentiert. Wir erläutern die der Simulation zugrundeliegenden Modellsysteme und führen das System der Bewegungsgleichungen, das die Grundlage der Simulation bildet, ein. Nach einer Beschreibung der numerischen Methode werden die Ergebnisse der Simulation vorgestellt und im Vergleich mit denen der phänomenologischen Theorie diskutiert.
- Den Abschluss bildet die **ZUSAMMENFASSUNG**, in der die zentralen Ergebnisse der Arbeit im Form eines kurzen Überblicks dargestellt werden. Zusätzlich wird ein **AUSBLICK** auf mögliche zukünftige Projekte gegeben, die auf den Resultaten dieser Arbeit aufbauen könnten.

KAPITEL 1

Physikalische Grundlagen

Dieses Kapitel dient der Einführung in die Physik der Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen. Dafür werden zuerst die Eigenschaften der Halbleiter-Quantenstrukturen vorgestellt. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf der Spin-Bahn-Wechselwirkung in diesen Systemen. Im Anschluss werden die experimentellen Methoden zur Betrachtung der Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen präsentiert. Der nächste Abschnitt erläutert das Konzept der Bloch-Gleichungen, das in dieser Arbeit zur Beschreibung der Spindynamik im Allgemeinen und der Spinrelaxation und -dephasierung im Speziellen verwendet wird. Das Kapitel schließt mit der Darstellung der drei wesentlichen Spinrelaxations- und Spindephasierungsmechanismen, die in den betrachteten Halbleiter-Quantenstrukturen auftreten können.

1.1 Halbleiter-Quantenstrukturen

Das Thema dieser Arbeit ist die *Spindynamik* in Halbleiter-Quantenstrukturen. Als Systeme für die theoretischen Untersuchungen dienen dabei *zweidimensionale* (2D) Halbleiterstrukturen. Sie stellen die Grundlage vieler Experimente im Bereich der Spindynamik dar. Experimentell werden Halbleiter-Quantenstrukturen mit Hilfe der *Molekular Strahl Epitaxie* (MBE¹) hergestellt. Sie erlaubt das nahezu perfekte Wachsen der Halbleiterstrukturen mit einer Präzision von wenigen Atomlagen. Im Rahmen dieser Arbeit konzentrieren wir uns auf zwei Arten von 2D-Halbleitersystemen, die *Heterostruktur* und den *Quantenfilm*. Ersteres besteht aus zwei aufeinander gewachsenen Halbleitermaterialien A und B, wobei Material B eine größere Bandlücke aufweist als Material A. Aufgrund der unterschiedlichen Bandlücken kommt es an der Grenzfläche der beiden Materialien zu einem Sprung der Bandkanten entsprechend einer Potenzialstufe. Im Falle einer Dotierung eines oder beider Halbleitermaterialien sind zusätzlich freie Ladungsträger vorhanden und eine Flächenladungszone bildet sich an der Grenzfläche. Diese bestimmt den Verlauf des elektrischen Potenzials Φ

¹MBE = *molecular beam epitaxy*

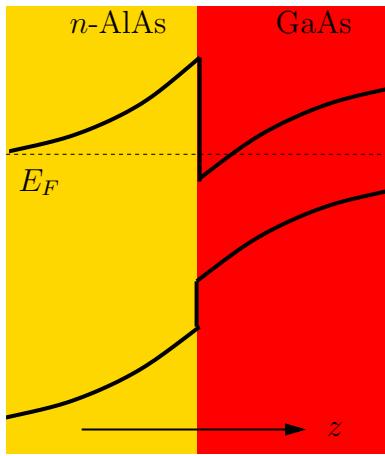


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung einer Heterostruktur aus n -dotierten AlAs und GaAs, das von Natur aus eine schwache p -Dotierung aufweist. Durch die unterschiedlichen Bandlücken entsteht eine Potenzialstufe am Interface. Die Krümmung der Bandkanten ergibt sich durch das elektrostatische Potenzial, das von den Elektronen und ionisierten Dotieratomen in der Struktur erzeugt wird. Durch die n -Dotierung sind mehr Donatoren als Akzeptoren ionisiert und die Fermienergie E_F kann teilweise im Leitungsband liegen.

im Interfacebereich der Heterostruktur, wie Abbildung (Abb.) 1.1 zeigt. Er wird mit Hilfe der Poissons-Gleichung

$$\frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial z^2} = -\frac{1}{\epsilon_0} \varrho(z) \quad (1.1)$$

berechnet, die selbstkonsistent mit der eindimensionalen Schrödingergleichung

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) \psi(z) = \epsilon \psi(z) \quad (1.2)$$

gelöst werden muss. Die Wachstumsrichtung wurde in z -Richtung gelegt. Die Ladungsträgerkonzentration ist gegeben durch $\varrho(z)$ und m^* ist die effektive Masse der Ladungsträger im Halbleitermaterial. Das Potenzial $V(z)$ ist gegeben durch das Hartree-Potenzial der Ladungsträger und durch den Bandkantensprung am Interface. Im Fall einer einseitig n -dotierten Heterostruktur ergibt sich in Wachstumsrichtung ein *triangularer* Potenzialverlauf, wie in Abb. 1.1 für n -dotiertes AlAs und GaAs² dargestellt ist. Das Hartree-Potenzial zusammen mit dem Bandkantensprung (*Offset*) schränkt die Bewegung der Ladungsträger in Wachstumsrichtung ein und lokalisiert deren Wellenfunktion. Diese Einschränkung der Bewegung der Ladungsträger wird als *Confinement* bezeichnet. In der Ebene senkrecht zur Wachstumsrichtung bleibt die Bewegung davon unbeeinflusst und ist weiterhin quasi-frei. Die erlaubten Energiezustände $E_n(\mathbf{k}_{||})$ in der Heterostruktur bilden Subbänder gemäß

$$E_n(\mathbf{k}_{||}) = \epsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{||}^2}{2m^*} . \quad (1.3)$$

²GaAs ist von Natur aus schwach p -dotiert.

ϵ_n bezeichnet die Energie des n -ten Subbandminimums und $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$ den Wellenvektor in der Ebene der Struktur (*in-plane* Wellenvektor). Aus Gleichung (Glg.) (1.3) folgt, dass jeder Zustand durch die Subbandquantenzahl n und den in-plane Wellenvektor \mathbf{k}_{\parallel} bestimmt ist. Die Wachstumsrichtung wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit mit der z -Richtung gleichgesetzt und folglich entspricht die Ebene des zweidimensionalen Elektronensystems der x - y -Ebene. Unter der Annahme eines unendlich hohen Sprungs der Bandkante am Interface kann für die energetisch niedrigsten Subbandzustände das Potenzial für den triangularen Trog durch

$$\Phi(z) = e F_{\perp} z \quad (1.4)$$

approximiert werden [112]. Das elektrische Feld an der Grenzfläche ist gegeben durch F_{\perp} . Die Wellenfunktion des n -ten Subbandzustandes $\psi_n(z)$ kann durch die Airy Funktion $\text{Ai}(x)$ formuliert werden als [112]

$$\psi_n(z) = N_n \text{Ai} \left(\frac{z}{l_{\perp}} - \frac{\epsilon_n}{E_{\perp}} \right), \quad (1.5)$$

mit der Normierungskonstante N_n , der charakteristischen Confinement Energie E_{\perp} und der Confinementlänge l_{\perp} . Die quantisierten Subbandenergien werden durch die Randbedingung $\text{Ai}(\epsilon_n/E_{\perp}) = 0$ festgelegt. Eine genauere Berechnung der Wellenfunktion ergibt sich durch einen Variationsansatz für die Wellenfunktion unter der Bedingung, die Energie des Zustandes für einen vorgegebenen Potenzialverlauf zu minimieren [33, 107].

Eine komplexere Quantenstruktur stellt der *Quantenfilm* (QW³) dar. Bei diesem wird ein dünner Film eines Materials A mit kleiner Bandlücke von zwei Seiten durch ein Material B mit größerer Bandlücke begrenzt. Wie im Fall der Heterostruktur bewirkt dies ein *Confinement* der Ladungsträger in Wachstumsrichtung. Die Form des Potenzials kann durch Dotierung der einzelnen Materialien verändert werden. Der Potenzialverlauf wird wie oben aus einer selbstkonsistenten Lösung der Poisson- und der Schrödinger-Gleichung gewonnen. In Abb. 1.2 ist der Potenzialverlauf in einem symmetrischen und einem asymmetrischen QW skizziert.

Im Fall eines undotierten QW ergibt sich ein Rechtecks-Potenzial. Dieses wird oftmals durch das quantenmechanische Modell eines endlich oder unendlich tiefen Potenzialtopfes beschrieben. Für den unendlich tiefen symmetrischen QW der Breite L lassen sich die Eigenenergien ϵ_n in z -Richtung analytisch schreiben als

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{n^2 \pi^2}{L^2}, \quad n = 1, 2, \dots. \quad (1.6)$$

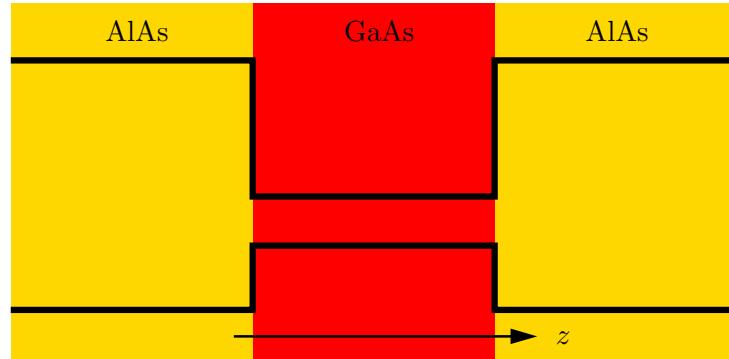
Man erkennt, dass k_z , also der Impuls in Wachstumsrichtung, quantisiert ist und die Werte

$$k_z = \frac{n \pi}{L} \quad (1.7)$$

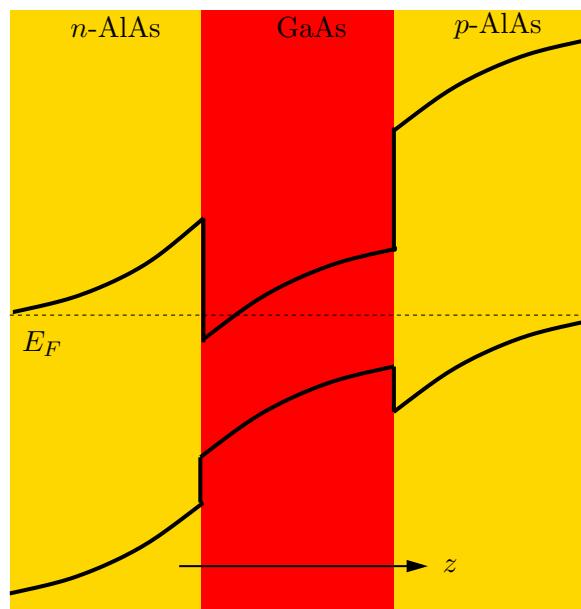
annehmen kann. Die Wellenfunktion hat die Form

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(k_z z + \frac{n \pi}{2} \right). \quad (1.8)$$

³QW = *quantum well*



(a) QW - symmetrisch



(b) QW - asymmetrisch

Abbildung 1.2: Schematische Darstellung von QW Strukturen aus AlAs und GaAs. Wie im Fall der Heterostruktur ergibt sich die Krümmung der Bandkanten durch das elektrostatische Potenzial, das von den Elektronen und ionisierten Dotieratomen erzeugt wird. Bei undotierten Systemen ergibt sich eine „Rechteck“-Struktur, wie in Abb. 1.2(a) dargestellt. Ist die Dotierung asymmetrisch, wie in Abb. 1.2(b), so kommt es zu einer Verzerrung der Bandstruktur entsprechend der Art und Stärke der Dotierung.

Modelliert man den QW durch einen endlich tiefen Potenzialtopf, so wird das Eindringen der Wellenfunktionen in die Barrieren des Potenzialtopfes berücksichtigt. In diesem Fall existieren keine analytischen Lösungen für die Eigenenergien und Wellenfunktionen. Sie müssen numerisch berechnet werden (siehe z. B. Referenz (Ref.) [112]). Asymmetrische QWs können prinzipiell nicht durch analytische Modelle beschrieben werden. Die Bandstruktur muss dann numerisch bestimmt werden [120]. Die vorgestellten Modelle für 2D-Halbleiterstrukturen stellen eine ausreichende Grundlage für numerische Rechnungen dar und werden in KAPITEL 3 verwendet werden.

Eine im Vergleich zu den obigen Modellen exaktere Beschreibung der Eigenenergien und der Wellenfunktionen in 2D-Halbleiterstrukturen liefert die *Envelopen Funktions Näherung* (EFA⁴). Die Anwendbarkeit der EFA ist praktisch unbeschränkt, da sie Quantenstrukturen beliebiger Geometrie erfassen kann, auch unter dem Einfluss von äußeren Störungen wie z. B. Druck, elektrischen und magnetischen Feldern. Die EFA in Form der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode [75, 54, 55, 56] wurde ursprünglich auf Volumenhalbleiter angewendet. Sie beruht auf der Berechnung der Bandstruktur in der Umgebung eines Punktes im \mathbf{k} -Raum (für GaAs z. B. des Γ -Punktes). Dabei wird die Schrödingergleichung des Volumenmaterials mit dem gitterperiodischen Potenzial $V(\mathbf{r})$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

mit Hilfe von Blochfunktionen

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

gelöst. Der gitterperiodische Anteil $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ wird nach dem vollständigen Orthonormalsystem der Bandkantenblochfunktionen

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{n'n}(\mathbf{k}) u_{n'0}(\mathbf{r}) \quad (1.11)$$

mit den Koeffizienten $c_{n'n}(\mathbf{k})$ entwickelt. Dies führt zu einem Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{n'n} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{n'n} \right\} c_{n'n}(\mathbf{k}) = E_n^k c_{n'n}(\mathbf{k}) , \quad (1.12)$$

mit der Bandkantenenergie E_n^0 , der Bandstruktur E_n^k und dem Matrixelement

$$\mathbf{P}_{n'n} = \int d\mathbf{r} u_{n'0}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} u_{n'0}(\mathbf{r}) . \quad (1.13)$$

Die Integration wird über die Einheitszelle ausgeführt. Der Term proportional zu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{n'n}$ in Glg. (1.12) begründet den Namen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode.

⁴EFA = envelope function approximation

Berücksichtigt man zusätzlich den Spin der Ladungsträger, so wird durch Hinzunahme der Spin-Bahn-Wechselwirkung aus der Schrödingergleichung des spinlosen Problems die Pauli-Gleichung

$$\left\{ \left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \mathbb{1} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \hat{\mathbf{p}} \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (1.14)$$

mit dem Eins-Operator $\mathbb{1}$ im Spin-Raum und den Paulischen Spinmatrizen $\boldsymbol{\sigma}$ [121]. Als Konsequenz muss der gitterperiodische Anteil der Blochfunktionen modifiziert werden. Er geht über in einen zweikomponentigen Spinor

$$|n \sigma \mathbf{k}\rangle = \sum_{\substack{n' \\ \sigma'=\uparrow\downarrow}} c_{\sigma \sigma'}(n \sigma \mathbf{k}) |n' \sigma'\rangle, \quad (1.15)$$

mit $|n' \sigma'\rangle := |n' 0\rangle \otimes |\sigma'\rangle$. Anstelle von Glg. (1.12) ergibt sich nun die Energieeigenwertgleichung

$$\sum_{n' \sigma'} \left\{ \left[E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{n n'} \delta_{\sigma \sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\sigma \sigma'} + \Delta_{\sigma \sigma'} \right\} c_{\sigma \sigma'}(n \sigma \mathbf{k}) = E_{n \sigma}^{\mathbf{k}} c_{\sigma \sigma'}(n \sigma \mathbf{k}). \quad (1.16)$$

Sie beinhaltet die modifizierten Matrixelemente

$$\mathbf{P}_{\sigma \sigma'} = \langle n \sigma | \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] | n' \sigma' \rangle \quad (1.17)$$

sowie

$$\Delta_{\sigma \sigma'} = \langle n \sigma | [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \hat{\mathbf{p}} | n' \sigma' \rangle. \quad (1.18)$$

Die Diagonalisierung von Glg. (1.16) ergibt sowohl die Dispersionsrelation $E_{n \sigma}^{\mathbf{k}}$ als auch die Entwicklungskoeffizienten $c_{\sigma \sigma'}(n \sigma \mathbf{k})$ und damit die Wellenfunktionen der Ladungsträger. Bedingung dafür ist die Kenntnis der Bandkantenenergien E_n^0 und der Matrixelemente $\mathbf{P}_{\sigma \sigma'}$ und $\Delta_{\sigma \sigma'}$. Sie werden üblicherweise aus gemessenen Größen bestimmt. Da Glg. (1.16) ein unendlich-dimensionales Gleichungssystem darstellt, wären unendlich viele Parameter zu bestimmen. Bei der praktischen Umsetzung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode betrachtet man daher nur einige benachbarte Bänder zwischen denen die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Kopplung und die Spin-Bahn-Wechselwirkung exakt berücksichtigt wird. Der Einfluss der übrigen Bänder wird in Form einer störungstheoretischen Rechnung, dem sogenannten *Löwdin-Partitioning* [70, 71], berücksichtigt. Durch die Einschränkung auf eine endliche Anzahl von Bändern wird das unendlich-dimensionale Gleichungssystem aus Glg. (1.16) auf ein endlich-dimensionales System reduziert. Man unterscheidet je nach Anzahl der exakt behandelten Bänder verschiedene Modelle der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode. Da in dieser Arbeit kein expliziter Gebrauch von dieser Methode gemacht wird, verweisen wir für die Erläuterung der Modelle auf die entsprechende Literatur⁵.

⁵Literatur zu den verschiedenen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Modellen:

- Kane-Modell (p-bindende Valenzbänder Γ_7^v , Γ_8^v und s-antibindendes Leitungsband Γ_6^c) siehe

Die Anwendung der EFA bzw. der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode auf 2D-Halbleiterstrukturen erfolgt wie im Fall des Volumenmaterials durch eine Entwicklung nach Bandkantenblochfunktionen, wobei im zweidimensionalen Fall die Wellenfunktionen aus einer Summe von Produkten zwischen den schnell oszillierenden Bandkantenblochfunktionen und den langsam oszillierenden *Enveloppenfunktionen* besteht. Dies führt zu einer modifizierten Eigenwertgleichung für die Banddispersion. Darüber hinaus werden aufgrund der Strukturierung des Systems in Wachstumsrichtung die Bandkantenenergien $E_{n\sigma}^0$ und die Matrixelemente $\mathbf{P}_{n\sigma}^{\sigma\sigma'}$ und $\Delta_{n\sigma}^{\sigma\sigma'}$ ortsabhängig. Für eine detaillierte Herleitung und Erläuterung der EFA für zweidimensionale Halbleiter-Quantenstrukturen sei auf Ref. [121] verwiesen.

Wie aus der kurzen Einführung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode ersichtlich ist, führt die explizite Betrachtung des Spins der Ladungsträger zu zusätzlichen Effekten in der Bandstruktur und den Ladungsträgerzuständen. Dies manifestiert sich im Matrixelement $\Delta_{n\sigma}^{\sigma\sigma'}$ wie auch in der im Vergleich zum spinlosen Fall modifizierten Form von $\mathbf{P}_{n\sigma}^{\sigma\sigma'}$. Da diese Effekte wichtig für die Diskussion der Spinrelaxation in Halbleitern und 2D-Halbleitersystemen sind, werden sie im Folgenden genauer betrachtet.

Allgemein gilt, dass die Ladungsträgerzustände in Halbleitern ohne äußeres Magnetfeld aufgrund der räumlichen und zeitlichen Inversionssymmetrie *spinentartet* sind. Die räumliche Inversionssymmetrie lässt sich durch die Energien von Spin-up und Spin-down Zuständen ausdrücken durch

$$E_\sigma(\mathbf{k}) = E_\sigma(-\mathbf{k}) , \quad \sigma = \uparrow, \downarrow . \quad (1.19)$$

Zusätzlich gilt wegen der zeitlichen Inversionssymmetrie die sogenannte *Kramers-Entartung*

$$E_\uparrow(\mathbf{k}) = E_\downarrow(-\mathbf{k}) . \quad (1.20)$$

Aus der Kombination von Glg. (1.19) und (1.20) lässt sich die Spinentartung in Halbleitern ohne äußeres Magnetfeld ableiten

$$E_\uparrow(\mathbf{k}) = E_\downarrow(\mathbf{k}) . \quad (1.21)$$

Die Spinentartung wird aufgehoben, wenn die räumliche oder/und die zeitliche Inversionssymmetrie entfällt, z. B. durch ein externes Magnetfeld \mathbf{B} . Eine Aufhebung der Spinentartung ist aber auch ohne ein externes Feld möglich. Dies ist der Fall, wenn das Potenzial, in dem sich die Ladungsträger befinden, keine *Inversionssymmetrie* aufweist. Dann ist Glg. (1.19) nicht mehr gültig und die Spinentartung wird für $\mathbf{B} = 0$ aufgehoben. Es ist zu beachten, dass die zeitliche Inversionssymmetrie weiterhin besteht, d. h. die Zustände bleiben nach Glg. (1.20) *Kramers-entartet*.

Wir beschränken uns im Folgenden auf die Situation in 2D-Halbleiter-Quantenstrukturen. In diesen gibt es für die Aufhebung der Inversionssymmetrie zwei Mög-

Ref. [55] und [12].

- Erweitertes Kane-Modell (p-antibindende Leitungsbänder Γ_7^c und Γ_8^c zusätzlich zu den Bändern des Kane-Modells) siehe Ref. [19], [20], [95] und [81].
- Luttinger-Modell (nur oberstes Valenzband Γ_8^v) siehe Ref. [75], [74] und [76].

lichkeiten⁶. Die erste baut darauf auf, dass die Kristallstruktur des Halbleiters kein Inversionszentrum besitzt. Dies ist bei allen III-V und II-VI Halbleitern wegen ihrer Zinkblendestruktur der Fall (z. B. GaAs). Da diese Art der Inversionsasymmetrie bereits im Volumenmaterial auftritt, wird der entsprechende Mechanismus als *BIA* (*bulk inversion asymmetry*) Spinaufspaltung bezeichnet. Sie hängt nur von der mikroskopischen Spin-Bahn-Wechselwirkung und damit vom Matrixelement $\Delta_{nn'}_{\sigma\sigma'}$ ab.

Die zweite Möglichkeit, die Inversionssymmetrie aufzuheben, ist auf Quantenstrukturen beschränkt. Wie bereits angesprochen, ist es möglich die Form des elektrischen Potenzials der 2D-Halbleiterstruktur durch Dotierung zu manipulieren. Dadurch lässt sich ein in Wachstumsrichtung asymmetrisches Potenzial einstellen, das eine Inversionsasymmetrie aufweist. Dieser Beitrag führt zur *SIA* (*structure inversion asymmetry*) Spinaufspaltung. Im Unterschied zum BIA-Beitrag lässt sich der SIA-Beitrag als ein Produkt eines von $\Delta_{nn'}_{\sigma\sigma'}$ abhängigen Faktors mit dem makroskopischen elektrischen Feld, das durch das elektrische Potenzial der Halbleiterstruktur gegeben ist, schreiben.

Die qualitative Form der einzelnen Beiträge zum Hamiltonian des Halbleitersystems kann aus der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie gewonnen werden [121, 135], z. B. über eine Invariantenentwicklung des $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Hamiltonians. Der Spin-Bahn-Term im Hamiltonian lässt sich dann schreiben als

$$\mathcal{H}_{\text{SB}} = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) . \quad (1.22)$$

Die Struktur der Spin-Bahn-Wechselwirkung wird durch $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ bestimmt. An der Form des Hamiltonians erkennt man, dass $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ als ein \mathbf{k} -abhängiges *effektives Magnetfeld* interpretiert werden kann. Es führt bei endlichem Wellenvektor \mathbf{k} zu einer Spinaufspaltung von $2\hbar|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$ zwischen den Zuständen eines Bandes deren Spin parallel bzw. antiparallel zu \mathbf{k} ist. Für $\mathbf{k} = 0$ verschwindet die Aufspaltung wegen der Kramers-Entartung.

Zur Bestimmung der Struktur von $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ für ein System mit BIA-Term muss man unterscheiden, ob es sich um Volumenmaterial oder eine 2D-Halbleiterstruktur handelt. Im Falle des Volumenmaterials ist $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ bestimmt durch

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|_{\text{BIA, bulk}} = \frac{\gamma}{\hbar} \begin{pmatrix} k_x (k_y^2 - k_z^2) \\ k_y (k_z^2 - k_x^2) \\ k_z (k_x^2 - k_y^2) \end{pmatrix} . \quad (1.23)$$

Da es sich hier um Volumenmaterial handelt, ist $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ein dreidimensionaler Wellenvektor. Der Vorfaktor γ ist eine materialabhängige Konstante. Ihre Größe ist bestimmt durch die Parameter des $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Modells. Diesen Beitrag zur Spinaufspaltung nennt man auch *Dresselhaus-* oder k^3 -Term [27]. Für 2D-Halbleiterstrukturen muss der BIA-Beitrag modifiziert werden. In erster Ordnung Störungstheorie ergibt dies eine Ersetzung der Terme k_z und k_z^2 durch deren Erwartungswerte bzgl. der

⁶In der Literatur wird eine dritte Möglichkeit diskutiert, deren Effekt für die Spinaufspaltung aber sehr klein ist. Daher wird die so genannte *Grenzflächeninversionsasymmetrie* (IIA = *interface inversion asymmetry*) [50, 98, 52] hier vernachlässigt.

Subbandwellenfunktionen [28]. Damit hat $\Omega(\mathbf{k})$ die Form

$$\Omega(\mathbf{k})|_{\text{BIA, 2D}} = \frac{\gamma}{\hbar} \begin{pmatrix} k_x (k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle) \\ k_y (\langle k_z^2 \rangle - k_x^2) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

Im Unterschied zum Volumenmaterial hängt das effektive Magnetfeld im 2D-Halbleiter system nur vom in-plane Wellenvektor $\mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y, 0)$ ab. Zusätzlich ergibt sich durch die Ersetzung von k_z und dessen Potenzen durch den Erwartungswert, dass die Spinaufspaltung proportional zu linearen und kubischen Termen in $\mathbf{k}_{||}$ ist, wobei für $k_i^2 \ll \langle k_z^2 \rangle$ der lineare Anteil dominiert. In Glg. (1.24) wurde wie in Ref. [28] benutzt, dass $\langle k_z \rangle$ verschwindet, was sich z. B. für den Fall einer ortsunabhängigen effektiven Masse zeigen lässt [52]. In symmetrischen 2D-Halbleiterstrukturen ist der BIA-Term der einzige Beitrag zur Spinaufspaltung.

In asymmetrischen 2D-Halbleiterstrukturen kann noch ein zusätzlicher Beitrag auftreten, der SIA-Term. Er ist gegeben durch

$$\Omega(\mathbf{k})|_{\text{SIA}} = \frac{\alpha}{\hbar} \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

Dieser Beitrag ist linear in $\mathbf{k}_{||}$ und wird auch als *Rashba*-Term bezeichnet [18]. Wie bereits angedeutet, ist der Vorfaktor α im Unterschied zum BIA-Vorfaktor γ nicht ausschließlich von der mikroskopischen Spin-Bahn-Wechselwirkung abhängig, sondern ist proportional zum Erwartungswert des elektrischen Feldes in Wachstumsrichtung. Dieses Feld kann aus zwei Anteilen bestehen: Ein Anteil ist gegeben durch das Feld, das sich intrinsisch durch die Dotierung im Material aufbaut⁷, der zweite Anteil kann ein von außen angelegtes elektrisches Feld sein, das es erlaubt die Stärke des Rashba-Terms extern über *gate*-Elektroden zu steuern [83, 88].

Für asymmetrische 2D-Halbleiterstrukturen in III-V und II-VI Materialien setzt sich die Spinaufspaltung folglich aus dem BIA- *und* dem SIA-Term zusammen. Die Bestimmung der BIA- und SIA-Parameter α und γ wurde bereits in einer Vielzahl von Veröffentlichungen diskutiert (siehe Ref. [135] und darin enthaltene Referenzen). Das große Interesse an der Spinaufspaltung und der Spin-Bahn-Wechselwirkung beruht auf der Tatsache, dass sie eine Möglichkeit darstellt die Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten in Halbleitern und 2D-Halbleiterstrukturen sowohl qualitativ zu erklären als auch quantitativ zu bestimmen. Die Definition dieser Zeiten und die experimentellen Methoden zur Messung derselben werden im nächsten Abschnitt erläutert.

⁷Dabei handelt es sich eigentlich um den Erwartungswert des elektrischen Feldes im Valenzband [65, 122], da der Erwartungswert des Feldes im Leitungsband verschwindet [23].

1.2 Experimentelle Methoden zur Untersuchung der Spindynamik

Grundlage für das Auftreten von Spindynamik ist eine *Nichtgleichgewichtsverteilung* von Spinzuständen. Bei der Interpretation von Experimenten werden die Spinzustände bezüglich einer festen Quantisierungsachse klassifiziert. In 2D-Halbleiter-Quantenstrukturen ist diese gegeben durch die Wachstumsrichtung. Prinzipiell kann die Nichtgleichgewichtsverteilung für die in dieser Arbeit betrachteten System auf zwei Arten erzeugt werden:

- *Elektrische Injektion* von spinpolarisierten Ladungsträgern in den Halbleiter
- *Optische Anregung* unter Ausnutzung von spin-selektiven optischen Auswahlregeln

Die Methode der spinpolarisierten Injektion beruht auf dem Transfer von spinpolarisierten Ladungsträgern, z. B. aus einem Ferromagneten (FM) oder einem verdünnten magnetischen Halbleiter (DMS⁸), in einen Halbleiter über einen Tunnelprozess und basiert auf dem paradigmatischen Vorschlag von Das und Datta zur Realisierung eines spinaktiven Transistorbauelements [25]. Eine praktische Umsetzung der Methode stieß auf große Probleme, die in der mangelnden Effizienz des Injektionsmechanismus beruhen. Die *prinzipielle* Natur dieses Problems wurde in Ref. [105] mit Hilfe eines Widerstandsmodells phänomenologisch erklärt. Daher basieren faktisch alle Methoden zur Erzeugung spinpolarisierter Ladungsträger auf dem Prinzip einer spin-selektiven optischen Anregung, der sogenannten *optischen Orientierung* [82].

Diese Methode wird seit langem sehr gut beherrscht, da sie auf bekannten optischen Auswahlregeln in den untersuchten Halbleiterstrukturen aufbaut. Die Auswahlregeln können exemplarisch für den Fall einer GaAs/AlGaAs QW Struktur unter Interbandanregung erklärt werden. Ausgangspunkt ist ein idealisiertes 6-Niveau-Schema bestehend aus den spinaufgespaltenen Zuständen des untersten Leitungsbandes (CB) mit Spin $\pm 1/2$ und des Leichtloch- (LH) und Schwerlochbandes (HH) mit Spin $\pm 1/2$ bzw. $\pm 3/2$. Die Anregung erfolgt mit *zirkular polarisiertem* Licht, das sich in Wachstumsrichtung ausbreitet. Betrachtet man für die Anregung die Übergangsmatrixelemente der beteiligten Zustände, ergeben sich folgende Auswahlregeln:

- *Rechtszirkular* polarisiertes Licht (σ_+) erzeugt Übergänge von Spin $-3/2$ Zuständen im HH-Band in Spin $-1/2$ Zustände im CB-Band. Zusätzlich werden Spin $-1/2$ Zustände aus dem LH Band in Spin $+1/2$ Zustände aus dem CB-Band angeregt. Die relative Wahrscheinlichkeit für die Übergänge ist 3 : 1 bzgl. HH- und LH-Band.
- *Linkszirkular* polarisiertes Licht (σ_-) erzeugt Übergänge von Spin $+3/2$ Zuständen im HH-Band in Spin $+1/2$ Zustände im CB-Band. Zusätzlich werden Spin $+1/2$ Zustände aus dem LH-Band in Spin $-1/2$ Zustände aus dem

⁸DMS = *dilute magnetic semiconductor*

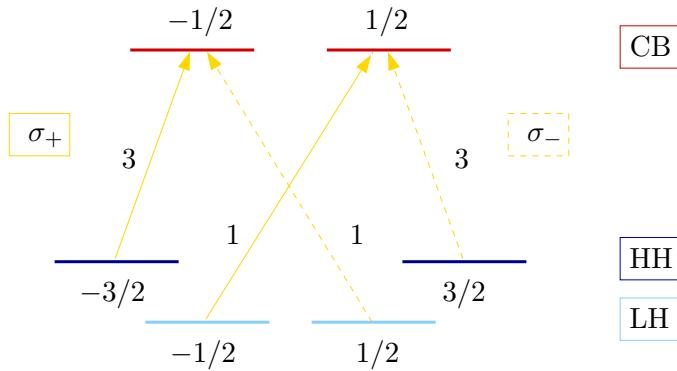


Abbildung 1.3: Skizze der erlaubten Übergänge in einem GaAs/AlGaAs QW System unter Anregung mit zirkular polarisiertem Licht. Neben den Pfeilen ist die relative Stärke der Übergänge angegeben.

CB-Band angeregt. Auch hier ist das Verhältnis der Übergangswahrscheinlichkeiten mit 3 : 1 bzgl. HH- und LH-Band gegeben.

Diese Auswahlregeln sind in Abb. 1.3 graphisch dargestellt. Streng genommen gelten sie nur für idealisierte QW Strukturen bei $\mathbf{k} = 0$. In realen Strukturen zeigen sich allerdings nur kleine Abweichungen von den genannten Auswahlregeln, die daher zumindest als Faustregel benutzt werden können [85].

Ist durch optische Orientierung eine Nichtgleichgewichtsverteilung von Spins erzeugt worden, so wird diese in eine Gleichgewichtsverteilung relaxieren und gleichzeitig dephasieren. Die Relaxation, d. h. der Abbau des Ungleichgewichts zwischen Spin-up und Spin-down Zuständen durch Spinrelaxationsprozesse geschieht auf der Zeitskala der *Spinrelaxationszeit* τ_{SR} . Die Spindphasierung beschreibt den Abbau der Kohärenz des Spinensembles und ist durch die Spindphasierungszeit τ_{SD} bestimmt. Die Theorie der Mechanismen, die zu diesen Abbauprozessen führen, werden im letzten Abschnitt vorgestellt. Für die experimentelle Bestimmung der beiden Zeitskalen, die gleichbedeutend mit einer Untersuchung der Spindynamik ist, werden im Prinzip zwei Messtechniken verwendet, nämlich die *zeitaufgelöste Photolumineszenz* (TR-PL) [47, 110, 85] und die *zeitaufgelöste Faraday Rotation* (TR-FR) [5, 58, 134, 85].

Bei der TR-PL wird das 2D-Halbleiterystem mit zirkular polarisierten *Picosekunden*-Laserpulsen angeregt. Die so erzeugte Photolumineszenzstrahlung wird polarisationsaufgelöst, mit einem Monochromator spektral zerlegt und schließlich durch eine Streak-Kamera aufgenommen, die eine zeitliche Auflösung im Bereich weniger Picosekunden erlaubt. Die TR-PL Messung ermöglicht eine direkte Darstellung der Spindynamik und Spinrelaxation der Ladungsträger im System. Sie wird bei der Untersuchung von Elektron-Loch Systemen verwendet, da die Rekombination von Elektronen und Löchern Voraussetzung für die Entstehung von Photolumineszenzstrahlung ist. Der gleiche Aufbau kann durch ein externes homogenes Magnetfeld erweitert werden, das senkrecht zur Richtung der Anregung ausgerichtet ist und zu einer Präzession der Spins führt.

Für die Untersuchung der Spindynamik in *reinen* Elektronensystemen ist die TR-FR die geeigneter Methode. Bei ihr wird die Probe, die sich in einem Magnetfeld befindet, durch *Femtosekunden*-Laserpulse angeregt. Das Magnetfeld steht senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Anregung. Die Pulse werden in einen *pump*-Puls und einen zeitlich verzögerten *probe*-Puls geteilt. Letzterer hat dabei eine wesentlich geringere Intensität als der *pump*-Puls. Dieser wird zirkular polarisiert und erzeugt somit eine spinsensitive Anregung, während der *probe*-Pulse linear polarisiert ist. Nachdem sowohl *pump*- als auch *probe*-Puls die Probe durchlaufen haben, wird der *probe*-Puls in zwei Strahlen aufgeteilt und auf zwei separate Photodioden fokussiert. Das Differenz- und Summensignal der beiden Photodioden wird in Abhängigkeit des Zeitabstandes zwischen dem *pump*- und dem *probe*-Puls gemessen. Das Differenzsignal dividiert durch das Summensignal ergibt ein Maß für die durch den *pump*-Puls erzeugte Spinpolarisation. Die sich ergebende Spindynamik wird durch die Variation der zeitlichen Verzögerung des *probe*-Pulses untersucht.

Beide Methoden stellen die Standards für die rein *optische* Untersuchung von Spindynamik in Halbleitern dar⁹. Zur Vollständigkeit sei erwähnt, dass noch weitere Messmethoden zur Bestimmung der Spinrelaxationszeit existieren, die nur zur Erzeugung der Spinpolarisation optische Methoden benutzen, die Spinrelaxationszeiten aber über elektrische Ströme (die *photogalvanischen Ströme* [49]) in *gyrotropen* 2D-Halbleitersystemen bestimmen [37, 38].

Die Messungen liefern je nach Materialsystem, Dotierung und Wachstumsrichtung der Halbleiter-Quantenstruktur Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten im Bereich von pico- (siehe z. B. Ref. [110]: 33 ps) bis hin zu nano-Sekunden (siehe z. B. Ref. [58]: 100 ns). Eine konsistente Unterscheidung der gemessenen Größen in Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten kann in den Arbeiten nicht gefunden werden, da die verwendete Nomenklatur *inkonsistent* aus der der Bloch-Gleichungen übernommen wurde. Dieses Problem wurde in einem Artikel von M. Flatté aufgegriffen [35], in dem diskutiert wird, dass der Zusammenhang zwischen den Zerfallszeiten, die durch die Bloch-Gleichungen definiert sind, und den experimentell bestimmten Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten nicht trivial ist. Unser Ziel ist es eine mikroskopische Theorie basierend auf den Bloch-Gleichungen zu formulieren, die einen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten des Experiments und den Zerfallszeiten der Bloch-Gleichungen herstellt. Der nächste Abschnitt dient daher der Einführung in das *Konzept der Bloch-Gleichungen*.

1.3 Das Konzept der Bloch-Gleichungen

Ursprünglich wurde das Konzept der Bloch-Gleichungen dazu verwendet die *Magnetisierungsdynamik* in Atomen und Atomkernen zu beschreiben [16]. Von besonderem Interesse ist dabei das Resonanzverhalten unter Anregung mit einem magnetischen Feld. Der Ausgangspunkt der Beschreibung ist gegeben durch ein Teilchen mit einem

⁹Eine detaillierte Beschreibung in Bezug auf aktuelle Experimente findet man in Ref. [85] und [134].

Drehimpuls \mathbf{L} in einem externen Magnetfeld \mathbf{B} . Der Drehimpuls \mathbf{L} führt entsprechend der Relation

$$\mathbf{M} = \gamma_m \mathbf{L} \quad (1.26)$$

zu einer Magnetisierung \mathbf{M} , wobei γ_m das gyromagnetische Verhältnis ist. Das externe Magnetfeld besteht aus einem statischen Anteil \mathbf{B}_0 und einem zeitlich veränderlichen Anteil \mathbf{B}_1 . Der statische Anteil ist parallel zur z -Richtung. Er führt zu einer Präzession des magnetischen Moments \mathbf{M} um \mathbf{B}_0 mit konstanter Winkelgeschwindigkeit $\omega_0 = -\gamma_m |\mathbf{B}_0|$. Diese Präzessionsbewegung wird als *Larmor Präzession* bezeichnet. Um Resonanz zu erzeugen wird zusätzlich zu \mathbf{B}_0 das zeitlich veränderliche Magnetfeld $\mathbf{B}_1(t)$ eingeführt. Es ist senkrecht zu \mathbf{B}_0 und rotiert mit der Winkelgeschwindigkeit ω um \mathbf{B}_0 . Der Betrag von $\mathbf{B}_1(t)$ bleibt konstant. Durch das zweite Magnetfeld ergibt sich für die Magnetisierung eine weitere Präzessionsfrequenz, die analog zur ersten definiert ist als $\omega_1 = -\gamma_m |\mathbf{B}_1|$. Die Dynamik der Magnetisierung ist schließlich gegeben durch die *Bloch-Gleichung*

$$\partial_t \mathbf{M} = \gamma \mathbf{M} \times [\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)] . \quad (1.27)$$

\mathbf{M} wird in diesem Kontext auch als *Bloch-Vektor* bezeichnet. Da keine dissipativen Mechanismen berücksichtigt werden, bleibt die Länge des Vektors konstant. Aus Glg. (1.27) ergibt sich, dass die Präzession des Bloch-Vektors im Allgemeinen um ein effektives Magnetfeld \mathbf{B}_{eff} erfolgt, das sich aus einer Koordinatentransformation zwischen den Bezugssystemen ergibt, die von \mathbf{B}_0 und \mathbf{B}_1 aufgespannt werden. Eine detaillierte Herleitung findet man in Ref. [22]. Die möglichen Grenzfälle der Präzessionsbewegungen können bzgl. der Frequenz $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ eingeteilt werden in:

- $\Delta\omega \gg \omega_1$:
 \mathbf{M} präzidiert mit kleiner Amplitude um \mathbf{B}_{eff} .
- $\Delta\omega \ll \omega_1$:
 \mathbf{M} präzidiert mit großer Amplitude um \mathbf{B}_{eff} . Die Amplitude kann dabei so groß werden, dass sich die Richtung der Magnetisierung um 180° dreht.

Beide Grenzfälle werden in Experimenten zur magnetischen Kernspinresonanz genutzt. Zusätzlich treten im Experiment Relaxations- und Dephasierungsprozesse auf. Diese werden in der ursprünglichen Form der Bloch-Gleichungen durch *phänomenologische* Relaxationszeiten berücksichtigt

$$\partial_t M_{x/y} = \gamma_m \{ \mathbf{M} \times [\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)] \}_{x/y} - \frac{1}{T_2} M_{x/y} \quad (1.28)$$

$$\partial_t M_z = \gamma_m \{ \mathbf{M} \times [\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)] \}_z - \frac{1}{T_1} (M_z - M_z^0) . \quad (1.29)$$

T_2 wird als *Dephasierungszeit* oder als *transversale* Zerfallszeit bezeichnet, da sie den Zerfall der transversalen Komponenten der Magnetisierung bestimmt. Die *Relaxationszeit* oder *longitudinale* Zerfallszeit ist durch T_1 gegeben. Sie entspricht der Zeit, die das System benötigt, bis die longitudinale Komponente der Magnetisierung in

ihren Ausgangswert M_z^0 relaxiert ist. Mit Hilfe der so erweiterten Bloch-Gleichungen lassen sich die Phänomene der Magnetisierungsdynamik auf anschauliche Weise beschreiben und verstehen¹⁰.

Das bisher vorgestellte Konzept der Bloch-Gleichungen ist auf die Beschreibung der Magnetisierungsdynamik von Atomen und Atomkernen beschränkt. Es wurde auf ein *getriebenes Zwei-Niveau-System* übertragen [22]. Die Beschreibung des Zwei-Niveau-Systems erfolgt im Unterschied zur klassischen Beschreibung der Magnetisierungsdynamik quantenmechanisch. Eine detaillierte Herleitung der Bloch-Gleichungen für ein getriebenes Zwei-Niveau-System findet man z. B. in Ref. [22].

Der nächste Schritt in der „Evolution“ der Bloch-Gleichungen war der hin zur *Ladungsträgerdynamik* in optisch getriebenen Halbleitern [102, 94, 39]. Im einfachsten Fall besteht das Zwei-Niveau-System dann aus einem Leitungs- (c) und einem Valenzband- (v) Zustand beim Wellenvektor \mathbf{k} , zwischen denen Übergänge durch optische Anregung erzeugt werden. Zur theoretischen Formulierung der Ladungsträgerdynamik wird der *Dichtematrixformalismus* benutzt. Die Dynamik der Einträge der Dichtematrix entspricht dabei der Dynamik der experimentellen Observablen. Für das Zwei-Niveau-System ist die Dichtematrix eine 2×2 Matrix der Struktur

$$\boldsymbol{\varrho} = \begin{pmatrix} \varrho_c(\mathbf{k}) & P_{cv}(\mathbf{k}) \\ P_{cv}^*(\mathbf{k}) & \varrho_v(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Die Diagonaleinträge der Dichtematrix $\varrho_c(\mathbf{k})$ und $\varrho_v(\mathbf{k})$ beschreiben die Besetzungswahrscheinlichkeiten im Leitungs- bzw. Valenzband beim Wellenvektor \mathbf{k} . In zweiter Quantisierung sind sie definiert als Erwartungswerte von Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren entsprechend

$$\varrho_c(\mathbf{k}) := \langle c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \rangle \quad (1.31)$$

$$\varrho_v(\mathbf{k}) := \langle v(\mathbf{k}) v^\dagger(\mathbf{k}) \rangle. \quad (1.32)$$

Wir haben hier die Elektron-Loch Schreibweise¹¹ eingeführt, d. h. der Fermioperator $c^\dagger(\mathbf{k})/c(\mathbf{k})$ [$v^\dagger(\mathbf{k})/v(\mathbf{k})$] erzeugt/vernichtet ein Elektron (Loch) beim Wellenvektor \mathbf{k} . Die Nebendiagonaleinträge beschreiben den Übergang zwischen Valenz- und Leitungsband und haben die Form

$$P_{cv}(\mathbf{k}) := \langle c^\dagger(\mathbf{k}) v^\dagger(\mathbf{k}) \rangle. \quad (1.33)$$

$P_{cv}(\mathbf{k})$ wird als *Interbandpolarisation* bezeichnet [46].

Für das optisch angeregte Zwei-Niveau-System ohne Vielteilchen-Effekte und Streu-mechanismen ist der Hamiltonian gegeben durch drei Bestandteile

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{kin}, c} + \mathcal{H}_{\text{kin}, v} + \mathcal{H}_{\text{Licht}}. \quad (1.34)$$

¹⁰Eine Lösung der Bloch-Gleichungen mit phänomenologischen Zerfallszeiten ist analytisch möglich [111]. Dazu verwendet man die *Laplace Transformation*. Sie überführt das im Allgemeinen nicht analytisch lösbar System von gekoppelten Differentialgleichungen in ein System gekoppelter algebraischer Gleichungen. Dieses kann in der Regel analytisch exakt gelöst werden. Die inverse Laplace-Transformation liefert dann die Lösungen des Differentialgleichungssystems. Die Transformationsvorschrift der Laplace-Transformation ist durch die Integralgleichung $\mathcal{L}[f(t)] = \int_0^\infty dt f(t)e^{-st}$ mit der Laplace-transformierten $\mathcal{L}[f(t)]$ der Funktion $f(t)$ gegeben. Der Parameter s ist komplexwertig.

¹¹Löcher werden als zeitlich invertierte Elektronen interpretiert.

Die ersten beiden Terme enthalten den kinetischen Beitrag für das Elektronensystem

$$\mathcal{H}_{\text{kin}, c} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_c(\mathbf{k}) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \quad (1.35)$$

bzw. das Lochsystem

$$\mathcal{H}_{\text{kin}, v} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_v(\mathbf{k}) v^\dagger(\mathbf{k}) v(\mathbf{k}) , \quad (1.36)$$

mit den Elektron- bzw. Loch-Einteilchen-Energien $\epsilon_c(\mathbf{k})$ und $\epsilon_v(\mathbf{k})$. Die Wechselwirkung mit dem Lichtfeld ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_{\text{Licht}} = \sum_{\mathbf{k}} [\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(t) c^\dagger(\mathbf{k}) v^\dagger(\mathbf{k}) + \mathbf{d}_{cv}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(t) v(\mathbf{k}) c(\mathbf{k})] . \quad (1.37)$$

$\mathbf{E}(t)$ ist der Vektor des anregenden elektrischen Feldes und $\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k})$ ist das Dipolmatrixelement

$$\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) = \langle c | e \mathbf{r} | v \rangle , \quad (1.38)$$

mit den Wellenfunktionen $|c\rangle$ ($|v\rangle$) der Elektronen (Löcher). In der ursprünglichen Fassung der Bloch-Gleichungen mit optischem Antrieb ist das Lichtfeld ein Skalar. Die Erweiterung auf ein vektorielles Feld wurde erst später eingeführt [96]. Dies spielt für die folgende Betrachtung keine Rolle, die Bedeutung des Vektorcharakters wird in KAPITEL 2 erläutert. Die Wechselwirkung mit dem Lichtfeld wird in der *rotating wave approximation* (RWA) betrachtet, d. h. nicht-resonante Beiträge werden vernachlässigt.

Die Dynamik der Dichtematrix ist durch die *Liouville-Gleichung* bestimmt, die die zeitliche Ableitung der Dichtematrix mit dem Kommutator des Hamiltonians mit der Dichtematrix verknüpft

$$i\hbar \partial_t \boldsymbol{\varrho} = [\mathcal{H}, \boldsymbol{\varrho}]_- . \quad (1.39)$$

Damit ergeben sich die Bewegungsgleichungen für die Einträge der Dichtematrix zu

$$\partial_t \varrho_c(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar} \Im \{ \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(t) P_{cv}^*(\mathbf{k}) \} \quad (1.40)$$

$$\partial_t \varrho_v(\mathbf{k}) = +\frac{1}{\hbar} \Im \{ \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(t) P_{cv}^*(\mathbf{k}) \} \quad (1.41)$$

$$\begin{aligned} \partial_t P_{cv}^*(\mathbf{k}) = & -\frac{1}{i\hbar} [\epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega] P_{cv}^*(\mathbf{k}) \\ & + \frac{i}{2} \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(t) [\varrho_c(\mathbf{k}) - \varrho_v(\mathbf{k})] . \end{aligned} \quad (1.42)$$

ω ist die Frequenz des treibenden Lichtfelds. Die Gleichungen lassen sich in Analogie zur Magnetisierungsdynamik in Form eines Bloch-Vektors mit den Komponenten [1]

$$u(\mathbf{k}) := 2 \Re \{ P_{cv}(\mathbf{k}) \} \quad (1.43)$$

$$v(\mathbf{k}) := 2 \Im \{ P_{cv}(\mathbf{k}) \} \quad (1.44)$$

$$w(\mathbf{k}) := [\varrho_c(\mathbf{k}) - \varrho_v(\mathbf{k})] \quad (1.45)$$

schreiben. Die Dynamik der Komponenten ist bestimmt durch die zeitliche Ableitung der Einträge der Dichtematrix entsprechend Glg. (1.40) - (1.42). Die transversalen

Komponenten $u(\mathbf{k})$ und $v(\mathbf{k})$ enthalten die Information über den Übergang zwischen Valenz- und Leitungsband, die longitudinale Komponente $w(\mathbf{k})$ ist ein Maß für die Besetzungsinvolution. Wie im Fall der Magnetisierungsdynamik bleibt im dissipationslosen Regime die Länge des Bloch-Vektors erhalten

$$\partial_t \sqrt{u(\mathbf{k})^2 + v(\mathbf{k})^2 + w(\mathbf{k})^2} = 0. \quad (1.46)$$

Die Frequenzen, gegeben durch die Energiedifferenz $[\epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_v(\mathbf{k})] / \hbar$, die des anregenden Feldes ω und die *Rabi-Frequenz* $\Omega_R = [\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(t)] / \hbar$, bestimmen in Analogie zur Magnetisierungsdynamik die unterschiedlichen Regime der Propagation des Bloch-Vektors. Es ergeben sich die Grenzfälle:

- $\hbar \Omega_R \gg \epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar \omega$:

Der Bloch-Vektor wird in der v - w -Ebene gedreht. Dies entspricht dem Fall der Präzession der Magnetisierung mit großer Amplitude, da sich die Richtung des Bloch-Vektors ändert.

- $\hbar \Omega_R \ll \epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar \omega$:

Die Drehung des Bloch-Vektors erfolgt in der u - v -Ebene. Dies entspricht einer freien Propagation des Bloch-Vektors ohne Anregung bzw. dem nichtresonanten Fall der Magnetisierungsdynamik, da sich die Richtung der transversalen Komponente $w(\mathbf{k})$ nicht ändert.

Mit Hilfe der Darstellung als Bloch-Vektor lassen sich optische Experimente wie das *Photon Echo* einfach visualisieren und verstehen (siehe dazu Ref. [102]). Die Gleichungen (1.40), (1.41) und (1.42) stellen den Ausgangspunkt für die mikroskopische Beschreibung der Ladungsträgerdynamik in Halbleitern dar [46]. Die Gleichungen der Ladungsträgerdynamik werden aber in einer verallgemeinerten Form ohne RWA formuliert und beinhalten damit auch nichtresonante Prozesse [46].

Auf Grundlage der obigen Gleichungen unterscheidet man in der Theorie der Ladungsträgerdynamik zwei Typen von Bloch-Gleichungen. Die sogenannten *optischen Bloch-Gleichungen* enthalten nur Einteilchen-Beiträge, wie z. B. die Wechselwirkung mit dem Lichtfeld oder die Wechselwirkung mit Phononen [102]. Werden im Hamiltonian Vielteilchen-Effekte berücksichtigt, d. h. die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern, so führt das auf die *Halbleiter-Bloch-Gleichungen* [69, 46].

Die Hinzunahme der Ladungsträger-Phonon- oder Coulomb-Wechselwirkung ermöglicht die *mikroskopische* Beschreibung von Streuprozessen, die in den klassischen Bloch-Gleichungen der Magnetisierungsdynamik nur mit Hilfe von phänomenologischen Zerfallszeiten berücksichtigt wurden. Für die konkrete Einbeziehung der Streuung in die Bewegungsgleichungen der Dichtematrixeinträge stehen im Allgemeinen zwei Methoden zur Verfügung, das *korrelationsbasierte Näherungsschema* [94] und der *Keldysh Formalismus* [44].

In dieser Arbeit werden wir ausschließlich das korrelationsbasierte Näherungsschema verwenden, das in KAPITEL 2 ausführlich erläutert wird. Die so zu berechnenden Streuterme können den phänomenologisch eingeführten Zerfallszeiten der Magnetisierungsdynamik zugeordnet werden. Während die Zerfallszeiten in der Magnetisie-

rungsdynamik den Abbau einzelner Komponenten des Magnetisierungsvektors beschreiben, sind die entsprechenden Observablen im Dichtematrixformalismus durch Kombinationen der Einträge in der Dichtematrix definiert. Für das Zwei-Niveau-System existieren zwei Observablen, deren Zerfall die T_1 - und T_2 -Zeiten bestimmt. Die erste Observable ist bestimmt durch die *Besetzungszahldifferenz* D zwischen den beiden Niveaus, d. h. durch die Differenz der Diagonalelemente [46]. Für das Zwei-Niveau-System bestehend aus Valenz- und Leitungsband hat D die Form

$$D := \sum_{\mathbf{k}} [\varrho_c(\mathbf{k}) - \varrho_v(\mathbf{k})] . \quad (1.47)$$

Der Zerfall von D ist bestimmt durch die T_1 - oder Relaxations-Zeit. Da die Dichtematrixeinträge die Dynamik nur für einzelne \mathbf{k} beschreiben, muss zur Bestimmung der T_1 -Zeit des Ensembles eine Summation über den \mathbf{k} -Raum durchgeführt werden. Die zweite Observable ist im Dichtematrixformalismus gegeben durch die *inkohärente Summe der Nebendiagonalelemente* C [62]. Sie ist ein Maß für die *irreversiblen* Dephasierungsprozesse im System, wie in ANHANG A gezeigt wird. Im Fall des oben besprochenen Halbleitersystems kann C dargestellt werden als

$$C := \sum_{\mathbf{k}} |P_{cv}(\mathbf{k})| . \quad (1.48)$$

Die T_2 - oder *Dephasierungszeit*-Zeit¹² beschreibt den Abbau von C . Um den Zerfall der Kohärenz des Ensembles zu bestimmen, muss auch hier die Summation über \mathbf{k} durchgeführt werden.

Der bisher vorgestellte Dichtematrixformalismus stellt eine etablierte Theorie zur Beschreibung der Ladungsträgerdynamik, insbesondere der Ultrakurzzeitdynamik, sowohl in Zwei- als auch in Viel-Niveau-Systemen dar [94]. Der Spinfreiheitsgrad wurde dabei aber nie berücksichtigt. Diese Lücke soll in den folgenden Kapiteln geschlossen werden, indem das Konzept der Bloch-Gleichungen auf die Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen übertragen wird. Die so bestimmten Gleichungen ermöglichen eine mikroskopische Formulierung der Spindynamik, insbesondere der Spinrelaxation und der Spindephasierung und deren Zusammenhang mit den Zerfallszeiten der Bloch-Gleichungen. Außerdem wird auf der Basis des Dichtematrixformalismus die Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen numerisch simuliert werden.

Bevor wir in KAPITEL 2 die mikroskopische Theorie der Spinrelaxation und Spindephasierung in Halbleiter-Quantenstrukturen präsentieren, werden im folgenden Abschnitt die wesentlichen Mechanismen, die zu einer Relaxation und Dephasierung von Spins in Halbleitern führen können, erläutert.

¹²Im Folgenden werden Dephasierungs- und Dekohärenzzeit synonym verwendet.

1.4 Spinrelaxationsmechanismen in Halbleiter-Quantenstrukturen

In Halbleiterstrukturen existieren verschiedene Mechanismen, die eine Ungleichgewichtsverteilung von Spinzuständen in eine Gleichgewichtsverteilung relaxieren und zusätzlich zu einer Dephasierung der Spins führen¹³. Das Konzept der drei wichtigsten und meist diskutierten Mechanismen der Spinrelaxation, die nach Elliott und Yafet, D'yakonov und Perel' und nach Bir, Aronov und Pikus benannt sind, wird im Folgenden erläutert. Die Spinrelaxation aufgrund von Hyperfein-Wechselwirkung [31] bleibt unbehandelt, da dieser Mechanismus für die in dieser Arbeit betrachteten Systeme nicht von Bedeutung ist. Er wird erst wichtig, wenn man die Dimension der Quantenstruktur weiter reduziert, z. B. in Quantenpunkten (zur Erläuterung siehe Ref. [139]). Auch die sogenannte *magnetische Streuung*, d. h. Streuung von Elektronen im Leitungsband an magnetischen Störstellen durch Austausch-Wechselwirkung [34], wird nicht diskutiert.

1.4.1 Der Elliott-Yafet-Mechanismus

Die Spinrelaxation durch den Elliott-Yafet-(EY) Mechanismus [32, 133] beruht auf einem Zusammenspiel der Spin-Bahn-Wechselwirkung mit einem beliebigen Streumechanismus, z. B. der Streuung an Störstellen oder Phononen. Durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung kommt es bei endlichem \mathbf{k} zu einer Mischung von Spin-up $|\uparrow\rangle$ und Spin-down $|\downarrow\rangle$ Zuständen, d. h. die Elektronenzustände im Leitungsband sind keine Eigenzustände zum Spinoperator $\hat{\sigma}$ mehr. In einer 2D-Halbleiterstruktur haben die Wellenfunktionen von Spin-up und Spin-down Elektronen beim Wellenvektor \mathbf{k} daher die Form [49]

$$\psi_{+,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [u_{\uparrow\mathbf{k}}(z) \mathbf{s} + v_{\downarrow\mathbf{k}}(z) \mathbf{p}] \quad (1.49)$$

und

$$\psi_{-,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [u_{\downarrow\mathbf{k}}(z) \mathbf{s} + v_{\uparrow\mathbf{k}}(z) \mathbf{p}] , \quad (1.50)$$

wobei \mathbf{r} der Ortsvektor in der Ebene der 2D-Halbleiterstruktur und $c_{\mathbf{k}}$ ein Normierungsfaktor ist. Die Symbole \mathbf{s} und \mathbf{p} beschreiben s - bzw. p -artige Blochfunktionen. Die Ausdrücke $u_{\uparrow/\downarrow\mathbf{k}}(z)$ und $v_{\uparrow/\downarrow\mathbf{k}}(z)$ sind die Enveloppen Funktionen aus dem Leitungs- bzw. Valenzband. Anschaulich gesprochen führt die Spin-Bahn-Wechselwirkung in einer 2D-Halbleiterstruktur zu einer Mischung von s -artigen Elektronenzuständen aus dem Leitungsband mit p -artigen Zuständen aus dem Valenzband mit entgegengesetzten Spin [2]. Wir haben diese gemischten Spinzustände mit $+$ ($-$) indiziert, wenn der s -artige Elektronenzustand einem Spin-up (-down) Zustand entspricht. Es ist trotzdem gerechtfertigt von Spin-up und Spin-down Zuständen zu sprechen, da die Beimischung der p -artigen Valenzbandzustände sehr klein ist [139].

¹³In der Literatur werden die vorgestellten Mechanismen nur unter dem Begriff der „Spinrelaxation“ verwendet. Sie führen aber auch zu einer Spindphasierung. Wir schließen uns hier der üblichen Sprechweise an, wollen aber betonen, dass wir im Begriff der Spinrelaxation implizit auch die Spindphasierung verstehen.

Berechnet man mit den Zuständen aus Glg. (1.49) und (1.50) Streumatrixelemente für spinerhaltende¹⁴ Streumechanismen, z. B. die Streuung an Störstellen oder Phononen, so ergibt sich für $\mathbf{k} \neq 0$ eine endliche Übergangswahrscheinlichkeit von einem (quantenmechanisch nicht reinen) Spin-up Zustand $\psi_{+, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ in einen (quantenmechanisch nicht reinen) Spin-down Zustand $\psi_{-, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$, was als *Spinflip*-Streuung interpretiert werden kann. Unter Verwendung verschiedener Näherungen lässt sich aus dem Streumatrixelement ein Zusammenhang zwischen der Spinrelaxationszeit τ_{SR} und der Impulsrelaxationszeit τ_p angeben [3]

$$\tau_{\text{SR}}|_{\text{EY}} \sim \tau_p , \quad (1.51)$$

der charakteristisch für den EY-Mechanismus ist. Die Impulsrelaxationszeit τ_p wird gewöhnlich durch phänomenologische oder semiklassische Modelle oder experimentell [73] für die zu untersuchenden Streumechanismen bestimmt. Wie man an Glg. (1.51) erkennt, steigt die Effektivität des EY-Mechanismus mit der Häufigkeit der Streuung an. Darüber hinaus ist die Rate der Spinrelaxation invers proportional zum Quadrat der Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband [2], d. h. die Effektivität des Mechanismus nimmt weiter zu, wenn die Bandlücke kleiner und damit die Zumischung der Valenzbandzustände stärker wird. Dies bedeutet, dass die Spinrelaxation nach Elliott-Yafet in 2D-Halbleitersystemen mit kleiner Bandlücke zwischen Leitungs- und Valenzband und kurzer Impulsrelaxationszeit wichtig ist.

Vor kurzem wurde experimentell eine Variation des hier erläuterten EY-Mechanismus entdeckt und phänomenologisch erklärt [26]. In dieser Variante stellen die Spinzustände eine Mischung aus den Zuständen des untersten und nächsthöheren Leitungsbandes dar. Als alternative Erklärung dieser Ergebnisse wäre es auch denkbar, dass die Mischung der Spinzustände nur aus Spinzuständen des untersten Leitungsbandes besteht [124].

1.4.2 Der D'yakonov-Perel'-Mechanismus

Ein weiterer Spinrelaxationsmechanismus, der durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung hervorgerufen wird, ist der sogenannte D'yakonov-Perel'-DP Mechanismus [29, 30]. Im Unterschied zum EY-Mechanismus beruht er nicht auf dem Effekt der Mischung der Zustände, sondern tritt nur in Systemen ohne Inversionssymmetrie auf, d. h. er ist eng verknüpft mit den BIA- und SIA-Spin-Bahn-Termen.

Wie bereits beschrieben, lässt sich der Spin-Bahn-Term in Systemen ohne Inversionssymmetrie in Form von Glg. (1.22) darstellen. Der Spin-Bahn-Term enthält ein \mathbf{k} -abhängiges Magnetfeld, das zu einer Präzession des Spins der Ladungsträger mit der Frequenz $|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$ führt. Darauf aufbauend kann der DP-Mechanismus qualitativ verstanden werden¹⁵. Die Dynamik der einzelnen Spins im System ist zum einen durch die Präzession des Spins um das effektive Magnetfeld als auch durch

¹⁴Spinerhaltend bezieht sich dabei auf die Situation ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung.

¹⁵Es ist zu beachten, dass die Spinpräzession im DP-Mechanismus oftmals in Analogie zur Larmor-Präzession interpretiert wird. Dies ist nicht gerechtfertigt, da ein externes homogenes Magnetfeld *per se* zu einer *makroskopischen* Spinpolarisation führt, während der Hamiltonian aus Glg. (1.22) die Spinpolarisation nicht ändert.

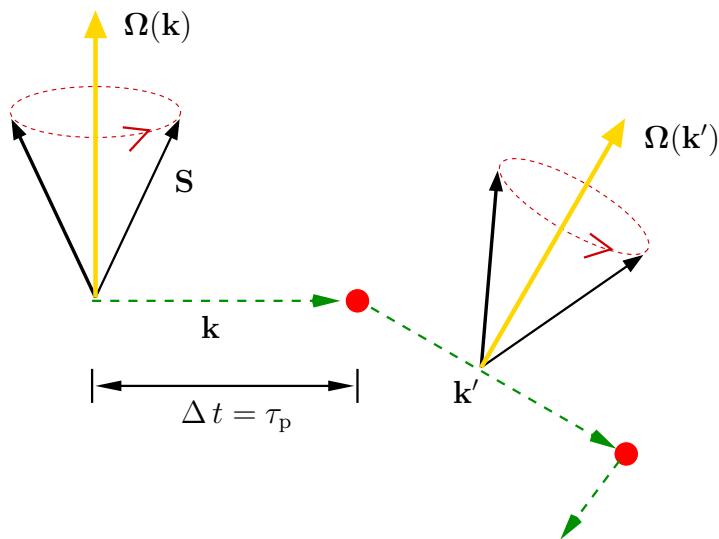


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung der Spindynamik in einem Halbleitersystem ohne Inversionssymmetrie. Der Spin des Elektrons \mathbf{S} präzidiert um das effektive Magnetfeld $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$. Gleichzeitig bewegt sich das Elektron mit dem Impuls \mathbf{k} . Nach dem Zeitintervall Δt , das der Impulsstreuzeit τ_p entspricht, wird das Elektron gestreut. Aufgrund der Streuung ändert sich der Impuls des Elektrons *und* das effektive Magnetfeld $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$. Dies führt zu einer Änderung sowohl der Präzessionsrichtung als auch der Präzessionsgeschwindigkeit.

die in Halbleitern vorhandene Impulsstreuung gegeben, wie in Abb. 1.4 schematisch dargestellt ist. Da das effektive Magnetfeld vom Wellenvektor \mathbf{k} abhängig ist, ändert sich bei der Streuung neben dem Impuls des Elektrons auch die Richtung und Stärke des effektiven Magnetfelds, um das der Spin des Elektrons präzidiert. Die relevante Zeitskala ist daher bestimmt durch die Impulsstreuzeit τ_p und durch die Präzessionsgeschwindigkeit, die von $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ abhängt. Man unterscheidet bezüglich dieser Zeitskalen zwei Fälle. Der erste Fall entspricht der Bedingung

$$\tau_p \Omega \geq 1 , \quad (1.52)$$

wobei Ω die über \mathbf{k} gemittelte Präzessionsfrequenz darstellt. In diesem Fall können die Elektronenspins einen vollen Präzessionszyklus durchlaufen, bevor sie gestreut werden. Der Gesamtspin des Elektronenensembles dephasiert dann aufgrund der Inhomogenität von $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$. Dieser Prozess ist reversibel und die Spinrelaxationszeit τ_{SR} ist proportional zur Breite der Verteilung von $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ [48]. Der Spinrelaxationsmechanismus nach D'yakonov-Perel' wird durch den zweiten Fall

$$\tau_p \Omega \leq 1 \quad (1.53)$$

beschrieben, der als *motional narrowing* bezeichnet wird. Im Unterschied zum ersten Fall kann der Spin der Elektronen zwischen zwei Streuprozessen keinen vollen Präzessionszyklus durchlaufen, vielmehr entspricht dieser Fall der Spinpräzession in einem fluktuierenden Magnetfeld. Im Regime des *motional narrowing* lässt sich die

Spinrelaxationszeit mit dem Modell eines *random walk* des Spins¹⁶ abschätzen [29]. Zwischen zwei Streuereignissen kann sich der Spin um den Winkel $\varphi = \Omega \tau_p$ drehen. Nach der Zeit t ist der Erwartungswert des Quadrats des Drehwinkels $\langle (\Delta \varphi)^2 \rangle$ direkt proportional zur Anzahl der random walk Schritte t/τ_p multipliziert mit dem Quadrat der Schrittweite $(\Omega \tau_p)^2$

$$\langle (\Delta \varphi)^2 \rangle \sim \Omega^2 \tau_p t . \quad (1.54)$$

Die Spinrelaxationszeit τ_{SR} ist durch die Bedingung $\langle (\Delta \varphi)^2 \rangle \sim 1$ für $t = \tau_{SR}$ definiert. Dies ergibt den für DP-Spinrelaxation charakteristischen Zusammenhang zwischen Spin- und Impulsrelaxationszeit

$$\frac{1}{\tau_{SR}} \sim \Omega^2 \tau_p . \quad (1.55)$$

Für die Spinrelaxation nach D'yakonov und Perel' gilt damit, dass die Spinrelaxationszeit steigt, je häufiger die Spins gestreut werden. Anschaulich bedeutet dies, dass der Spin dem häufigen und schnellen Wechsel des Magnetfelds nicht mehr „folgen“ kann und somit in seiner ursprünglichen Orientierung „verharrt“.

Eine formale Herleitung der DP-Spinrelaxation beruht auf dem *Spindichtematrixformalismus* für das 2×2 System der Elektronen im Leitungsband eines Halbleiters oder einer 2D-Halbleiterstruktur. Ausgangspunkt der Herleitung ist ein mikroskopisches Modell, das durch den Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SB} + \mathcal{H}_{Streu}$$

beschrieben wird, der den Effektivmassen-Hamiltonian \mathcal{H}_0 , die Spin-Bahn-Wechselwirkung \mathcal{H}_{SB} und spinerhaltende Streumechanismen \mathcal{H}_{Streu} enthält. Dieses Modell wird durch phänomenologische Annahmen bzgl. der Streuung vereinfacht und die Spinrelaxationsraten werden für einen quasi-stationären Zustand berechnet. Eine detaillierte Herleitung findet man z. B. in Ref. [89] oder [3].

Im Rahmen der Herleitung werden die Spinrelaxationszeiten bzw. deren Abhängigkeit von den Spin-Bahn-Parametern nur für die Grenzfälle tiefer und hoher Temperaturen angegeben [52]. Dieser Mangel wurde vor kurzem behoben, indem die phänomenologische Beschreibung der Streuung die Temperaturabhängigkeit verschiedener Streumechanismen berücksichtigt und in die ursprüngliche Herleitung der DP-Spinrelaxation eingesetzt wurde [53]. Als mögliche spinerhaltende Streumechanismen wurden diejenigen berücksichtigt, deren Impulsstreuzeit aus Transportmessungen bestimmt werden kann, d. h. Streuung an ungeladenen oder ionisierten Störstellen (schwach oder stark abgeschirmt) und an akustischen oder optischen Phononen (polar oder durch ein Deformationspotenzial verursacht). Zusätzlich zu diesen Streumechanismen kann DP-Spinrelaxation bei tiefen Temperaturen auch durch *direkte Coulomb-Streuung* zwischen Elektronen verursacht werden [40, 41, 42].

Generell ist der DP-Mechanismus in Halbleitern oder 2D-Halbleiterstrukturen ohne Inversionssymmetrie über einen weiten Temperaturbereich der wichtigste Mechanismus für die Spinrelaxation. Er dominiert in undotierten und n -dotierten Systemen, wenn die Bedingung des *motional narrowing* erfüllt ist [139].

¹⁶In diesem Zusammenhang wird oftmals auch das Modell der *Spindiffusion* benutzt.

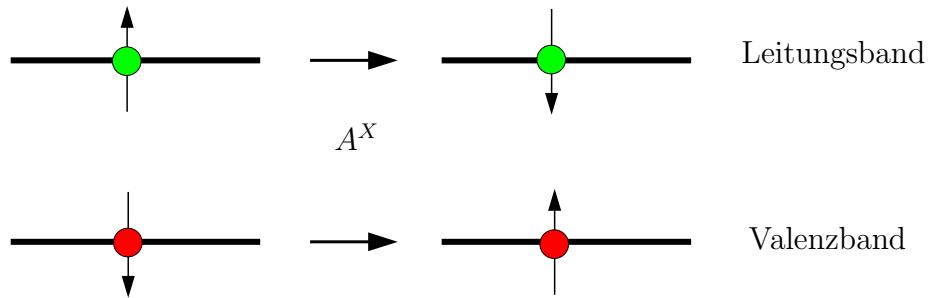


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung eines Spinflip-Prozesses aufgrund des BAP-Mechanismus. Der Ausgangszustand ist gegeben durch einen Spin-up Zustand im Leitungsband und einen Spin-down Zustand im Valenzband. Im Stoßprozess kommt es durch die Austausch-Wechselwirkung A^X zu einem simultanen Spinflip im Leitungs- und im Valenzband.

1.4.3 Der Bir-Aronov-Pikus-Mechanismus

Der Spinrelaxationsmechanismus nach Bir, Aronov und Pikus (BAP) setzt die Existenz von freien Löchern voraus und tritt daher nur in p -dotierten Halbleitern und 2D-Halbleiterstrukturen auf [15]. Er hängt im Unterschied zum EY- und DP-Mechanismus *nicht* von der Spin-Bahn-Wechselwirkung ab, sondern ist durch die *Coulomb-Austausch*-Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern mit entgegengesetztem Spin bestimmt. Der Hamiltonian für diese Wechselwirkung lässt sich schreiben als

$$\mathcal{H} = A^X \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \delta(\mathbf{r}) ,$$

mit dem Elektronenspinoperator \mathbf{S} , dem Lochspinoperator \mathbf{J} und dem Vorfaktor A^X , der proportional zum Matrixelement der Coulomb-Austausch-Wechselwirkung zwischen Zuständen im Leitungs- und Valenzband ist. Der Vektor \mathbf{r} beschreibt die relative Lage der Stoßpartner Elektron und Loch. Bei einer solchen Streuung kommt es zu einem gleichzeitigen Spinflip von einem Elektron im Leitungsband und einem Loch im Valenzband, wie in Abb. 1.5 schematisch dargestellt. Beschränkt man die Betrachtung auf das Leitungsband und mittelt über das Ensemble der Spins, so erhält man effektiv eine Spinrelaxation. Die Wahrscheinlichkeit für einen Spinflip bei der Streuung hängt dabei vom Zustand des beteiligten Lochs ab, d. h. die Spinrelaxationszeit ist unterschiedlich in einem System mit freien Löchern und einem System mit Löchern, die an Akzeptoren gebunden sind. Darüber hinaus ändert sich die Effektivität des Streumechanismus in Abhängigkeit vom Verhältnis der Elektronengeschwindigkeit zur Lochgeschwindigkeit und dem Grad der Entartung des Lochzustandes. Je nach System ergeben sich unterschiedliche Ausdrücke für die Spinrelaxationszeiten aufgrund des BAP-Mechanismus. Für einige Grenzfälle sind die Gleichungen für die BAP-Spinrelaxationszeiten in Abhängigkeit der Systemparameter in [2] oder [139] angegeben.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass im Allgemeinen drei Spinrelaxationsmechanismen (DP, EY und BAP) in Halbleitern und 2D-Halbleiterstrukturen auftreten können. Durch ihre unterschiedliche Abhängigkeit von den Systemparametern ist

eine Unterscheidung möglich.

Diese drei Mechanismen und die entsprechenden Zerfallszeiten werden im folgenden Kapitel in Form einer mikroskopischen Theorie der Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen basierend auf dem Dichtematrixformalismus beschrieben. Dies macht dann eine Interpretation der Zerfallszeiten im Kontext der Bloch-Gleichungen möglich.

KAPITEL 2

Spindynamik in Halbleiter-Quantenstrukturen

In diesem Kapitel präsentieren wir die Erweiterung der Bloch-Gleichungen zur mikroskopischen Beschreibung von Spindynamik in 2D-Halbleiterstrukturen. Als erster Schritt wird eine dafür geeignete Basis bestimmt und die kohärente Dynamik untersucht. Im Rahmen des Dichtematrixformalismus diskutieren wir dann die Ladungsträger-Phonon-Streuung, die Coulomb-Streuung und die Streuung an nichtmagnetischen Störstellen. Zum Abschluss werden die Ergebnisse der erweiterten Bloch-Gleichungen durch eine Basistransformation mit den experimentellen Observablen verglichen.

2.1 Die kohärente Spindynamik im Dichtematrixformalismus

In diesem Abschnitt wollen wir uns auf die *kohärente* Einteilchen-Dynamik beschränken, d. h. wir untersuchen nur die Dynamik aufgrund der kinetischen Beiträge im Hamiltonian. Es existieren verschiedene Möglichkeiten für die Wahl der Basis der Spinzustände. Die Unterschiede zwischen der Basis der Zustände, wie sie bei der Interpretation von Experimenten benutzt wird, der *Spin-up/down Basis*, und der Basis unserer theoretischen Betrachtung, der *Eigenbasis*, und die sich ergebenden Konsequenzen werden diskutiert.

2.1.1 Darstellung in der Spin-up/down Basis

Für die Wahl einer Basis für Spinzustände in 2D-Halbleiterstrukturen bietet sich die Wachstumsrichtung (bzw. die z -Richtung) als Quantisierungsachse an. Wir bezeichnen diese Basis als *Spin-up/down Basis*, da der Spinzustand durch die Orientierung

parallel oder antiparallel zur z -Richtung bestimmt ist. Die z -Richtung entspricht in der Regel auch der Ausbreitungsrichtung des anregenden Lichtes. Die beiden möglichen Spinzustände werden mit den Symbolen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ dargestellt. Zur Beschreibung der Spindynamik mit dem Dichtematrixformalismus in dieser Basis beschränken wir uns auf das Subsystem der Elektronen im Leitungsband und erhalten ein Zwei-Niveau-System mit einer 2×2 Spindichtematrix der Form

$$\varrho_{ud}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ \varrho_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Die Einträge sind definiert als Erwartungswert eines fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperators entsprechend

$$\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) := \langle c_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) c_{\downarrow}(\mathbf{k}) \rangle, \quad (2.2)$$

wobei $c_{\uparrow/\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k})$ einen Zustand mit Spin-up/down beim Wellenvektor $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ ¹ erzeugt. Analoges gilt für den Vernichter $c_{\uparrow/\downarrow}(\mathbf{k})$. Die Zeitabhängigkeit der Operatoren wird impliziert. Die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Spin-up oder -down Zustands beim Wellenvektor \mathbf{k} ist durch die Diagonaleinträge in Glg. (2.1) gegeben, während die Nebendiagonaleinträge gemäß ANHANG A ein Maß für die *Spinkohärenz* darstellen. Der Anteil des Hamiltonians, der die *kohärente* Spindynamik beschreibt, ist aus dem kinetischen Einteilchen-Term und dem Spin-Bahn-Term zusammengesetzt und hat die Form

$$\mathcal{H}_{ud}|_{\text{koh}} = \sum_{\substack{\sigma \sigma' = \uparrow, \downarrow \\ \mathbf{k}'}} [\epsilon(\mathbf{k}') + \hbar \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}] c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}') c_{\sigma'}(\mathbf{k}'), \quad (2.3)$$

mit den Einteilchen-Energien $\epsilon(\mathbf{k})$, den Paulischen Spinmatrizen $\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}$ ² und dem effektiven Magnetfeld $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}')$. Wie im vorherigen Kapitel erläutert, ist $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}')$ ein dreikomponentiger Vektor, dessen z -Komponente für 2D-Halbleiterstrukturen gleich null ist. Man erkennt an Glg. (2.3), dass die Einteilchen-Energien im ersten Term spinentartet sind und die Spin-Bahn-Wechselwirkung, die zu einer Aufhebung der Entartung führt, im zweiten Term enthalten ist. Durch diesen bzw. durch die darin enthaltenen Paulischen Spinmatrizen bekommt der Hamiltonian Einträge auf der Nebendiagonalen. Bei Betrachtung des Spin-Bahn-Terms erkennt man, dass nur die DP-Spinrelaxation beschrieben werden kann, da keine Zumischung von p -artigen Zuständen aus dem Leitungsband berücksichtigt wird, die Voraussetzung für den EY-Mechanismus ist. Der BAP-Mechanismus könnte durch Hinzunahme des Lochsystems in die Betrachtung integriert werden.

¹Wir werden im Folgenden die Indizierung des *in-plane* Wellenvektors mit dem Symbol $||$ unterlassen, da wir uns auf 2D-Halbleiterstrukturen beschränken.

²Die Paulischen Spinmatrizen sind definiert als [101]:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die kohärente Dynamik im System ist entsprechend der Liouville-Gleichung gegeben durch die Bewegungsgleichungen (EOM³)

$$\partial_t \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar} \left[\Omega_x(\mathbf{k}) \Im\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} - \Omega_y(\mathbf{k}) \Re\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} \right] \quad (2.4)$$

$$\partial_t \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) = +\frac{1}{\hbar} \left[\Omega_x(\mathbf{k}) \Im\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} - \Omega_y(\mathbf{k}) \Re\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} \right] \quad (2.5)$$

$$\partial_t \varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\hbar} \left[i\Omega_x(\mathbf{k}) - \Omega_y(\mathbf{k}) \right] \left[\varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \right]. \quad (2.6)$$

Für die i -te Komponente des effektiven Magnetfeldes wurde die Abkürzung $\Omega_i(\mathbf{k})$ eingeführt. Der Realteil (Imaginärteil) einer Variable x wird im Folgenden durch $\Re\{x\}$ ($\Im\{x\}$) symbolisiert. Wie man an Glg. (2.4) - (2.6) erkennt, führt die Spin-Bahn-Wechselwirkung zu einer Kopplung der Diagonal- an die Nebendiagonaleinträge der Dichtematrix und umgekehrt. Diese Kopplung entspricht der Präzession der Spins um das effektive Magnetfeld der Spin-Bahn-Wechselwirkung und stellt die Ausgangssituation für den DP-Mechanismus dar. Ohne die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist wegen der entarteten Eigenenergien keine Dynamik im System vorhanden, was zu zeitlich konstanten Einträgen in der Dichtematrix führt.

Vergleicht man die EOM (2.4) - (2.6) mit den Bloch-Gleichungen für das Elektron-Loch-System (1.40) - (1.42), so stellt man Unterschiede fest. Da in den Glgn. (2.4) - (2.6) keine optische Anregung enthalten ist, müssen zum Vergleich in den Glgn. (1.40) - (1.42) die Terme proportional zu $P_{cv}(\mathbf{k})$ gleich null gesetzt werden. Für die Bloch-Gleichungen des Zwei-Niveau-Systems gilt dann, dass die Diagonaleinträge der Dichtematrix konstant sind und nur das Nebendiagonalelement zeitlich variiert. Es ist daher nicht gerechtfertigt, den wohldefinierten Formalismus der Bloch-Gleichungen auf die EOM in der Spin-up/down Basis anzuwenden. Da es unser Ziel ist, eine mikroskopische Theorie der Spindynamik, basierend auf dem Konzept der Bloch-Gleichungen, herzuleiten, ist die Basis so zu wählen, dass die Struktur der Bloch-Gleichungen, wie sie in den Glgn. (1.40) - (1.42) gegeben sind, formal reproduziert wird. Die dafür geeignete Darstellung liefert die *Eigenbasis*.

2.1.2 Darstellung in der Eigenbasis

Es kennzeichnet die Eigenbasis in Systemen mit Spin-Bahn-Wechselwirkung, dass der kinetische Anteil des Hamiltonians im Gegensatz zur Spin-up/down Basis *diagonal* ist. Da wir in der mikroskopischen Theorie der Spindynamik auch die spinselektive optische Anregung vom Valenz- ins Leitungsband berücksichtigen wollen, betrachten wir ein System, das aus dem obersten Leitungsband mit Spinquantenzahl $m_c = \pm 1/2$ und den beiden obersten Valenzbändern mit Spinquantenzahl $m_v = \pm 3/2$ und $m_v = \pm 1/2$ besteht⁴ (siehe Abb. 1.3). Es ist folglich notwendig,

³EOM = *equations of motion*

⁴Konsequenterweise müsste man hier von *Pseudospinzuständen* [35] sprechen, da eine Trennung des Spins und der orbitalen Bewegung nicht mehr möglich ist. In den folgenden Abschnitten, die die Dynamik in der Eigenbasis beschreiben, werden die Begriffe „Spin“ und „Pseudospin“ aber synonym verwendet.

den 2×2 (4×4) Hamiltonian des Leitungsbandes (Valenzbandes) zu diagonalisieren. Nach der Diagonalisierung lässt sich der kinetische Anteil des Hamiltonians in zweiter Quantisierung schreiben als

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ m'_c = \pm \frac{1}{2}}} \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k}) + \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ m'_v = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}}} \epsilon_{m'_v}(\mathbf{k}) v_{m'_v}(\mathbf{k}) v_{m'_v}^\dagger(\mathbf{k}) . \quad (2.7)$$

Wie im vorangehenden Kapitel haben wir die Operatoren in Elektron- und Lochoperatoren aufgeteilt, die mit den entsprechenden Spinindizes (bzw. Pseudospinindizes) versehen sind. Die Aufhebung der Spinentartung führt zu *spinabhängigen* Eigenenergien $\epsilon_{m_c}(\mathbf{k})$ und $\epsilon_{m_v}(\mathbf{k})$, d. h. die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist implizit in den Eigenenergien enthalten. Dies überträgt sich auch auf die Teilchenzustände, die nicht mehr als Produkt aus einem Orts- und einem Spinanteil geschrieben werden können, sondern in Form der EFA dargestellt werden als

$$\Psi_{m_c, \mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{m'_c} \zeta_{m'_c}^{(m_c)}(\mathbf{k}, z) u_{m'_c}(\mathbf{x}) \quad (2.8)$$

$$\Psi_{m_v, \mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{m'_v} \zeta_{m'_v}^{(m_v)}(\mathbf{k}, z) u_{m'_v}(\mathbf{x}) , \quad (2.9)$$

wobei \mathbf{x} sowohl die räumlichen als auch die Spinkoordinaten des Zustandes enthält. Im Unterschied zur Darstellung der Wellenfunktionen in 2D-Halbleiterstrukturen in KAPITEL 1 sind die Bandkantenblochfunktionen $u_{m'_i}(\mathbf{x})$ und die Subbandfunktionen $\zeta_{m'_i}^{(m_i)}(\mathbf{k}, z)$ explizit vom Spin abhängig. Ein weiteres wichtiges Resultat der Diagonalisierung ist, dass der Spin nicht mehr bezüglich einer festen Quantisierungsachse klassifiziert werden kann, sondern vom Wellenvektor \mathbf{k} abhängt. Dies ist in Abb. 2.1 für ein System mit Rashba-Spin-Bahn-Kopplung dargestellt. Die Spindichtematrix hat in dieser Basis für das Sechs-Niveau-System folgende Struktur:

$$\boldsymbol{\varrho}_{\text{dia}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varrho}_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k}) & \boldsymbol{\varrho}_{m_c \bar{m}_v}(\mathbf{k}) \\ \boldsymbol{\varrho}_{m_c m_v}^*(\mathbf{k}) & \boldsymbol{\varrho}_{m_v \bar{m}_v}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} , \quad (2.10)$$

gegeben durch die 2×2 Spindichtematrix $\boldsymbol{\varrho}_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k})$ für das Leitungsband, die 4×4 Spindichtematrix für das Schwer- und Leichtlochband und die 2×4 (4×2) Dichtematrix $\boldsymbol{\varrho}_{m_c m_v}(\mathbf{k})$ [$\boldsymbol{\varrho}_{m_c m_v}^*(\mathbf{k})$], die mögliche Kopplungen zwischen Valenz- und Leitungsbandzuständen beschreibt. Um zu zeigen, dass die EOM der Spindichtematrix in der Eigenbasis die Struktur der Bloch-Gleichungen aus KAPITEL 1 reproduzieren, beschränken wir uns auf die Zustände im Leitungsband. Deshalb betrachten wir nur die Dynamik der Einträge der 2×2 Spindichtematrix $\boldsymbol{\varrho}_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k})$ detailliert, der Transfer auf das Lochsystem kann in Analogie durchgeführt werden. Die 2×2 Spindichtematrix hat in der Eigenbasis die Struktur

$$\boldsymbol{\varrho}_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) & \varrho_{m_c -m_c}(\mathbf{k}) \\ \varrho_{-m_c m_c}(\mathbf{k}) & \varrho_{-m_c -m_c}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} . \quad (2.11)$$

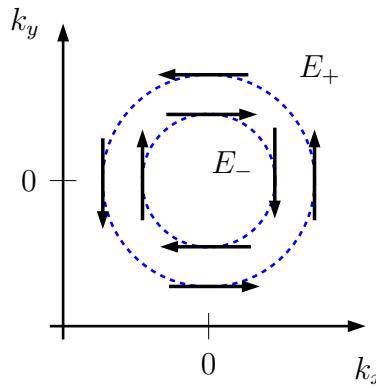


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Spinaufspaltung des Leitungsbandes und der Spinorientierung in einer 2D-Halbleiterstruktur unter Einfluss der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung. Gezeigt ist ein Isoenergieschnitt durch die Energiedispersion. Es bilden sich zwei geschlossene Energiekreise E_+ und E_- . An diesen Kreisen ist für einzelne Werte in der \mathbf{k} -Ebene die Spinorientierung eingezeichnet. Man erkennt, dass die Richtung des Spins von der Position in der \mathbf{k} -Ebene abhängt und nicht mehr bezüglich einer festen Quantisierungsachse definiert ist.

Die Diagonaleinträge beschreiben die Besetzungszahlen eines Zustandes mit Spin m_c beim Wellenvektor \mathbf{k} , während die Nebendiagonaleinträge die Kohärenz zwischen den beiden möglichen Spinzuständen mit Spin m_c und $-m_c$ beim Wellenvektor \mathbf{k} bestimmen. Es sei nochmals betont, dass in der Eigenbasis im Unterschied zur Spin-up/down Basis der Spin eines Zustandes vom Wellenvektor \mathbf{k} abhängt und somit die Dichtematrix aus Glg. (2.11) physikalisch andere Zustände beschreibt als die aus Glg. (2.1). Die kohärente Dynamik des Systems ist gegeben durch

$$\partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.12)$$

$$\partial_t \varrho_{-m_c -m_c}(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.13)$$

$$\partial_t \varrho_{m_c -m_c}(\mathbf{k}) = \frac{1}{i\hbar} [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m_c -m_c}(\mathbf{k}). \quad (2.14)$$

Die Glgn. (2.12) - (2.14) weisen exakt die gesuchte Struktur der Bloch-Gleichungen entsprechend den Glgn. (1.40) - (1.42) auf, wenn in diesen die optische Anregung gleich null gesetzt wird. Die Diagonaleinträge sind im kohärenten Regime konstant, der Nebendiagonaleintrag weist dagegen eine Dynamik auf, die durch die Energiedifferenz zwischen den beteiligten Niveaus bestimmt ist.

Die Präzession des Spins durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung, die in der Spin-up/down Basis die Kopplung zwischen Diagonal- und Nebendiagonaleinträgen der Dichtematrix bewirkt, ist verschwunden. Sie ist aufgrund der Diagonalisierung vollständig in den spinabhängigen Eigenenergien $\epsilon_{m_i}(\mathbf{k})$ enthalten. Darüber hinaus wird bei der Betrachtung der Wellenfunktionen der Zustände in Glgn. (2.8) und (2.9) klar, dass sie durch die Diagonalisierung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Kopplung auch die Beimischung von Zuständen aus anderen Subbändern enthalten. Dies bedeutet, dass die Darstellung in der Eigenbasis alle notwendigen Informationen enthält, um gleichzeitig DP- und EY-Spinrelaxation zu beschreiben. Die Hinzunahme der Coulomb-Austausch-

Wechselwirkung mit Lochzuständen komplettiert die Beschreibung der Spinrelaxation durch den BAP-Mechanismus.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass die Anwendung des Konzepts der Bloch-Gleichungen auf die Spindynamik in 2D-Halbleiterstrukturen die Verwendung der Eigenbasis bedingt. Dies hat den Vorteil, dass die (Spin-) Relaxations- und Dephasierungszeiten wohl definiert sind und formal angegeben werden können, wie in KAPITEL 1 für die Glgn. (1.47) und (1.48) erläutert wurde. Darüber hinaus hat man im Unterschied zur Spin-up/down Basis die Möglichkeit, alle drei wesentlichen Spinrelaxationsmechanismen gleichzeitig mit einer mikroskopischen Theorie zu beschreiben. Diese Theorie soll in den nächsten Abschnitten für verschiedene Streumechanismen hergeleitet werden.

2.2 Spinrelaxation und -dephasierung im Dichtematrixformalismus

2.2.1 Die optische Orientierung

In KAPITEL 1 wurde bei der Erläuterung der experimentellen Methoden zur Bestimmung von Spinrelaxations- und Spindephasierungszeiten bereits angesprochen, dass eine Nichtgleichgewichtsverteilung der Spins durch optische Orientierung erzeugt werden kann. Dafür ist eine Anregung mit zirkular polarisiertem Licht notwendig. Die optischen [102] und die Halbleiter-Bloch-Gleichungen [69] sind in ihrer ursprünglichen Form *a priori* nicht in der Lage, den Polarisationsfreiheitsgrad des anregenden Lichtfeldes in den Bewegungsgleichungen der Dichtematrix zu berücksichtigen. Dies wurde erst möglich durch eine Erweiterung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen in der Eigenbasis der Spinzustände [96]. Die Wechselwirkung der Ladungsträger mit dem Lichtfeld ist gegeben durch den Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{Licht}} = - \sum_{\substack{m'_c m'_v \\ \mathbf{k}}} [\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{m'_c m'_v}(\mathbf{k}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) v_{m'_v}^\dagger(\mathbf{k}) + \text{H. c.}] . \quad (2.15)$$

Die Abkürzung „H. c.“ steht für das hermitesch konjugierte des vorangehenden Ausdrucks in der Summe. Der erste Term in Glg. (2.15) entspricht einem senkrechten Übergang vom Valenz- ins Leitungsband. Der zweite Term beschreibt den umgekehrten Prozess. Das Dipolmatrixelement $\mathbf{d}_{m_c m_v}(\mathbf{k})$ ist in der Eigenbasis definiert als

$$\mathbf{d}_{m_c m_v}(\mathbf{k}) = e \sum_{m'_c m'_v} \int dz \zeta_{m'_c}^{(m_c)*}(\mathbf{k}, z) \mathbf{R}_{m'_c m'_v} \zeta_{m'_v}^{(m_v)}(\mathbf{k}, z) , \quad (2.16)$$

mit dem Matrixelement des in-plane Ortsvektors $\mathbf{R}_{m'_c m'_v}$

$$\mathbf{R}_{m'_c m'_v} = \int d\mathbf{x} u_{m'_c}^*(\mathbf{x}) \mathbf{r} u_{m'_v}(\mathbf{x}) . \quad (2.17)$$

Die Zeitabhängigkeit des anregenden elektrischen Feldes $\mathbf{E}(t)$ ist gegeben durch

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}(\omega) e^{i\omega t} + \mathbf{E}^*(\omega) e^{-i\omega t} , \quad (2.18)$$

$m_v =$	$+\frac{3}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
$m_c = +\frac{1}{2}$	$-\mathcal{A}(1 + ie^{\pm i\varphi})$	0	$\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{3}}(1 - ie^{\pm i\varphi})$	0
$m_c = -\frac{1}{2}$	0	$-\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{3}}(1 + ie^{\pm i\varphi})$	0	$\mathcal{A}(1 - ie^{\pm i\varphi})$

Tabelle 2.1: Tabelle der Matrixelemente für Übergänge zwischen Valenz- und Leitungsband bei Anregung mit beliebig polarisiertem Licht. Das Symbol \mathcal{A} ist definiert als $[E_0(\omega) R]/2$ mit $R = \langle S|x|X \rangle / \sqrt{2}$.

mit $\mathbf{E}^*(\omega) = \mathbf{E}(-\omega)$. Der Hamiltonian in Glg. (2.15) enthält sowohl den Spinfreiheitsgrad der Ladungsträger als auch den Polarisationsfreiheitsgrad des anregenden elektrischen Feldes. Die optischen Auswahlregeln der Übergänge zwischen Valenz- und Leitungsband lassen sich für eine beliebige Polarisierung der optischen Anregung berechnen. Betrachtet man in z -Richtung eingestrahltes Licht, so ist der komplexe Feldvektor gegeben durch

$$\mathbf{E}_\pm(\omega) = \frac{E_0(\omega)}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y e^{\pm i\varphi}). \quad (2.19)$$

\mathbf{e}_x und \mathbf{e}_y sind die Einheitsvektoren in der in-plane Ebene und der Index \pm gibt die Helizität des Lichtfeldes an. Über den Winkel φ wird der Polarisationsgrad des Feldes eingestellt, d. h. zirkular polarisiertes Licht ergibt sich für den Fall $\varphi = \pi/2$. Die optischen Auswahlregeln werden durch das Matrixelement $\mathbf{E}_\pm(\omega) \cdot \mathbf{R}_{m_c m_v}$ bestimmt und sind in Tabelle 2.1 angegeben.

Die Einteilchen-Dynamik (ETD) in der 2D-Halbleiterstruktur ohne Streuung ist durch den Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{ETD}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{Licht}} \quad (2.20)$$

beschrieben, mit \mathcal{H}_0 aus Glg. (2.7) und $\mathcal{H}_{\text{Licht}}$ aus Glg. (2.15). Wir beschränken uns für die folgenden Betrachtungen der Spindynamik auf das Leitungsband der Halbleiter-Quantenstruktur, d. h. wir berechnen nur die EOM für die Einträge der elektronischen 2×2 Spindichtematrix aus Glg. (2.11). Die EOM der Einträge der elektronischen Spindichtematrix haben wegen \mathcal{H}_{ETD} die Form

$$\partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{m_v} [\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{m_c m_v}(\mathbf{k}) P_{m_c - m_v}(\mathbf{k}) - \text{H. c.}] \quad (2.21)$$

$$\partial_t \varrho_{-m_c -m_c}(\mathbf{k}) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{m_v} [\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{-m_c m_v}(\mathbf{k}) P_{-m_c -m_v}(\mathbf{k}) - \text{H. c.}] \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c -m_c}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{i\hbar} [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m_c -m_c}(\mathbf{k}) \\ &\quad \frac{1}{i\hbar} \sum_{m_v} [\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{-m_c m_v}(\mathbf{k}) P_{m_c m_v}(\mathbf{k}) \\ &\quad - \mathbf{E}^*(t) \cdot \mathbf{d}_{m_c m_v}^*(\mathbf{k}) P_{-m_c m_v}^\dagger(\mathbf{k})]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Durch die Anregung mit dem Lichtfeld kommt es zu einer Kopplung zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband durch die *Interbandpolarisation* $P_{m_c m_v}(\mathbf{k}) = \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) v_{m_v}^\dagger(\mathbf{k}) \rangle$. Um die kohärente Einteilchen-Dynamik konsistent zu lösen, ist es daher notwendig, auch die Dynamik des Lochsystems, gegeben durch die Einträge in $\rho_{m_v \bar{m}_v}$ aus Glg. (2.10), und die der Kopplung, bestimmt durch die Einträge von $\rho_{m_c m_v}$ aus Glg. (2.10), zu betrachten. Es ergibt sich ein System von 20 gekoppelten Differentialgleichungen, die eine geschlossene Struktur besitzen und damit prinzipiell analytisch gelöst werden können. Da es aber nicht unser Ziel ist, die optische Dynamik der 2D-Halbleiterstruktur zu untersuchen, verweisen wir für die Bewegungsgleichung der Dichtematrizen des Lochsystems und der Interbandpolarisation auf Ref. [96].

Als Zwischenergebnis ist festzuhalten, dass die Erzeugung einer spinabhängigen Nichtgleichgewichtsverteilung von Ladungsträgern in einer 2D-Halbleiterstruktur mikroskopisch im Rahmen des Dichtematrixformalismus bzw. basierend auf den Bloch-Gleichungen beschrieben werden kann. Grund dafür ist die explizite Berücksichtigung des Spinfreiheitsgrades der Ladungsträger und der Polarisation des treibenden Lichtfeldes in den Bloch-Gleichungen.

Damit sind alle Anforderungen an den Formalismus zur Beschreibung des kohärenten Regimes erfüllt, nämlich eine Darstellung der Spin-Bahn-Wechselwirkung in einer zu den ursprünglichen Bloch-Gleichungen analogen Form und die mikroskopische Beschreibung der spinsensitiven optischen Anregung. Im nächsten Schritt müssen nun als Ursache der Spinrelaxation und -dephasierung die Streuprozesse in mikroskopischer Weise beschrieben werden. Dazu wird der Hamiltonian um einen Streuterm erweitert

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{Licht}} + \mathcal{H}_{\text{Streu}} . \quad (2.24)$$

Die Struktur von $\mathcal{H}_{\text{Streu}}$ und die sich ergebenden Modifikationen in den EOM der Dichtematrixeinträge hängen vom Streumechanismus ab und werden in den nächsten Abschnitten für die drei wichtigsten Streumechanismen in 2D-Halbleiterstrukturen untersucht.

2.2.2 Die Erweiterung der optischen Bloch-Gleichungen: Ladungsträger-Phonon-Streuung

Als ersten möglichen Streuprozess betrachten wir die Streuung der Ladungsträger an Phononen. Da wir dabei explizit den Spin der Ladungsträger berücksichtigen, aber Vielteilchen-Effekte vernachlässigen, entspricht dies der Erweiterung der *optischen Bloch-Gleichungen* [67]. Der Hamiltonian $\mathcal{H}_{\text{Streu}}$ für die Ladungsträger-Pho-

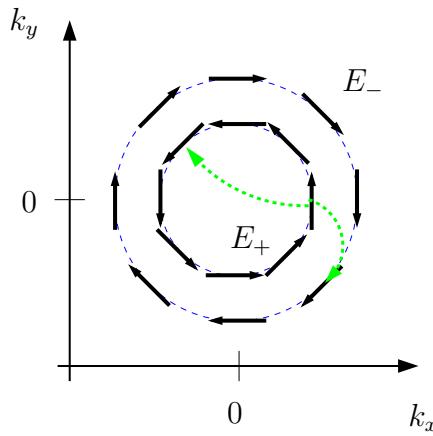


Abbildung 2.2: Skizze der Streuprozesse in der Eigenbasis für eine 2D-Halbleiterstruktur unter Einfluss der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die Darstellung entspricht der in Abb. 2.1. Die gestrichelten Pfeile symbolisieren Übergänge aufgrund von Streuung. Man erkennt, dass in der Eigenbasis die Streuung nicht nur den \mathbf{k} -Vektor des Elektrons ändert, sondern auch seinen Spin.

non-Wechselwirkung hat in der Eigenbasis die Form

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{phonon}} = & \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega(\mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}) b(\mathbf{q}) \\
 & + \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}} \left\{ \sum_{m'_c m''_c} \left[g_{m'_c m''_c}^e(\mathbf{q}) c_{m''_c}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k}') + \text{H. c.} \right] \right. \\
 & \left. + \sum_{m'_v m''_v} \left[g_{m'_v m''_v}^h(\mathbf{q}) v_{m''_v}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) v_{m'_v}(\mathbf{k}') + \text{H. c.} \right] \right\}. \tag{2.25}
 \end{aligned}$$

Der Operator $b(\mathbf{q})$ [$b^\dagger(\mathbf{q})$] ist ein bosonischer Vernichter (Erzeuger), d.h. er vernichtet (erzeugt) ein Phonon mit dem Wellenvektor \mathbf{q} . Die erste Zeile von Glg. (2.25) beschreibt den kinetischen Anteil der Phononen mit der Phononendispersion $\omega(\mathbf{q})$, durch die die Art der Phononen (z. B. akustische oder optische) spezifiziert wird. Die Wechselwirkung der Phononen mit den Elektronen ist in der zweiten Zeile von Glg. (2.25) formuliert. Der erste Term entspricht einem Prozess, bei dem ein Phonon absorbiert und somit ein Elektron vom Wellenvektor \mathbf{k} zum Wellenvektor $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ gestreut wird. Aufgrund der Formulierung in der Eigenbasis führt dies durch die Verknüpfung von Spin und Wellenvektor gleichzeitig zu einer Änderung des Spinzustands, d. h. der Spinindex wechselt ebenfalls von m'_c zu m''_c . Die Wahl der Eigenbasis führt außerdem dazu, dass das Wechselwirkungsmatrixelement $g_{m'_c m''_c}^e(\mathbf{q})$ spinabhängig wird und entspricht ebenfalls der Tatsache, dass jede Änderung des Wellenvektors eines Teilchens äquivalent zu einer Änderung des Spinzustands ist. Dies ist in Abb. 2.2 schematisch dargestellt. Die quantitative Struktur des Wechselwirkungsmatrixelements ist bestimmt durch die Art des Phonons. Der mit H. c. abgekürzte Term

beschreibt den Streuprozess unter Emission eines Phonons mit der entsprechenden Struktur. Die dritte Zeile beschreibt die phononische Wechselwirkung für das Lochsystem mit den analogen Ausdrücken für die Streuprozesse unter Absorption bzw. Emission eines Phonons.

Für die sich durch $\mathcal{H}_{\text{phonon}}$ ergebende Dynamik beschränken wir uns wieder auf das elektronische Subsystem. Die EOM für das Lochsystem haben eine analoge Form. Die Streubeiträge in den EOM der Dichtematrixeinträge lassen sich schreiben als

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \varrho_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon}} = & \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left[g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \right. \\ & - g_{\bar{m}_c m'_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \\ & + g_{m_c m'_c}^{e*}(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \\ & \left. - g_{m'_c \bar{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) b^\dagger(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \right]. \quad (2.26) \end{aligned}$$

Die EOM der Diagonaleinträge der Spindichtematrix erhält man durch die Ersetzung von \bar{m}_c durch m_c , die der Nebendiagonaleinträge durch die Ersetzung mit $-m_c$. Die Hinzunahme der Elektron-Phonon-Streuung führt neben den Zwei-Punkt-Dichtematrizen $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ und $\varrho_{m_c -m_c}(\mathbf{k})$ zu zusätzlichen Beiträgen in den EOM in Form von *Drei-Punkt-Dichtematrizen*. Diese sind Erwartungswerte von zwei fermionischen und einem bosonischen Operator und werden im Fall der Wechselwirkung mit Phononen als *phonongestützte Dichtematrizen* bezeichnet [63].

Für eine exakte Lösung des gekoppelten Gleichungssystems ist es notwendig, die EOM der phonongestützten Dichtematrizen zu berechnen. Diese enthalten aber neben den schon bekannten Zwei- und Drei-Punkt-Dichtematrizen auch Vier-Punkt-Dichtematrizen, d. h. Erwartungswerte von zwei Fermi- und zwei Boseoperatoren. Das Gleichungssystem, das sich auf diese Weise ergibt, ist im Gegensatz zum kohärenten Regime nicht geschlossen. Man erhält eine unendliche Hierarchie von gekoppelten EOM, die nicht analytisch exakt gelöst werden kann.

Es existieren verschiedene Konzepte, dieses Problem näherungsweise zu lösen⁵. Wir benutzen das Konzept des *korrelations-basierten Abbruchs* [103]. Die Grundidee hinter dem Konzept ist, dass die Beiträge mit hohem Korrelationsgrad einen geringeren Einfluss auf die inkohärente Dynamik haben als solche mit einem kleineren Korrelationsgrad. Dies bedeutet, dass die Beiträge aufgrund der Drei-Punkt-Dichtematrizen einen größeren Einfluss auf die Dynamik haben als die der Vier-Punkt-Dichtematrizen. Um eine geschlossene Form der EOM zu erhalten, die die dominierenden Streubeiträge erfasst, ist es ausreichend die Beiträge der Drei-Punkt-Dichtematrizen zu berücksichtigen und die Hierarchie von EOM danach abzubrechen. Technisch bedeutet dies, dass die EOM der Drei-Punkt-Dichtematrizen be-

⁵Das Konzept des *dynamisch kontrollierten Abbruchs* [8, 9, 10, 7, 6] ist für unsere Zwecke nicht brauchbar. Ziel dieses Konzepts ist die exakte Berechnung der Dynamik bis zu einer festgelegten Ordnung der Suszeptibilität. Es lässt sich mathematisch zeigen, dass die Ordnung der zu berücksichtigenden Korrelationen durch die Ordnung der Suszeptibilität bestimmt ist. Die Anwendbarkeit des Konzepts ist aber auf das rein *kohärente* Regime beschränkt. Es wird daher zur Berechnung von kohärenter Ladungsträgerdynamik im Ultrakurzzeitbereich verwendet [7].

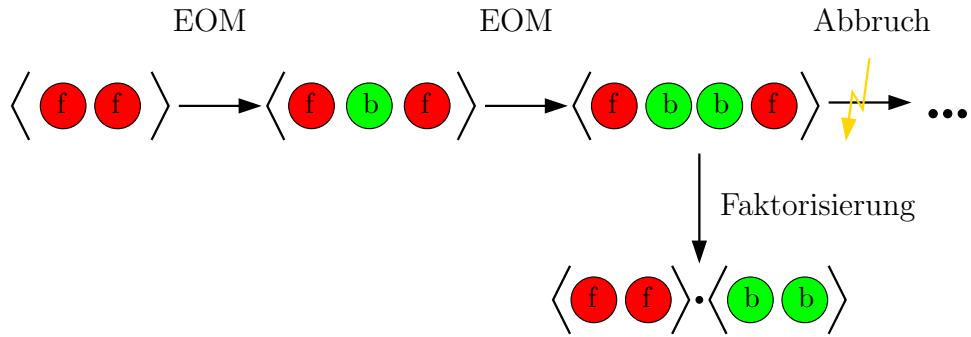


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des korrelations-basierten Abbruchschemas, in der die mit f (b) indizierten Symbole fermionische (bosonische) Operatoren darstellen. Die Berechnung der EOM führt von den Zwei-Punkt-Dichtematrizen zu immer höheren Korrelationen. Um die dominierenden Beiträge der Streuung in zweiter Bornscher Näherung zu betrachten, ist es ausreichend, die EOM der Drei-Punkt-Dichtematrizen zu berücksichtigen und danach die Hierarchie abzubrechen. Die in den EOM der Drei-Punkt-Dichtematrizen enthaltenen Vier-Punkt-Dichtematrizen werden nach makroskopischen Bestandteilen faktorisiert.

rechnet werden müssen und die darin enthaltenen Vier-Punkt-Dichtematrizen nach ihren makroskopischen Erwartungswerten faktorisiert werden [103], d. h. die Vier-Punkt-Dichtematrizen werden so in Zwei-Punkt-Dichtematrizen aufgespalten, dass diese entweder elektronischen Spindichten, Spinkohärenzen oder bosonischen Besetzungszahlen entsprechen. Man erhält damit alle Streubeiträge in zweiter Bornscher Näherung⁶. Das Schema des Abbruchs ist in Abb. 2.3 visualisiert. Die Anwendung des Schemas wird im Folgenden detailliert am Beispiel einer phonongestützten Dichtematrix erläutert werden. Die quantitative Form der restlichen Beiträge ist in ANHANG B gegeben.

Wir konzentrieren uns auf den Beitrag $\langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle$ und führen für die phonongestützten Dichtematrizen die Notation

$$s_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) := \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle$$

ein. Die EOM von $s_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})$ wird bestimmt durch \mathcal{H}_0 und $\mathcal{H}_{\text{phonon}}$. Die Wechselwirkung der Phononen mit der optischen Anregung (d. h. Beiträge proportional zu Drei-Punkt-Dichtematrizen, die aus einem Elektron-, einem Loch- und einem Bosseoperator bestehen) kann vernachlässigt werden, da der Energieabstand zwischen Leitungs- und Valenzband viel größer ist als die typischen Phononen-Energien. Die

⁶Vor kurzem wurde die Streuung im Bereich der Ladungsträgerdynamik auch in der sogenannten *vierten Bornschen Näherung* theoretisch [138] und experimentell [13] untersucht. Es zeigt sich aber, dass die dabei berücksichtigten höheren Korrelationen nur im Bereich der Ultrakurzzeitdynamik zu beobachtbaren Effekten führen. Für die Untersuchung der Spinrelaxation und -dephasierung spielen die Effekte dieser Zeitdomäne aber keine Rolle.

EOM von $s_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})$ ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
 i\hbar\partial_t s_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) = & [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
 & + \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v} \left[g_{\tilde{m}'_c m'_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{q}') b(\mathbf{q}') b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \right. \\
 & - g_{\tilde{m}_c \bar{m}_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}') b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}') \rangle \\
 & + g_{m'_c \bar{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{q}') b^\dagger(\mathbf{q}') b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \\
 & - g_{\tilde{m}'_c \bar{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}') c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}') \rangle \\
 & + g_{\tilde{m}'_c \bar{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}') c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}') c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \\
 & \left. - g_{\tilde{m}'_v \bar{m}_v}^h(\mathbf{q}) \langle v_{\tilde{m}_v}^\dagger(\mathbf{k}') c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}') c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \right]. \tag{2.27}
 \end{aligned}$$

An Glg. (2.27) wird nochmals das Hierarchieproblem aufgrund der Wechselwirkung deutlich. Die nicht-kohärente Dynamik von $s_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})$ ist durch Vier-Punkt-Dichtematrizen bestimmt.

Es ist das Ziel des Abbruchschemas, alle Streubeiträge zu erfassen, die bezüglich der Ordnung des Wechselwirkungsmatrixelements relevant für die zweite Bornsche Näherung sind. Die Streubeiträge in zweiter Bornscher Näherung sind immer proportional zu einem Produkt von zwei Wechselwirkungsmatrixelementen. In der Eigenbasis ist es möglich, eine weitere Unterteilung der Beiträge vorzunehmen, nämlich in diejenigen, die dem klassischen Boltzmann-Grenzfall entsprechen, und in solche, die über diesen Grenzfall hinausgehen. Wir leiten zuerst die Beiträge im Boltzmann-Grenzfall her. Dafür können die Abbruchregeln eingeschränkt werden:

1. Es werden nur Beiträge der Faktorisierung berücksichtigt, die makroskopischen Erwartungswerten entsprechen.
2. Nur die Terme, die zu Betragsquadern der Wechselwirkungsmatrixelemente in Glg. (2.26) führen, werden berücksichtigt.

Regel (1) führt dazu, dass die Zeilen zwei und drei in Glg. (2.27) verschwinden, da sie in den Vier-Punkt-Dichtematrizen ein Produkt aus zwei bosonischen Vernichtern enthalten, was keinen makroskopischen Beitrag liefert. Die zweite Regel hat zur Folge, dass der Beitrag der letzten Zeile in Glg. (2.27) verschwindet, da er zu einem Beitrag führen würde, der proportional zum Produkt von Wechselwirkungsmatrixelementen aus dem Elektronen- und Lochsystem ist. Dies entspricht einer Kopplung von Leitungs- und Valenzband durch Phononen, die aufgrund des Energieabstandes zwischen den beiden Bändern nicht möglich ist. Die restlichen Terme lassen sich durch die Anwendung der Regeln in Form der EOM

$$\begin{aligned}
 i\hbar\partial_t s_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})|_{\text{phonon1}} \approx & [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
 & + g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q}) \\
 & + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \tag{2.28}
 \end{aligned}$$

darstellen. Hier wurde die für die EOM von $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ relevante Ersetzung $\bar{m}_c = m_c$ gemacht.

Die Glg. (2.28) hat die charakteristische Struktur

$$\partial_t x(t) = -i\omega x(t) + y(t) , \quad (2.29)$$

mit der Inhomogenität $y(t)$. Um die gesuchten Streubeträge im Boltzmann-Grenzfall zu erhalten, muß die Gleichung integriert werden.

$$x(t) = x(t_0) e^{-i\omega(t-t_0)} + \int_0^{t-t_0} e^{-i\omega t'} y(t-t') dt' . \quad (2.30)$$

Die Integration ist rein formal, da das Ergebnis immer noch die Inhomogenität $y(t)$ enthält. Das Einsetzen von Glg. (2.30) in die ursprünglichen EOM wäre zwar formal richtig, man erhält damit aber anstelle des eigentlichen gekoppelten Systems von Differentialgleichungen ein System gekoppelter Integrodifferentialgleichungen. Um dies zu vermeiden, wendet man zwei weitere Näherungen, die *Markov* und die *adiabatische* Näherung, an. Die Markov Näherung entspricht der Annahme, dass $y(t)$ auf der Zeitskala der Oszillationen der Exponentialfunktion langsam variiert und damit vor das Integral gezogen werden kann. Dies bedeutet, dass im Bereich kleiner Zeiten phononassistierte Übergänge, die die Energie nicht erhalten, vernachlässigt werden [137, 64, 17]. Mit dieser Näherung lässt sich Glg. (2.30) überführen in [59]

$$x(t) \approx x(t_0) e^{-i\omega(t-t_0)} + \tilde{y}(t) \int_0^{t-t_0} e^{-i\omega t'} dt' , \quad (2.31)$$

mit dem langsam oszillierenden Anteil der Inhomogenitäten $\tilde{y}(t)$. Die *adiabatische* Näherung bedeutet, dass die Wechselwirkung, in diesem Fall die Elektron-Phonon-Streuung, adiabatisch angeschaltet wird, d. h. in Glg. (2.31) geht ω über in $\omega - i\eta$ mit der Bedingung $\eta \rightarrow 0$. Damit verschwindet für $t_0 \rightarrow -\infty$ der Einfluss anfänglicher Korrelation. Es ergibt sich als Endergebnis

$$x(t) = \left(-i\frac{\mathcal{P}}{\omega} + \pi\delta(\omega) \right) y(t) . \quad (2.32)$$

\mathcal{P} ist der Hauptwert. Die Gleichung für $s_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})$ lautet damit

$$\begin{aligned} s_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})|_{\text{phonon1}} &= \left[-\frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\ &\quad \left. - i\pi\delta(\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})) \right] \times \\ &\quad g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] . \end{aligned} \quad (2.33)$$

Das Einsetzen von Glg. (2.33) in die EOM des Diagonaleintrags liefert nach kurzer Umformung den Beitrag im Boltzmann Grenzfall

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, m'_c} |g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \delta[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \\ &\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \beta(\mathbf{q}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \right. \\ &\quad \left. - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \right\} , \end{aligned} \quad (2.34)$$

mit der phononischen Besetzungsichte $\beta(\mathbf{q}) = \langle b^\dagger(\mathbf{q}) b(\mathbf{q}) \rangle$. Wie aus der Struktur der Vier-Punkt-Dichetmatrix zu erwarten, entspricht Glg. (2.34) einem Streuprozess aus einem Anfangszustand beim Wellenvektor \mathbf{k} mit Spin m_c unter Absorption eines Phonons und einem Streuprozess in diesen Zustand unter Emission eines Phonons. Die Beiträge aufgrund der übrigen Vier-Punkt-Dichetmatrizen sind in ANHANG B aufgeführt.

Die Gesamtheit der Streubeiträge lässt sich abschließend schreiben als

$$\partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} = -\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p})\text{out}}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p})\text{in}}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] . \quad (2.35)$$

Die Terme, die einen Streuprozess aus dem bzw. in den betrachteten Zustand mit Wellenvektor \mathbf{k} und Spin m_c bewirken, wurden in den Symbolen $\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p})\text{out}}(\mathbf{k})$ bzw. $\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p})\text{in}}(\mathbf{k})$ zusammengefasst. Die Form von Glg. (2.35) entspricht der von Fermis Goldener Regel bzw. stellt die mikroskopische Formulierung dieser quantenmechanischen Regel dar. Die Struktur der Streuterme ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p})\text{out}}(\mathbf{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, m'_c} |g_{m'_c m_c}^{\text{e}}(\mathbf{q})|^2 \left\{ \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \right. \\ & [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \beta(\mathbf{q}) \\ & + \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\ & \left. [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 + \beta(\mathbf{q})] \right\} \quad (2.36) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p})\text{in}}(\mathbf{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, m'_c} |g_{m'_c m_c}^{\text{e}}(\mathbf{q})|^2 \left\{ \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \right. \\ & \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \\ & + \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\ & \left. \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \right\} . \quad (2.37) \end{aligned}$$

Auch diese Terme sind in Übereinstimmung mit Fermis Goldener Regel. In Glg. (2.37) und (2.36) sind alle möglichen Streuprozesse in und aus einem Zustand beim Wellenvektor \mathbf{k} mit dem Spin m_c in zweiter Bornscher Näherung enthalten. Sie lassen sich aufspalten in ein Produkt aus dem Betragsquadrat des Wechselwirkungsmatrixelements der Elektron-Phonon-Streuung, einer δ -Funktion, die die Energieerhaltung des Übergangs garantiert, und den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten für die Streuung unter Absorption oder Emission eines Phonons aus oder in den betrachteten Spinzustand. Die gesamte Elektron-Phonon-Streuung in zweiter Bornscher Näherung ist für den Diagonaleintrag der elektronischen Spindichetmatrix bestimmt durch Glg. (2.35) mit den Glgn. (2.36) und (2.37), d. h. für die Besetzungsahlen der Elektronen ist der Boltzmann-Grenzfall der Streuung äquivalent zur zweiten Bornschen Näherung. Dies ist beim Nebendiagonalelement $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$ nicht der Fall.

In Analogie zum Diagonalelement geben wir zuerst die EOM beschränkt auf die Streuung im Boltzmann-Grenzfall für den Beitrag aufgrund von $s_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})$

an

$$\begin{aligned}
\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} |g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\
& - i\pi \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \left. \right\} \times \\
& \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \beta(\mathbf{q}) \right. \\
& \left. + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) .
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Die Form von Glg. (2.38) entspricht genau der nach Glg. (2.32) zu erwartenden. Der vollständige Ausdruck für die Streubeiträge zur EOM des Nebendiagonalelements im Boltzmann-Grenzfall lässt sich kurz schreiben als

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} = \frac{1}{i\hbar} \Sigma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) . \tag{2.39}$$

Es wurde die phononische Selbstenergie $\Sigma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k})$ eingeführt. Sie kann in Real- und Imaginärteil aufgespalten werden entsprechend

$$\Sigma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) = \hbar \left[\Omega_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) - i\Gamma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) \right] . \tag{2.40}$$

Der Realteil $\Omega_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k})$ und der Imaginärteil $\Gamma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k})$ sind verknüpft über die Kramers-Kronig Relation. Die Streuung bzw. die Dephasierung des Nebendiagonalelements ist bestimmt durch den Imaginärteil der Selbstenergie. Dieser hat im Boltzmann-Grenzfall die Form

$$\begin{aligned}
\Gamma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) = & \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left(|g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \right. \\
& \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \right\} \\
& + |g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\
& \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 + \beta(\mathbf{q})] + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \right\} \\
& + |g_{m'_c - m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\
& \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \right\} \\
& + |g_{m'_c - m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\
& \left. \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 + \beta(\mathbf{q})] + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \right\} \right) .
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Die Struktur von Glg. (2.41) ist charakteristisch für Streuprozesse in der EOM des Nebendiagonalelements. Im Gegensatz zum Diagonalelement ergeben sich vier Beiträge zur Streuung entsprechend den vier phonongestützten Dichtematrizen aus Glg. (2.26), jeweils bestehend aus dem Betragsquadrat des Wechselwirkungsmatrixelements, der energieerhaltenden δ -Funktion und einer Kombination der fermionischen

und bosonischen Besetzungswahrscheinlichkeiten für Übergänge unter Emission oder Absorption eines Phonons.

Für das Nebendiagonalelement ist die Streuung in zweiter Bornscher Näherung noch nicht komplett im Boltzmann-Grenzfall enthalten. Um die zusätzlichen Streubeträge, die über den Boltzmann-Grenzfall hinausgehen, zu erfassen, müssen die Abbruchregeln leicht modifiziert werden: Nach der Faktorisierung der Vier-Punkt-Dichtematrizen werden in diesem Fall alle Beiträge berücksichtigt, die *nicht* zum Betragsquadrat des Wechselwirkungsmatrixelements in der ursprünglichen EOM von $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$ führen. Dies bedeutet für unser Beispiel $s_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})$ zusätzliche Beiträge in der EOM

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t s_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})|_{\text{phonon2}} \approx & [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ & - g_{-m'_c m_c}^{\text{e}*}(\mathbf{q}) \{ \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q}) \\ & + [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] [1 + \beta(\mathbf{q})] \} . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Die Anwendung der Markov und adiabatischen Näherung führt wie im Boltzmann-Grenzfall zu der finalen Gleichung für die phonongestützte Dichtematrix, die in die EOM des Nebendiagonalelements eingesetzt wird

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} g_{m'_c m_c}^{\text{e}}(\mathbf{q}) g_{-m'_c - m_c}^{\text{e}*}(\mathbf{q}) \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\ & + i\pi \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \left. \right\} \times \\ & \left\{ [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] [1 + \beta(\mathbf{q})] \right. \\ & \left. + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \end{aligned} \quad (2.43)$$

Die Gesamtheit der Streubeträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls lässt sich wieder in Form einer Selbstenergie schreiben als

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon2}} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \quad (2.44)$$

Der erste Unterschied im Vergleich zum Boltzmann-Grenzfall ist offensichtlich. In Glg. (2.44) wird die Summation nicht mehr innerhalb der Selbstenergie durchgeführt, sondern umfasst sowohl die Selbstenergie als auch den Nebendiagonaleintrag der Dichtematrix. Aufgrund der Dichtematrix $\varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ kommt es zu einer Kopplung von Nebendiagonaleinträgen bei unterschiedlichen \mathbf{k} Werten, wie sie für das Diagonalelement bereits im Boltzmann-Grenzfall vorhanden war. Die Selbstenergie $\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{q})$ kann formal in zwei Bestandteile aufgespalten werden

$$\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{q}) = \hbar \left[\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{q}) - i \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{q}) \right] , \quad (2.45)$$

wobei $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q})$ alle Beiträge enthält, die proportional zu einer δ -Funktion sind, während $\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q})$ die analogen Ausdrücke zusammenfasst, die proportional zu einem Hauptwert sind.

Jenseits des Boltzmann-Grenzfalls sind die Bestandteile der Selbstenergie nicht mehr durch das Kramers-Kronig Theorem verknüpft. Beide Teile sind im Allgemeinen komplexwertig, da sie Produkte von Wechselwirkungsmatrixelementen enthalten, die gerade nicht zu dem reellwertigen Betragsquadrat führen. Dies bedeutet, dass die Streuung jenseits des Boltzmann-Grenzfalls nicht mehr durch $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q})$ gegeben ist, sondern durch $\Im\{\sum_{\mathbf{q}} m'_c \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})\}$, der auch Hauptwerte enthält. Zur Darstellung der Struktur ist es aber hinreichend $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q})$ anzugeben

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q}) = & \frac{\pi}{\hbar} \left(g_{-m_c - m'_c}^e(\mathbf{q}) g_{m_c m'_c}^{e*}(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \right. \\ & \{[1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 + \beta(\mathbf{q})]\} \\ & + g_{-m_c - m'_c}^e(\mathbf{q}) g_{m_c m'_c}^{e*}(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\ & \{[1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 + \beta(\mathbf{q})]\} \\ & + g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) g_{-m'_c - m_c}^{e*}(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\ & \{[1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] [1 + \beta(\mathbf{q})] + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q})\} \\ & + g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) g_{-m'_c - m_c}^{e*}(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \times \\ & \left. \{[1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 + \beta(\mathbf{q})] + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q})\} \right). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Der Bestandteil $\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^{(e-p)}(\mathbf{q})$ ergibt sich formal durch die Ersetzung

$$\delta(x) \longrightarrow \frac{\mathcal{P}}{x}$$

aus Glg. (2.46). Wie man an Glg. (2.46) erkennt, ist die prinzipielle Struktur des Boltzmann-Grenzfalls erhalten geblieben. Die Streubeiträge entsprechen wiederum einem Produkt aus Wechselwirkungsmatrixelementen, energieerhaltender δ -Funktion (bzw. den energierenormierenden Hauptwerten) und den entsprechenden Besetzungswahrscheinlichkeiten. Der Unterschied zum Boltzmann-Grenzfall ergibt sich erst im Detail: Das Produkt der Wechselwirkungsmatrixelemente ist hier komplexwertig und die Diagonaleinträge der Spindichtematrix sind nun ausschließlich von \mathbf{k} abhängig. Diese Streubeiträge haben keine Entsprechung in den EOM der Diagonaleinträge der Spindichtematrix. Sie sind aber aus dem Bereich der Ladungsträgerdynamik bekannt und werden dort aufgrund der Verknüpfung von Nebendiagonaleinträgen mit verschiedenen \mathbf{k} als *Polarisationsstreuung* [64, 63] bezeichnet. Bisher wurden sie in der Beschreibung der Spindynamik bzw. der Spinrelaxation und -dephasierung nicht betrachtet, obwohl sie einen nicht vernachlässigbaren Streubeitrag in der EOM des Nebendiagonalelements der Dichtematrix darstellen [61].

Mit den Glgn. (2.35), (2.39) und (2.44) ist die Elektron-Phonon-Streuung in zweiter Bornscher Näherung vollständig beschrieben. Es ist im Rahmen der Bloch-Gleichungen möglich, formal die T_1 - und T_2 -Zeiten aus den mikroskopischen EOM zu bestimmen. Dafür orientieren wir uns an dem Konzept aus Ref. [45], in dem diese

Zeiten für ein optisch getriebenes Zwei-Niveau-System abgeleitet wurden. Dementsprechend ist die der T_1 -Zeit zugeordnete Zerfallsrate gegeben durch die Summe aller Streuraten des Diagonaleintrags der Dichtematrix. Die mit der T_2 -Zeit verbundene Zerfallsrate ist bestimmt durch den Imaginärteil der Selbstenergien des Nebendiagonalelements der Spindichtematrix. Dies führt zu den Ausdrücken

$$\frac{1}{T_{1,\mathbf{k}}} \Big|_{\text{e-p}} = [\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p}) \text{ in}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p}) \text{ out}}(\mathbf{k})] \quad (2.47)$$

$$\frac{1}{T_{2,\mathbf{k}}} \Big|_{\text{e-p}} = \Im \left\{ \Sigma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (2.48)$$

Im Unterschied zum spinlosen Zwei-Niveau-System ist der Spin in unserer Rechnung explizit enthalten und führt zu einer zusätzlichen Summation über die Spinquantenzahl⁷. Darüber hinaus sind durch die Verbindung von Spin und Wellenvektor die Zerfallsraten von \mathbf{k} abhängig, was durch den Index \mathbf{k} bei den Zeiten symbolisiert wird. Für eine detailliertere Diskussion ist es notwendig, die Streuprozesse in den EOM des Nebendiagonalelements auf den Boltzmann-Grenzfall zu beschränken, da dann die $T_{2,\mathbf{k}}$ -Zeit analytisch in Form von

$$\frac{1}{T_{2,\mathbf{k}}} = \Gamma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k}) \quad (2.49)$$

gegeben ist.

Trotz der formalen Ähnlichkeiten der mikroskopischen Ausdrücke zwischen der Ladungsträgerdynamik in einem optisch getriebenen Zwei-Niveau-System und dem hier betrachteten Spinsystem ergeben sich bei den Streuraten deutliche Unterschiede. Für das Spinsystem ist insbesondere die Relation $2T_{1,\mathbf{k}} = T_{2,\mathbf{k}}$ [45] nicht gültig. Die verschiedenen Streuraten des Diagonal- und Nebendiagonaleintrags der Dichtematrix weisen bis auf einen Vorzeichenwechsel in den Spinindizes eine eins-zu-eins Relation zwischen den einzelnen Beiträgen auf. Dies führt unter der Annahme einer kleinen Spinaufspaltung zu der Relation

$$T_{1,\mathbf{k}} \simeq T_{2,\mathbf{k}}. \quad (2.50)$$

Geht man insbesondere zu einem System *ohne* Spinaufspaltung über, d. h. $\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) = \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})$ ⁸, so wird die Relation (2.50) zu

$$T_{1,\mathbf{k}} = T_{2,\mathbf{k}}. \quad (2.51)$$

Diese Relationen für das Spinsystem stimmen mit der Argumentation von Ref. [35] für ein Zwei-Niveau-System überein, die besagt, dass sich T_1 - und T_2 -Zeiten im Allgemeinen erst signifikant unterscheiden ($T_1 \gg T_2$), wenn die Aufspaltung zwischen den Niveaus so groß ist, dass ein Abbau der Ungleichbesetzung nur durch Energiedissipation erreicht werden kann. Im Fall eines Zwei-Niveau-Systems, das

⁷In den Streutermen $\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p}) \text{ in}}(\mathbf{k})$, $\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{e-p}) \text{ out}}(\mathbf{k})$ und der phononischen Selbstenergie $\Sigma_{m_c - m_c}^{(\text{e-p})}(\mathbf{k})$ ist die Summation entsprechend den Gleichungen (2.37), (2.36) und (2.41) *implizit* enthalten.

⁸Dies entspricht einem Halbleitersystem *mit* Inversionssymmetrie.

den elektronischen Spinzuständen entspricht, ist somit obiger Zusammenhang zu erwarten. Betrachtet man die Situation, wenn die Spin-Bahn-Wechselwirkung „abgeschaltet“ ist und folglich Spin und orbitaler Freiheitsgrad entkoppelt werden, so hätte das zur Folge, dass die Abhängigkeit der Streuprozesse vom Spinfreiheitsgrad der Ladungsträger redundant wird und somit nur noch *spinerhaltende* Streuprozesse möglich sind. Als Konsequenz ergibt sich, dass die Nichtgleichgewichtsverteilung der Spins nicht mehr abgebaut werden kann, sondern nur noch eine Equilibrierung der Zustände im \mathbf{k} -Raum *innerhalb* der einzelnen Spinreservoirs erfolgt.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die Formulierung der Elektron-Phonon-Streuung in der Eigenbasis aufbauend auf dem Konzept der Bloch-Gleichungen eine streng mikroskopische Herleitung der T_1 - und T_2 -Zeiten erlaubt. Da in 2D-Halbleiterstrukturen die Elektronensysteme stets auch von Vielteilchen-Effekten beeinflusst werden, ist es wichtig, deren Effekte auf die kohärente und inkohärente Dynamik zu untersuchen.

2.2.3 Die Erweiterung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen: Coulomb-Streuung

Die Untersuchung von optisch angeregten Halbleitersystemen unter Verwendung des Konzepts der Bloch-Gleichungen wurde zum ersten Mal für ein Zwei-Niveau-System, bestehend aus Valenz- und Leitungsband, durchgeführt [69]. In dieser Beschreibung wurden Vielteilchen-Effekte in Form der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern berücksichtigt. Im Gegensatz zur Elektron-Phonon-Streuung führt die Coulomb-Wechselwirkung sowohl im *kohärenten* als auch im *inkohärenten* Regime zu Beiträgen in den EOM. Die so gewonnenen Gleichungen werden als *Halbleiter-Bloch-Gleichungen* (SBE⁹) bezeichnet [69]. Sie wurden ausgehend von Zwei-Niveau bzw. Zwei-Band-Systemen auf Multi-Band-Systeme für Halbleiterstrukturen unterschiedlicher Dimensionalität verallgemeinert (siehe Ref. [94] und die darin enthaltenen Referenzen). Die Anwendung der SBE blieb aber stets auf die Untersuchung der *spinlosen* Ladungsträgerdynamik beschränkt. Ein besonderes Augenmerk wurde dabei auf Ultrakurzzeitphänomene gelegt.

Im folgenden Abschnitt werden die SBE unter expliziter Berücksichtigung des Spinfreiheitsgrades der Ladungsträger erweitert. Die Erweiterung kann, wie oben ange deutet, in zwei Teile aufgespalten werden: Wir untersuchen zuerst den Einfluss der Vielteilchen-Effekte auf die kohärente Dynamik [96] und präsentieren darauf aufbauend die für die Spinrelaxation und -dephasierung relevanten Streubeträge aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung [66, 68].

Ausgangspunkt ist, wie im Fall der Elektron-Phonon-Wechselwirkung, das Sechs-Niveau-System. Der Hamiltonian der Coulomb-Wechselwirkung hat die Form [96]

$$\mathcal{H}_{\text{coul}} = \mathcal{H}_{\text{ee}} + \mathcal{H}_{\text{hh}} + \mathcal{H}_{\text{eh}}^{\text{C}} + \mathcal{H}_{\text{eh}}^{\text{X}}. \quad (2.52)$$

Der Hamiltonian kann in vier Terme unterteilt werden, nämlich in die Coulomb-Wechselwirkung innerhalb des Subsystems der Elektronen bzw. der Löcher \mathcal{H}_{ee}

⁹SBE = *semiconductor Bloch equations*

und \mathcal{H}_{hh} , die Elektron-Loch-Coulomb-Wechselwirkung $\mathcal{H}_{\text{eh}}^C$ und die Elektron-Loch Austausch-Wechselwirkung $\mathcal{H}_{\text{eh}}^X$. Die Struktur der einzelnen Beiträge ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_{\text{ee}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_{c1} m_{c2} \\ m_{c3} m_{c4}}} \mathcal{V}_{m_{c1} m_{c2} m_{c3} m_{c4}}^{\text{ee}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) c_{m_{c1}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m_{c2}}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{m_{c3}}(\mathbf{k}') c_{m_{c4}}(\mathbf{k}) \quad (2.53)$$

$$\mathcal{H}_{\text{hh}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_{v1} m_{v2} \\ m_{v3} m_{v4}}} \mathcal{V}_{m_{v1} m_{v2} m_{v3} m_{v4}}^{\text{hh}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) v_{m_{v1}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{m_{v2}}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{m_{v3}}(\mathbf{k}') v_{m_{v4}}(\mathbf{k}) \quad (2.54)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eh}}^C = \sum_{\substack{m_c m'_c \\ m_v m'_v}} \mathcal{V}_{m_c m_v m'_v m'_c}^C(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k}) v_{m'_v}^\dagger(\mathbf{k}') v_{m_v}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) \quad (2.55)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eh}}^X = \sum_{\substack{m_c m'_c \\ m_v m'_v}} \mathcal{V}_{m_c m_v m'_v m'_c}^X(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m'_c}(-\mathbf{k}' + \mathbf{q}) v_{m'_v}^\dagger(\mathbf{k}) v_{m_v}(\mathbf{k}') . \quad (2.56)$$

Wie im Fall der Elektron-Phonon-Wechselwirkung sind die Wechselwirkungsmatrixelemente \mathcal{V} in der Eigenbasis aufgrund der Kopplung von Spin und Wellenvektor, die sich in den Subbandfunktionen manifestiert, spinabhängig. Sie haben die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{m_{c1} m_{c2} m_{c3} m_{c4}}^{\text{ee}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= v(q) \sum_{m_c m'_c} \int dz \int dz' e^{-q|z-z'|} \\ &\quad \times \zeta_{m_c}^{(m_{c1})*}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, z) \zeta_{m'_c}^{(m_{c2})*}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, z) \\ &\quad \times \zeta_{m'_c}^{(m_{c3})}(\mathbf{k}', z) \zeta_{m_c}^{(m_{c4})}(\mathbf{k}, z) \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{m_{v1} m_{v2} m_{v3} m_{v4}}^{\text{hh}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= v(q) \sum_{m_v m'_v} \int dz \int dz' e^{-q|z-z'|} \\ &\quad \times \zeta_{m_v}^{(m_{v1})*}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, z) \zeta_{m'_v}^{(m_{v2})*}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, z) \\ &\quad \times \zeta_{m'_v}^{(m_{v3})}(\mathbf{k}', z) \zeta_{m_v}^{(m_{v4})}(\mathbf{k}, z) \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{m_c m_v m'_v m'_c}^C(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= v(q) \sum_{\tilde{m}_c \tilde{m}_v} \int dz \int dz' e^{-q|z-z'|} \\ &\quad \times \zeta_{\tilde{m}_c}^{(m_c)*}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, z) \zeta_{\tilde{m}_c}^{(m'_c)}(\mathbf{k}, z) \\ &\quad \times \zeta_{\tilde{m}_v}^{(m_v)*}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, z) \zeta_{\tilde{m}_v}^{(m'_v)}(\mathbf{k}', z) \end{aligned} \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{m_c m_v m'_v m'_c}^X(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= v(q) \sum_{\substack{\tilde{m}_c \tilde{m}_v \\ \tilde{m}'_c \tilde{m}'_v}} \int dz \int dz' e^{-q|z-z'|} \mathcal{M}_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v}^{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \\ &\quad \times \zeta_{\tilde{m}_c}^{(m_c)*}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, z) \zeta_{\tilde{m}'_c}^{(m'_c)}(-\mathbf{k}' + \mathbf{q}, z) \\ &\quad \times \zeta_{\tilde{m}_v}^{(m_v)*}(\mathbf{k}', z) \zeta_{\tilde{m}'_v}^{(m'_v)}(\mathbf{k}, z) , \end{aligned} \quad (2.60)$$

mit dem Fourier-transformierten zweidimensionalen Coulomb-Potenzial $v(q)$ [57]. Die Matrix $\mathcal{M}_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v}^{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c}$ im Austausch-Term hat ihren Ursprung in der Kopplung von Elektron- und Lochdrehimpulszuständen und ist definiert als

$$\mathcal{M}_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v}^{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c} = \int dz \int dz' u_{\tilde{m}_v}^*(\mathbf{x}') u_{\tilde{m}'_v}(\mathbf{x}') u_{\tilde{m}_c}^*(\mathbf{x}) u_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{x}) . \quad (2.61)$$

Das Matrixelement $\mathcal{M}_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v}^{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c}$ ist aus dem Bereich der BAP-Spinrelaxation, die die Austausch-Wechselwirkung voraussetzt, bekannt [79, 78].

In Analogie zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung beschränken wir unsere Betrachtung wieder auf das elektronische Subsystem. Aus der Coulomb-Wechselwirkung ergeben sich für die Einträge der elektronischen Spindichtematrix die Gleichungen

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c \tilde{m}_c}(\mathbf{k})|_{\text{Coul}} = & \\ & - \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q} m'_c} \left\{ \sum_{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c} [\mathcal{V}_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c m'_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k}) \rangle \right. \\ & \quad - \mathcal{V}_{\tilde{m}_c m'_c m_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}, \mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle] \\ & - \sum_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v} [\mathcal{V}_{\tilde{m}_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m'_c}^{\text{C}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\ & \quad - \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m_c}^{\text{C}}(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle] \\ & + \sum_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v} [\mathcal{V}_{\tilde{m}_c \tilde{m}_v m'_c \tilde{m}'_v}^{\text{X}}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\ & \quad - \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v m_c \tilde{m}'_v}^{\text{X}}(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle] \Big\} . \end{aligned} \quad (2.62)$$

Die EOM für die Spindichtematrix der Valenzbandzustände und der Interbandpolarisation sind in Ref. [96] angegeben und haben für unsere Betrachtungen keine Relevanz. Man erkennt in Glg. (2.62), dass die EOM der Zwei-Punkt-Dichtematrizen von Vier-Punkt-Dichtematrizen bestimmt sind. Dies führt, wie im vorherigen Abschnitt, zu einer unendlichen Hierarchie von EOM. Der einzige Unterschied ist, dass die Coulomb-Wechselwirkung bereits in der ersten Stufe der Hierarchie durch Vier-Punkt-Dichtematrizen beschrieben wird, während die Dynamik der Elektron-Phonon-Wechselwirkung durch Drei-Punkt-Dichtematrizen dominiert wurde. Es ist folglich notwendig, die Hierarchie der EOM auf geeignete Weise abzubrechen, wofür verschiedene Methoden existieren, die denen der Elektron-Phonon-Wechselwirkung entsprechen. Wir orientieren uns an dem in Ref. [45] für die Ladungsträgerdynamik vorgestellten Schema.

Der Abbruch der Hierarchie führt zu zwei Arten von Beiträgen. Er ist bestimmt durch das *Hartree-Fock-Abbruchschema* [69, 45, 46] und liefert in einem ersten Schritt zusätzliche Beiträge im kohärenten Regime (siehe Abb. 2.4). Man beschränkt sich beim Hartree-Fock-Abbruchschema auf eine Faktorisierung der Vier-Punkt-Dichtematrizen in deren makroskopischen Bestandteile¹⁰. Die EOM der elektro-

¹⁰Dies entspricht im Falle der Elektron-Phonon-Wechselwirkung der Berücksichtigung von

nischen Spindichtematrix haben nach der Anwendung des Hartree-Fock-Abbruchschemas die Form

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \varrho_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k}) = & [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\bar{m}_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k}) \\ & + \sum_{m_v} \left[\Omega_{\bar{m}_c m_v}^*(\mathbf{k}) P_{m_c m_v}(\mathbf{k}) - \Omega_{m_c m_v}(\mathbf{k}) P_{\bar{m}_c m_v}^\dagger(\mathbf{k}) \right] \\ & + \sum_{m'_c} \left[\Sigma_{m_c m'_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c \bar{m}_c}(\mathbf{k}) - \Sigma_{\bar{m}_c m'_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}) \right]. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Um die Resultate des Abbruchschemas zu verdeutlichen, wurden bei der Herleitung der EOM die Terme \mathcal{H}_0 und $\mathcal{H}_{\text{Licht}}$ des Hamiltonians berücksichtigt. In Glg. (2.63) wird deutlich, dass das Abbruchschema im kohärenten Regime zu einer Renormierung der Einteilchen-Effekte, nämlich der Energien der Zustände und des anregenden Lichtfeldes, führt. Die entsprechenden Beiträge sind gegeben durch die Selbstenergie

$$\begin{aligned} \Sigma_{m_c m'_c}(\mathbf{k}) = & - \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_c m_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \right. \\ & \left. - \sum_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v} \mathcal{V}_{m'_c - \tilde{m}_v m_c - \tilde{m}'_v}^{\text{X}}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \right\} \end{aligned} \quad (2.64)$$

und das renormierte Dipolmatrixelement

$$\Omega_{m_c m_v}^*(\mathbf{k}) = \mathbf{E}(t) \cdot d_{m_c m_v}(\mathbf{k}) + \sum_{\substack{\tilde{m}_c \tilde{m}_v \\ \mathbf{q}}} \mathcal{V}_{m_c - \tilde{m}_v - m_v \tilde{m}_c}^{\text{C}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}) P_{\tilde{m}_c \tilde{m}_v}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}). \quad (2.65)$$

Die Diagonaleinträge der Selbstenergie ($m_c = m'_c$) führen zu renormierten Einteilchen-Energien, während die Nebendiagonaleinträge ($m_c \neq m'_c$) eine Kopplung der Diagonal- und der Nebendiagonaleinträge der Spindichtematrix bewirken. Wie man an den Renormierungseffekten erkennt, ist das Ergebnis des Abbruchschemas auf das kohärente Regime der Dynamik beschränkt. Es ist daher nicht geeignet, die für die Spinrelaxation- und dephasierung notwendigen Streuprozesse zu erfassen. Dafür müssen alle Beiträge aufgrund der Vier-Punkt-Dichtematrizen hinzugenommen werden, die das Hartree-Fock-Abbruchschema vernachlässigt.

Die Hinzunahme inkohärenter Prozesse wird durch die Berücksichtigung der *reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrizen* bewerkstelligt [45]. Sie sind allgemein definiert als die Differenz zwischen den vollen Vier-Punkt-Dichtematrizen, die aus der noch nicht abgebrochenen EOM der Zwei-Punkt-Dichtematrizen stammen, und den nach dem Hartree-Fock-Abbruchschema faktorisierten Produkten von zwei Zwei-Punkt-Dichtematrizen, wie in Abb. 2.4 schematisch dargestellt ist. Dieses Verfahren liefert

kohärenzen Phononen, d. h. einer direkten Faktorisierung der Drei-Punkt-Dichtematrizen [60]. Diese Beiträge hätten ähnliche Effekte in den EOM der Spindichtematrix, wie die Beiträge des Hartree-Fock-Abbruchschemas für die Coulomb-Wechselwirkung. Im Unterschied zu den kohärenten Effekten der Coulomb-Wechselwirkung sind diese aber nur im Ultrakurzzeitbereich von Bedeutung.

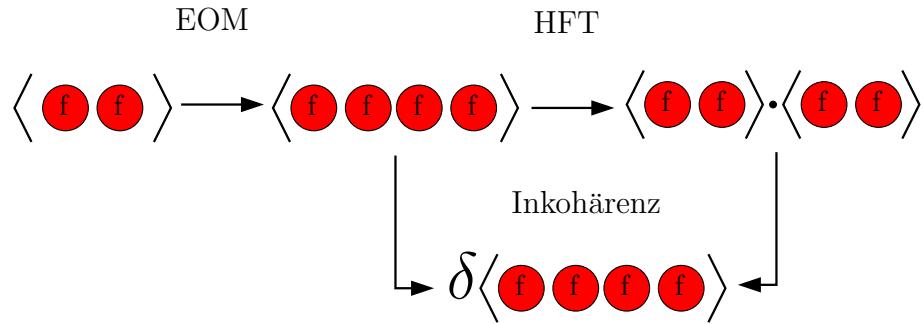


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung des Hartree-Fock-Abbruchschemas (HFT = *Hartree-Fock truncation*) mit Berücksichtigung der inkohärenten Prozesse. Die mit f indizierten Symbole beschreiben fermionische Operatoren. Die Berechnung der EOM führt von den Zwei-Punkt-Dichtematrizen in führender Ordnung zu Vier-Punkt-Dichtematrizen. Der Abbruch nach Hartree-Fock schließt die unendliche Hierarchie ab und ergibt Produkte von Zwei-Punkt-Dichtematrizen, die auf das kohärente Regime beschränkt sind. Der inkohärente Anteil der Dynamik erschließt sich aus den EOM der reduzierten Dichtematrizen, die als Differenz der Vier-Punkt-Dichtematrizen vor dem Abbruch und dem faktorisierten Produkt von Zwei-Punkt-Dichtematrizen definiert sind.

auf anschauliche Weise alle im Hartree-Fock-Abbruchschema vernachlässigten Beiträge zur Dynamik. Wir beschränken uns bei der Betrachtung der Coulomb-Streuung wieder auf die zweite Bornsche Näherung¹¹. Die Vorgehensweise wird im Folgenden für den Beitrag $\langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle$ des Austausch-Terms aus Glg. (2.62) detailliert vorgeführt. Für die restlichen Streuterme wird ausschließlich das Endergebnis angegeben. Die relevanten Schritte der Herleitung dieser Terme sind im ANHANG C aufgeführt.

Die reduzierte Vier-Punkt-Dichtematrix für $\langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle$ ist definiert als

$$\begin{aligned} & \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ &= \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ & \quad - \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \langle v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \delta_{\mathbf{k}, -\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Wir teilen das Vorgehen in Analogie zur Elektron-Phonon-Streuung in die EOM für den Diagonaleintrag ($\bar{m}_c = m_c$) und den Nebendiagonaleintrag ($\bar{m}_c = -m_c$) der Spindichtematrix auf. Zur Herleitung der Streubeiträge ist es nötig, die EOM der reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrix mit \mathcal{H}_0 und den relevanten Termen von $\mathcal{H}_{\text{coul}}$ aufzustellen. Aus diesen werden, entsprechend der im vorherigen Abschnitt eingeführten Abbruchregeln, die auftretenden Sechs-Punkt-Dichtematrizen und die Produkte aus Vier-Punkt- und Zwei-Punkt-Dichtematrizen in ihre makroskopischen

¹¹Wir vernachlässigen folglich die im Fall der Coulomb-Streuung wichtigen Abschirmeffekte. Eine mikroskopische Beschreibung dieser Effekte im Rahmen des Dichtematrixformalismus ist prinzipiell durch die Berücksichtigung höherer Korrelationen möglich [127].

Erwartungswerte faktorisiert und nur die Beiträge berücksichtigt, die in der ursprünglichen EOM der Zwei-Punkt-Dichtematrizen zu einem Produkt aus zwei Wechselwirkungsmatrixelementen führen.

So erhalten wir die für den Diagonaleintrag $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ relevante EOM

$$\begin{aligned}
& i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \left\{ \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
&\quad - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad + \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&\quad \left. - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right\}. \tag{2.67}
\end{aligned}$$

Nach einer geeigneten Erweiterung der Terme proportional zum Wechselwirkungsmatrixelement lässt sich die EOM schreiben als

$$\begin{aligned}
& i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
&\quad \left. - [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \tag{2.68}
\end{aligned}$$

In Analogie zu den EOM der phonongestützten Dichtematrizen hat auch die EOM der reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrix die charakteristische Form

$$\partial_t x(t) = -i\omega x(t) + y(t).$$

Um sie zu lösen, wenden wir daher wieder die Markov und die adiabatische Näherung an und erhalten so eine Gleichung für die reduzierte Dichtematrix. Sie wird in die ursprüngliche EOM der Zwei-Punkt-Dichtematrix eingesetzt und liefert die gesuchten Streubeiträge.

Die EOM von $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ hat durch die Streuung aufgrund des Austausch-Terms die Form

$$\partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_X = -\Gamma_{m_c m_c}^{(X)\text{out}}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(X)\text{in}}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})], \tag{2.69}$$

die bestimmt ist durch die Streuraten aus bzw. in den betrachteten Zustand. Ihre Form entspricht, wie bei der Elektron-Phonon-Streuung, der von Fermis Goldener

Regel. Die Streuraten sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 & \Gamma_{m_c m_c}^{(X) \text{ out}}(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} |\mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q})|^2 \\
 & \quad \times \delta [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\bar{\mathbf{k}})] \\
 & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right\} \\
 \end{aligned} \tag{2.70}$$

und

$$\begin{aligned}
 & \Gamma_{m_c m_c}^{(X) \text{ in}}(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} |\mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q})|^2 \\
 & \quad \times \delta [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\bar{\mathbf{k}})] \\
 & \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \right\} .
 \end{aligned} \tag{2.71}$$

Die einzelnen Terme der Streuraten sind, wie für die zweite Bornsche Näherung typisch, proportional zum Betragsquadrat des Wechselwirkungsmatrixelements zur energieerhaltenden δ -Funktion und zu den für den jeweiligen Streuprozess entsprechenden Produkten von Besetzungswahrscheinlichkeiten für die Anfangs- und Endzustände. Wie im Fall der Elektron-Phonon-Streuung sind die zweite Bornsche Näherung und der Boltzmann-Grenzfall für den Diagonaleintrag der Spindichtematrix äquivalent.

Die Streuung aufgrund der Elektron-Loch-Coulomb-Wechselwirkung und der direkten Elektron-Elektron-Wechselwirkung kann in Analogie bestimmt werden. Das Ergebnis für sie lautet

$$\begin{aligned}
 \partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_{ee} + \partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_C &= - [\Gamma_{m_c m_c}^{(ee) \text{ out}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(C) \text{ out}}(\mathbf{k})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \\
 &+ [\Gamma_{m_c m_c}^{(ee) \text{ in}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(C) \text{ in}}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] .
 \end{aligned} \tag{2.72}$$

Die Streuraten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 & \Gamma_{m_c m_c}^{(ee) \text{ out}}(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c \\ m'_c}} \left\{ |\mathcal{V}_{\tilde{m}_c m'_c m_c \tilde{m}'_c}^{ee}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \right. \\
 & \quad \times \delta [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(-\bar{\mathbf{k}})] \\
 & \quad \times [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \\
 & \quad + |\mathcal{V}_{\tilde{m}_c m_c m'_c \tilde{m}'_c}^{ee}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})|^2 \\
 & \quad \times \delta [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(-\bar{\mathbf{k}})] \\
 & \quad \times [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \left. \right\} \\
 \end{aligned} \tag{2.73}$$

und

$$\begin{aligned}
& \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{ee}) \text{ in}}(\mathbf{k}) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c \\ m'_c}} \left\{ \left| \mathcal{V}_{\tilde{m}_c m'_c m_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}, \mathbf{q}) \right|^2 \right. \\
& \quad \times \delta \left[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad \times \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \left[1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad + \left| \mathcal{V}_{\tilde{m}_c m_c m'_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \right|^2 \\
& \quad \times \delta \left[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad \times \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \left[1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right] \left. \right\}. \quad (2.74)
\end{aligned}$$

Entsprechend führt die Elektron-Loch-Coulomb-Wechselwirkung zu Streuraten der Form

$$\begin{aligned}
& \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{C}) \text{ out}}(\mathbf{k}) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} \left\{ \left| \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}'_v m'_c}^{\text{C}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \right|^2 \right. \\
& \quad \times \delta \left[\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad \times \left[1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \right] \left[1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \\
& \quad + \left| \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m'_c}^{\text{C}}(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \right|^2 \\
& \quad \times \delta \left[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad \times \left[1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right] \left[1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \left. \right\} \quad (2.75)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
& \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{C}) \text{ in}}(\mathbf{k}) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} \left\{ \left| \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}'_v m'_c}^{\text{C}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \right|^2 \right. \\
& \quad \times \delta \left[\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad \times \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \left[1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad + \left| \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m'_c}^{\text{C}}(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \right|^2 \\
& \quad \times \delta \left[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right] \\
& \quad \times \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \left[1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right] \left. \right\}. \quad (2.76)
\end{aligned}$$

Die Streuraten aus (2.73) - (2.76) unterscheiden sich von denen der Austausch-Wechselwirkung um einen Faktor 2 bzw. bestehen aus zwei separaten Summanden. Dies hat seinen Ursprung in der Einführung der Eigenbasis und der daraus resultierenden Aufspaltung der Coulomb-Wechselwirkung. Die sich ergebenden EOM für das Diagonalelement der Spindichtematrix lassen sich nur für die Austauschwechselwirkung als Imaginärteil einer einzigen reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrix schreiben,

wie in ANHANG C dargestellt. Die übrigen Beiträge erlauben diese Vereinfachung nicht und enthalten daher zwei separate Summanden in den Streuraten.

Die Äquivalenz von Boltzmann-Grenzfall und zweiter Bornscher Näherung ist für das Nebendiagonalelement nicht gegeben. Wir unterscheiden daher, wie bei der Elektron-Phonon-Streuung, die Streubeiträge im Boltzmann-Grenzfall und jenseits des Boltzmann-Grenzfalls. Die Herleitung wird am Beispiel des Terms

$$\delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \quad (2.77)$$

der Austausch-Wechselwirkung demonstriert. Die Beiträge der übrigen reduzierten Dichtematrizen sind in ANHANG C aufgeführt. Die EOM der reduzierten Dichtematrix ergibt sich zu

$$\begin{aligned} & i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle = \\ & = [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ & \quad + \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \left\{ \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\ & \quad \quad \quad + \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \\ & \quad \quad \quad \left. - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \right\}. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Die Gleichung lässt sich nach geeigneter Ergänzung der Inhomogenität in die Form

$$\begin{aligned} & i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ & = [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ & \quad + \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right. \\ & \quad \quad \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.79)$$

bringen. Die Lösung der EOM erfolgt durch Integration und Anwendung von Markov und adiabatischer Näherung. Das Resultat für die EOM des Nebendiagonalelements der Spindichtematrix im Boltzmann-Grenzfall kann wieder in Form einer Selbstenergie geschrieben werden als

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_X = \frac{1}{i\hbar} \Sigma_{m_c - m_c}^X(\mathbf{k}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}). \quad (2.80)$$

Der Selbstenergiebeitrag kann wie bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Real- und Imaginärteil aufgespalten werden und ergibt

$$\Sigma_{m_c - m_c}^X(\mathbf{k}) = \hbar [\Omega_{m_c - m_c}^X(\mathbf{k}) - i\Gamma_{m_c - m_c}^X(\mathbf{k})]. \quad (2.81)$$

Real- und Imaginärteil sind durch die Kramers-Kronig Relation verbunden. Die für die Streuung relevanten Terme sind im Imaginärteil der Selbstenergie enthalten. Der Imaginärteil ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
& \Gamma_{m_c - m_c}^X(\mathbf{k}) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} |\mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v - m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})|^2 \\
&\quad \times \delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\} \\
&+ |\mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q})|^2 \\
&\quad \times \delta [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\}. \tag{2.82}
\end{aligned}$$

Auch Glg. (2.82) liefert die bereits für die Elektron-Phonon-Streuung beschriebene Struktur des Imaginärteils im Boltzmann-Grenzfall. Im Unterschied zur Elektron-Phonon-Streuung ist sie hier ausschließlich durch fermionische Besetzungsoperatoren bestimmt.

Die EOM von $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$, beschränkt auf die Elektron-Loch-Coulomb-Wechselwirkung, lässt sich darstellen als

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_C = \frac{1}{i\hbar} \Sigma_{m_c - m_c}^C(\mathbf{k}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}). \tag{2.83}$$

Die Selbstenergie kann wie im Fall der Austausch-Wechselwirkung in Real- und Imaginärteil aufspalten werden, wobei für die Streuung nur der Imaginärteil der Selbstenergie relevant ist. Er hat die typische Form

$$\begin{aligned}
& \Gamma_{m_c - m_c}^C(\mathbf{k}) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} |\mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m'_c}^C(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q})|^2 \\
&\quad \times \delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
&+ |\mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m'_c}^C(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q})|^2 \\
&\quad \times \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\}. \tag{2.84}
\end{aligned}$$

Der letzte für das elektronische Subsystem relevante Streubeitrag wird bestimmt durch die Elektron-Elektron-Streuung und führt im Boltzmann-Grenzfall zur EOM

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{ee}} = \frac{1}{i\hbar} \Sigma_{m_c - m_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) . \quad (2.85)$$

Der Imaginärteil der Selbstenergie hat auch hier die zu erwartende Form, gegeben durch

$$\begin{aligned} & \Gamma_{m_c - m_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c \\ m'_c}} |\mathcal{V}_{\tilde{m}_c - m_c m'_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q})|^2 \\ & \quad \times \delta [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\ & \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\} \\ &+ |\mathcal{V}_{\tilde{m}_c m'_c m_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \\ & \quad \times \delta [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\ & \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} . \end{aligned} \quad (2.86)$$

Die Glgn. (2.80), (2.83) und (2.85) beschreiben vollständig die für das Nebendiagonalelement der Spindichtematrix relevanten Streuprozesse im Boltzmann-Grenzfall.

Bei der genaueren Betrachtung der Herleitung wird deutlich, dass auch für die Coulomb-Streuung zusätzliche Streubeiträge in zweiter Bornscher Näherung für das Nebendiagonalelement existieren. Die Herleitung erfolgt in Analogie zu den entsprechenden Termen der Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Wir beschränken uns dabei wieder auf die vollständige Beschreibung der Beiträge des Coulomb-Austausch-Terms, für die restlichen Beiträge werden die Endergebnisse angegeben, die Herleitung findet sich in ANHANG C.

Die EOM der ersten reduzierten Dichtematrix aus Glg. (2.77) jenseits des Boltzmann-Grenzfalls lässt sich nach dem bekannten Vorgehen schreiben als

$$\begin{aligned} & i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ &= [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ & \quad + \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_v - m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\ & \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{m'_c - m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) . \end{aligned} \quad (2.87)$$

Nach Anwendung der Markov und der adiabatischen Näherung ergibt sich die integrierte Gleichung der reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrix zu

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_v - m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
&\quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{m'_c - m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) . \tag{2.88}
\end{aligned}$$

In Analogie lässt sich die EOM der zweiten reduzierten Dichtematrix des Austausch-Terms aus Glg. (2.62) jenseits des Boltzmann-Grenzfalls formulieren als

$$\begin{aligned}
& i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\
&\quad \times \delta \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&\quad - \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{-m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}) . \tag{2.89}
\end{aligned}$$

Die Aufintegration der Gleichung mithilfe der Markov und der adiabatischen Näherung führt zu

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \\
&\quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \right\} \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{-m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}) . \tag{2.90}
\end{aligned}$$

Die Glgn. (2.88) und (2.90) ergeben, eingesetzt in die ursprüngliche EOM von $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$, die Streubeträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls aufgrund der Aus-

tausch-Wechselwirkung. Das Endergebnis für die EOM hat die von der Elektron-Phonon-Wechselwirkung bekannte Form

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{X,2} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) . \quad (2.91)$$

Im Unterschied zum Boltzmann-Grenzfall kann keine geschlossene analytische Gleichung für den Real- und den Imaginärteil der Selbstenergie angegeben werden, da die Beiträge stets proportional zu einem Produkt aus zwei im Allgemeinen komplexwertigen Coulomb-Matrixelementen sind. Formal kann man die Selbstenergie trotzdem in zwei Bestandteile aufspalten gemäß

$$\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) = \hbar [\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - i \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] . \quad (2.92)$$

Hier wurden alle Terme proportional zu einem Hauptwert \mathcal{P} in $\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ zusammengefasst, während $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ die Terme proportional zu einer δ -Funktion enthält. Um mit der Darstellung im Fall der Elektron-Phonon-Streuung konsistent zu bleiben, geben wir $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ explizit an. Der Term $\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ kann wieder durch die im Abschnitt über die Elektron-Phonon-Streuung angebrochene Ersetzung der δ -Funktion dargestellt werden. $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ hat die Form

$$\begin{aligned} & \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \\ &= \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_v - m'_c \tilde{m}_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \\ & \quad \times \delta [\epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\ & \quad \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\ & \quad - \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}_v m'_c \tilde{m}'_v}^X(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \mathcal{V}_{-m'_c \tilde{m}'_v m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ & \quad \times \delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\ & \quad \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} . \end{aligned} \quad (2.93)$$

Auch in diesem Grenzfall wird die charakteristische Struktur der Streubeträge reproduziert. Im Vergleich mit der Elektron-Phonon-Streuung ergeben sich aber für die Coulomb-Wechselwirkung Unterschiede im Detail der Gleichungen. Generell gilt, dass im Fall der Elektron-Phonon-Wechselwirkung die Bestandteile der Selbstenergie stets aus *Summen* der einzelnen Beiträge aus den phonongestützten Dichtematrizen zusammengesetzt sind. Dies ist für die Coulomb-Wechselwirkung nicht mehr der Fall. Hier ist der entsprechende Term durch eine Differenz der Beiträge der reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrizen gegeben. Dies kann z. B. am Vergleich von Glg. (2.46) und Glg. (2.93) deutlich gemacht werden. Der Unterschied wird sich bei einer numerischen Auswertung auswirken, eine physikalische Bedeutung insbesondere

in Hinblick auf die Spinrelaxation und -dephasierung ist nicht erkennbar. Ein weiterer Unterschied tritt in der Ordnung der Korrelation der Beiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls auf. Während für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung alle Streubeiträge proportional zum Nebendiagonaleintrag bei $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ sind, gilt dies im Fall der Coulomb-Streuung nur für die Beiträge aufgrund von \mathcal{H}_{ee} und \mathcal{H}_{eh}^C , wie in **ANHANG C** gezeigt. Die Beiträge des Austausch-Terms dagegen sind korreliert mit dem Nebendiagonaleintrag bei $-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}$. Da in beiden Fällen aufgrund der \mathbf{k} -Raum-Summation alle möglichen \mathbf{k} -Werte berücksichtigt werden, ist dies für eine numerische Auswertung nicht von Bedeutung, zeigt aber eine formale Besonderheit der Darstellung der Coulomb-Wechselwirkung in der Eigenbasis.

Um die Interpretation der Ergebnisse der Coulomb-Streuung abzuschließen, geben wir die durch die Bloch-Gleichungen definierten Zerfallsraten für das Diagonal- und das Nebendiagonalelement der Spindichtematrix an

$$\frac{1}{T_{1,\mathbf{k}}}\Big|_{\text{coul}} = \left[\Gamma_{m_c m_c}^{(ee)\text{in}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(ee)\text{out}}(\mathbf{k}) \right. \\ \left. + \Gamma_{m_c m_c}^{(C)\text{in}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(C)\text{out}}(\mathbf{k}) \right. \\ \left. + \Gamma_{m_c m_c}^{(X)\text{in}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(X)\text{out}}(\mathbf{k}) \right] \quad (2.94)$$

$$\frac{1}{T_{2,\mathbf{k}}}\Big|_{\text{coul}} = \Im \left\{ \Sigma_{m_c - m_c}^{ee}(\mathbf{k}) + \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{ee}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right\} \\ + \Im \left\{ \Sigma_{m_c - m_c}^C(\mathbf{k}) + \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right\} \\ + \Im \left\{ \Sigma_{m_c - m_c}^X(\mathbf{k}) + \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^X(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (2.95)$$

Wie man sieht, entspricht die Struktur der Zerfallsraten derjenigen der Elektron-Phonon-Streuung. Sie erlaubt eine analoge Interpretation zu denjenigen, die bereits im vorherigen Abschnitt diskutiert wurden.

Im Unterschied zur Elektron-Phonon-Streuung sind in den Glgn. (2.94) und (2.95) neben den für die DP- und EY-Spinrelaxation relevanten Streuprozessen auch die für den BAP-Mechanismus enthalten. Die ersten beiden Zeilen in den Glgn. (2.94) und (2.95) beschreiben die Elektron-Elektron- und die Elektron-Loch-Coulomb-Streuung und beinhalten damit Streuprozesse, die zur DP- oder EY-Spinrelaxation führen. Die Streuung durch die Austausch-Wechselwirkung ist in den Ausdrücken der letzten Zeile von Glg. (2.94) bzw. (2.95) enthalten. Diese Terme stellen den Streumechanismus dar, der die BAP-Spinrelaxation verursacht.

2.2.4 Ladungsträger-Störstellen-Streuung

Als letzten möglichen Streumechanismus für die Spinrelaxation und -dephasierung stellen wir in diesem Abschnitt die Streuung von Elektronen an Störstellen dar [97].

Der Hamiltonian für diese Streuung hat die Form

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = \sum_{\substack{m'_c m''_c \\ \mathbf{q}}} \left[U_{m''_c m'_c}(\mathbf{q}) c_{m''_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k}) + \text{H. c.} \right], \quad (2.96)$$

mit dem Störstellenpotenzial $U_{m''_c m'_c}(\mathbf{q})$, das durch die Art der Störstelle (geladen, neutral, etc.) bestimmt ist. Seine explizite Form ist aber für die weiteren Betrachtungen nicht von Bedeutung. Wir betonen jedoch, dass die Streuung an magnetischen Störstellen im Folgenden nicht berücksichtigt wird [34]. Wie im Fall der Elektron-Phonon-Streuung ist auch hier das Wechselwirkungsmatrixelement spinabhängig, da Spin und Wellenvektor der Elektronen in der Eigenbasis verknüpft sind. Dies wird durch die Indizierung des Wechselwirkungsmatrixelements mit Spinindizes verdeutlicht.

Der Hamiltonian (2.96) führt für die Einträge der elektronischen Spindichtematrix zur EOM

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k}) = & \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left[U_{m'_c m_c}(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \right. \\ & - U_{\bar{m}_c m'_c}(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \\ & + U_{m_c m'_c}^*(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \\ & \left. - U_{m'_c \bar{m}_c}^*(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Man erkennt die für eine Wechselwirkung typische Struktur der EOM. Sie kommt in diesem Fall durch die Erwartungswerte von zwei fermionischen Operatoren zum Ausdruck, die die Erzeugung und Vernichtung eines Elektrons bei verschiedenen Wellenvektoren beschreiben. Die Struktur unterscheidet sich formal von den bisher behandelten Fällen, da keine höhere Korrelation als die von Zwei-Punkt-Dichtematrizen zu betrachten ist. Wir bezeichnen die Zwei-Punkt-Dichtematrizen, die einen Übergang zwischen zwei Wellenvektoren und damit zwei Spinzuständen beschreiben, wie z. B. $\varrho_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) := \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) \rangle$, als *nichtlokale Dichtematrizen*¹². Wie bei den bereits besprochenen Streumechanismen spalten wir die weitere Diskussion in die für den Diagonaleintrag und die für den Nebendiagonaleintrag der Dichtematrix auf.

Für den Diagonaleintrag beschränken wir uns auf die Streubeiträge aufgrund des Terms $\varrho_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) := \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) \rangle$. Die Herleitung der übrigen Beiträge ist in ANHANG D aufgeführt. Die EOM von $\varrho_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ hat die Form

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = & [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}' \tilde{m}_c} \left[U_{m'_c \tilde{m}_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{q}') c_{m_c}(\mathbf{k}) \rangle \right. \\ & \left. - U_{\tilde{m}_c m_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}') \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.98)$$

Es wurden bereits alle Terme vernachlässigt, die zu keinem makroskopischen Beitrag führen können. Das Vorgehen, um die Gleichung zu lösen, entspricht dem der

¹²Die Streuung an Störstellen wird in der Beschreibung der Ladungsträgerdynamik im Dichtematrixformalismus nach unseren Kenntnissen nicht behandelt.

Elektron-Phonon- bzw. der Coulomb-Streuung. Die in der EOM enthaltenen Beiträge werden nach einer Umformung, die die in zweiter Bornscher Näherung relevanten Streuterme bestimmt, mit Hilfe der Markov und der adiabatischen Näherung integriert. Dies führt für die nichtlokale Dichtematrix zu einem geschlossenen Ausdruck der Form

$$\begin{aligned} \varrho_{m'_c m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx & -i\pi U_{m'_c m_c}^*(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \\ & \times \{ \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\ & - [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \} . \end{aligned} \quad (2.99)$$

Mit den in **ANHANG D** angegebenen nichtlokalen Dichtematrizen ergibt sich für die EOM von $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ das Endergebnis

$$\partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_{\text{imp}} = -\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{imp})\text{out}}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{imp})\text{in}}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] , \quad (2.100)$$

das die charakteristische Struktur von Fermis Goldener Regel aufweist. Die Streuraten, die Übergänge in oder aus dem betrachteten Zustand beschreiben, sind gegeben durch die Gleichungen

$$\begin{aligned} \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{imp})\text{out}}(\mathbf{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left\{ |U_{m'_c m_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \right. \\ & \left. + |U_{m_c m'_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \right\} \end{aligned} \quad (2.101)$$

und

$$\begin{aligned} \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{imp})\text{in}}(\mathbf{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left\{ |U_{m'_c m_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right. \\ & \left. + |U_{m_c m'_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \right\} . \end{aligned} \quad (2.102)$$

Man erkennt die für die zweite Bornsche Näherung typischen Faktoren, nämlich das Betragsquadrat der Wechselwirkung, die energieerhaltende δ -Funktion und die dem Streuprozess entsprechenden Besetzungswahrscheinlichkeiten.

Wie in den bisherigen Fällen auch wird die Untersuchung der Streubeiträge des Nebendiagonalelements der Spindichtematrix in die Beiträge des Boltzmann-Grenzfalls und in die jenseits des Boltzmann-Grenzfalls aufgespalten. Da das Vorgehen im Allgemeinen in den vorherigen beiden Abschnitten und im Speziellen an einem Beispiel in diesem Abschnitt vorgestellt wurde, verweisen wir für die EOM der einzelnen nichtlokalen Dichtematrizen auf den **ANHANG D** und geben hier nur die Endergebnisse der EOM an. Im Boltzmann-Grenzfall weist die EOM von $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$ die bekannte Form auf gegeben durch

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{imp}} = \frac{1}{i\hbar} \Sigma_{m_c - m_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) . \quad (2.103)$$

Der Einfluss der Streuung auf die Dynamik des Dichtematrixeintrags ist in der Selbstenergie $\Sigma_{m_c - m_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k})$ enthalten, die definiert ist als

$$\Sigma_{m_c - m_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k}) = \hbar \left[\Omega_{m_c - m_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k}) - i\Gamma_{m_c - m_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k}) \right]. \quad (2.104)$$

Die Streuung selbst ist bestimmt durch den Imaginärteil der Selbstenergie. Er hat die Form

$$\begin{aligned} \Gamma_{m_c - m_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k}) = & \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left\{ |U_{m'_c m_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \right. \\ & + |U_{-m_c m'_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \\ & + |U_{m_c m'_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \\ & \left. + |U_{m'_c - m_c}(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \right\}. \end{aligned} \quad (2.105)$$

Im Unterschied zu den bisher besprochenen Streumechanismen weist die Streuung an Störstellen eine Besonderheit auf, denn die Selbstenergie ist unabhängig von den Diagonaleinträgen der Dichtematrix, d. h. die Störstellen-Streuung koppelt den Diagonal- und den Nebendiagonaleintrag der Spindichtematrix nicht. Dies ist auf die nichtlokalen Dichtematrizen zurückzuführen und entspricht dem Fall, dass die Dynamik durch reine Einteilchen-Effekte bestimmt ist, wie z. B. die EOM aufgrund von \mathcal{H}_0 .

In Analogie zu den bereits diskutierten Streumechanismen existieren für den Nebendiagonaleintrag der Spindichtematrix auch hier Streubeiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls. Sie lassen sich in Form der EOM

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{imp}, 2} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (2.106)$$

darstellen. Wie bei der Elektron-Phonon- oder der Coulomb-Streuung kann die Selbstenergie $\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ nicht mit Hilfe der Kramers-Kronig Relation in Real- und Imaginärteil aufgespalten werden. Es ist nur eine rein formale Zweiteilung entsprechend der Gleichung

$$\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k}) = \hbar \left[\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - i\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right] \quad (2.107)$$

möglich. Um mit den vorherigen Abschnitten konsistent zu bleiben, sind hier die Beiträge $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ aufgeführt, die proportional zur δ -Funktion sind. Sie lassen sich schreiben als

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{imp}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = & \frac{\pi}{\hbar} \left\{ U_{m'_c m_c}(\mathbf{q}) U_{-m'_c - m_c}^*(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \right. \\ & + U_{-m_c - m'_c}(-\mathbf{q}) U_{m_c m'_c}^*(-\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \\ & + U_{m_c m'_c}^*(-\mathbf{q}) U_{-m_c - m'_c}(-\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \\ & \left. + U_{-m'_c - m_c}^*(\mathbf{q}) U_{m'_c m_c}(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \right\}. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Wie im Boltzmann-Grenzfall kommt auch hier der Effekt der nichtlokalen Dichtematrizen zu tragen, denn die Streuung koppelt nur das Nebendiagonalelement bei verschiedenen Wellenvektoren, aber nicht das Nebendiagonalelement mit dem Diagonalelement.

Mit den Beiträgen aus den Glg. (2.100), (2.103) und (2.106) können wir formal die Zerfallsraten der Bloch-Gleichungen angeben. Sie sind bestimmt durch die Gleichungen

$$\frac{1}{T_{1,\mathbf{k}}}\Big|_{\text{imp}} = \left[\Gamma_{m_c m_c}^{(\text{imp})\text{ in}}(\mathbf{k}) + \Gamma_{m_c m_c}^{(\text{imp})\text{ out}}(\mathbf{k}) \right] \quad (2.109)$$

$$\frac{1}{T_{2,\mathbf{k}}}\Big|_{\text{imp}} = \Im \left\{ \Sigma_{m_c - m_c}^{(\text{imp})}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{q} m'_c} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{(\text{imp})}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (2.110)$$

Für die Interpretation der beiden Zeiten sei auf den Abschnitt über die Elektron-Phonon-Streuung verwiesen, da es für die Zerfallsraten formal nicht von Bedeutung ist, welcher Streumechanismus betrachtet wird. In Hinblick auf die Beschreibung von Spinrelaxation und -dephasierung ist dies nicht mehr richtig. Die spinerhaltende Störstellen-Streuung kann nur Auslöser von Spinrelaxation und Spindephasierung nach dem DP- oder dem EY-Mechanismus sein.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass in den vorangehenden Abschnitten die drei wesentlichen Streumechanismen, die Streuung an Phononen, die Coulomb-Streuung und die Streuung an nichtmagnetischen Störstellen im Rahmen des Dichtematrixformalismus mikroskopisch berechnet wurden. Die zugehörigen Streubeträge sind entsprechend des Formalismus der Bloch-Gleichungen in die T_1 - und T_2 -Zeiten überführt worden, die den Zerfall des Diagonaleintrags der Spindichtematrix, also die Relaxation, bzw. den des Nebendiagonaleintrags, sprich die Dephasierung, beschreiben. Aufgrund der Wahl der Eigenbasis ist diese Zuordnung gerechtfertigt. Die Frage, die nun beantwortet werden muss, ist die, ob es sich bei den Zeiten um die experimentell gemessenen *Spinrelaxationszeiten* τ_{SR} bzw. *Spindephasierungszeiten* τ_{SD} , die in KAPITEL 1 definiert wurden, handelt bzw. wie die T_1 - und T_2 -Zeiten der erweiterten Bloch-Gleichungen mit diesen Zeiten zusammenhängen. Eine Antwort darauf liefert der nächste Abschnitt.

2.3 Vergleich mit den Observablen des Experiments

Um die Ergebnisse unserer mikroskopischen Theorie mit den Experimenten zur Bestimmung von Spinrelaxations- und Spindephasierungszeiten vergleichen zu können, ist es nötig, die Observablen des Experiments durch Dichtematrixeinträge auszudrücken. Dabei ist zu beachten, dass das Experiment die Dynamik der Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ untersucht, also die Spin-up/down Basis zugrunde legt [35, 139]. Die Observablen des Experiments sind die *Spinpolarisation* S und die *Spinkohärenz* C .

Im Dichtematrixformalismus ist S definiert als

$$S := \sum_{\mathbf{k}} [\varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})] . \quad (2.111)$$

Diese Observable beschreibt den makroskopischen Unterschied zwischen den besetzten Spin-up und Spin-down Zuständen, die durch die Diagonaleinträge der Dichtematrix gegeben sind¹³. Ist das System im Gleichgewicht, so verschwindet S . Erst die Schaffung einer Nichtgleichgewichtsverteilung, z. B. durch Anregung mit zirkular polarisierten Licht, führt zu einem endlichen Wert für S . Der Abbau von S entspricht dem einer Populationsinversion eines Zwei-Niveau-Systems und ist bestimmt durch die *Spinrelaxationszeit* τ_{SR} .

In Analogie zur Kohärenz in der Ladungsträgerdynamik [62] ist die makroskopische Spinkohärenz C im Dichtematrixformalismus definiert als

$$C := \sum_{\mathbf{k}} |\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})| . \quad (2.112)$$

Um die für spintronische Anwendungen relevante *irreversible* Dephasierung [139] zu bestimmen, haben wir die in **ANHANG A** erläuterte inkohärente Summe der Nebendiagonalelemente verwendet. Der Zerfall von C ist bestimmt durch die *Spindphasierungszeit* τ_{SD} . Da die makroskopischen Observablen und die entsprechenden Größen der mikroskopischen Theorie in zwei unterschiedlichen Basissystemen definiert sind, ist eine *Basistransformation* erforderlich. Es ist dann möglich, einen Zusammenhang zwischen den makroskopischen Zeiten τ_{SR} und τ_{SD} und den mikroskopischen Zeiten $T_{1,\mathbf{k}}$ und $T_{2,\mathbf{k}}$ anzugeben.

Mathematisch bedeutet dies, dass eine unitäre Transformation gebildet werden muss. Sie ist definiert durch die Eigenvektoren des nichtdiagonalen Hamiltonians bestehend aus dem kinetischen Anteil mit entarteten Einteilchen-Energien, dem Dresselhaus- und dem Rashba-Term. Für das elektronische Subsystem, das im Zentrum unserer Untersuchungen steht, ergibt sich eine zu diagonalisierende 2×2 Matrix. Sie ist entsprechend **KAPITEL 1** gegeben durch

$$\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_D + \mathcal{H}_R .$$

Der kinetische Anteil \mathcal{H}_0 der Elektronen mit der effektiven Masse m^* ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \cdot \mathbb{1}_{2 \times 2} .$$

Der linearisierte Dresselhaus-Term hat die Form

$$\mathcal{H}_D = \gamma (k_x \sigma_x - k_y \sigma_y) ,$$

mit dem Parameter γ .

Der letzte Term \mathcal{H}_R beschreibt die Rashba-Spin-Bahn-Kopplung mit dem Parameter α und hat die Darstellung

$$\mathcal{H}_R = \alpha (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) .$$

¹³Im Experiment, siehe z. B. Ref. [85], wird üblicherweise die *normierte* Spinpolarisation verwendet, die bestimmt ist durch $\sum_{\mathbf{k}} \{[\varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})] / [\varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})]\}$. Dies ist für unsere Betrachtungen nicht von Bedeutung und wir verwenden daher die nicht-normierte Form.

Die Eigenvektoren wurden unter Verwendung von **Maple** [80] bestimmt und können geschrieben werden als

$$|\pm\rangle_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm A_{\mathbf{k}} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.113)$$

mit

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma k_+ - i\alpha k_-}{\sqrt{(\alpha^2 + \gamma^2)(k_x^2 + k_y^2) - 4\alpha\gamma k_x k_y}}. \quad (2.114)$$

Wir haben die Abkürzung $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ eingeführt. Die einzelnen Grenzfälle für dominierende Dresselhaus- oder Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung ergeben sich aus α bzw. $\gamma = 0$. Auch der in der Literatur diskutierte Fall von sich kompensierenden Spin-Bahn-Wechselwirkungen [104, 21] ist mit $\alpha = \pm\gamma$ enthalten. Die unitäre Transformationsmatrix, aufgebaut aus den Eigenvektoren von Glg. (2.113), ermöglicht eine Darstellung der Komponenten der Dichtematrix der Spin-up/down Basis $\varrho_{ud}(\mathbf{k})$ aus Glg. (2.1) durch die Einträge der Dichtematrix $\varrho_{m_c \bar{m}_c}(\mathbf{k})$ aus Glg. (2.11). Die resultierende Matrix hat die Form

$$\varrho_{ud}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{d_+(\mathbf{k})}{2} + \Re \{A_{\mathbf{k}}^* \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})\} & -\frac{d_-(\mathbf{k})}{2} + i\Im \{A_{\mathbf{k}}^* \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})\} \\ -\frac{d_-(\mathbf{k})}{2} - i\Im \{A_{\mathbf{k}}^* \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})\} & \frac{d_+(\mathbf{k})}{2} - \Re \{A_{\mathbf{k}}^* \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})\} \end{pmatrix}, \quad (2.115)$$

mit der Abkürzung $d_{\pm}(\mathbf{k}) = \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \pm \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})$. Man erkennt an dieser Gleichung, dass die einzelnen Einträge der Dichtematrix in der Spin-up/down Basis von allen Einträgen der Dichtematrix in der Eigenbasis abhängen. Dies überträgt sich auf die Observablen, die, gebildet aus den Einträgen der Dichtematrix aus Glg. (2.115), zu den Ergebnissen

$$S = \sum_{\mathbf{k}} 4\Re \{A_{\mathbf{k}}^* \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})\} \quad (2.116)$$

und

$$C = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{d_-^2 + 4\Im \{A_{\mathbf{k}}^* \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})\}} \quad (2.117)$$

führen.

Die zeitliche Entwicklung von S aus Glg. (2.116) und C aus Glg. (2.117) bzw. der Zerfall dieser Observablen liefert den gesuchten Zusammenhang zwischen den makroskopischen und den mikroskopischen Relaxationszeiten. Man erkennt, dass eine Zuordnung der makroskopischen Spinrelaxationszeit τ_{SR} , gegeben durch den Zerfall von S , zur mikroskopischen Zerfallszeit $T_{1,\mathbf{k}}$ nicht richtig ist. Gleicher gilt für die makroskopische Spindphasierungszeit τ_{SD} , bestimmt durch den Zerfall von C , und die mikroskopische Zerfallszeit $T_{2,\mathbf{k}}$. Die unitäre Transformation beschreibt vielmehr, dass τ_{SR} von $T_{2,\mathbf{k}}$ abhängt, während τ_{SD} sowohl durch $T_{1,\mathbf{k}}$ als auch durch $T_{2,\mathbf{k}}$ bestimmt ist. Dabei ist zu beachten, dass die Zerfallszeiten τ_{SR} und τ_{SD} als makroskopische Größen bereits die Mittelung über den \mathbf{k} -Raum enthalten, während die Zeiten $T_{1,\mathbf{k}}$ und $T_{2,\mathbf{k}}$ nur bei einem \mathbf{k} -Wert definiert sind. Dies bedeutet, dass

$T_{1,\mathbf{k}}$ und $T_{2,\mathbf{k}}$ für den Vergleich mit den makroskopischen Zerfallszeiten noch über \mathbf{k} summiert werden müssen.

Die ausschließliche Abhängigkeit von τ_{SR} von $T_{2,\mathbf{k}}$ kann anschaulich anhand des DP-Mechanismus verstanden werden. Für die Spinrelaxation durch den DP-Mechanismus ist die Präzession des Spins um das effektive Magnetfeld charakteristisch. Diese entspricht in der Eigenbasis der Differenz der Einteilchen-Energien, die die Spin-Bahn-Wechselwirkung implizit enthalten. Die Energiedifferenz tritt aber nur in der EOM von $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$ auf und somit ist es konsistent, wenn die Spinrelaxation von diesem Dichtematrixeintrag abhängt.

Um Missverständnisse zu vermeiden, ist nochmals zu betonen, dass die $T_{1,\mathbf{k}}$ und $T_{2,\mathbf{k}}$ Zeiten *per se* nicht die Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten darstellen. Erst die Untersuchung des Zerfalls von S und C führt auf die gesuchten makroskopischen Zeiten. Damit wird auch verständlich, warum die DP-Spinrelaxation in der Beschreibung enthalten ist, obwohl Glg. (2.116) den EY-Mechanismus nahe legt. Sowohl die Präzession des Spins, gegeben durch die Energiedifferenz in der EOM von $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$, als auch die Streuung bestimmt durch $T_{2,\mathbf{k}}$, ist enthalten. Liegt die Streuzeit im *motional narrowing* Regime, so führt dies zum DP-Mechanismus.

Die Tatsache, dass der Zusammenhang zwischen makroskopischen und mikroskopischen Zerfallszeiten, insbesondere der Spindphasierungszeit, nicht trivial ist, wurde bereits in Ref. [35] diskutiert. Dort wurde auf phänomenologische Weise erläutert, dass im Allgemeinen sowohl $T_{1,\mathbf{k}}$ als auch $T_{2,\mathbf{k}}$ zur Spindphasierung beitragen, jedoch ohne einen klaren Zusammenhang aufzuzeigen. Dieser ist in Form der Glgn. (2.116) und (2.117) mit Hilfe einer mikroskopischen Theorie gegeben. Die phänomenologische Argumentation von Ref. [35] ist somit mikroskopisch bewiesen und um die quantitative Darstellung des Zusammenhangs erweitert. Zusätzlich ist zu erwähnen, dass die in $T_{1,\mathbf{k}}$ und $T_{2,\mathbf{k}}$ einbezogenen Streumechanismen neben dem DP- und dem EY-Mechanismus auch noch den BAP-Mechanismus erfassen, der in Ref. [35] nicht berücksichtigt wurde.

Eine quantitative Bestimmung von Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten ist durch eine Simulation der Dynamik möglich. Im nächsten Kapitel wird daher die numerische Simulation der Spindynamik in verschiedenen Halbleiterstrukturen basierend auf dem mikroskopischen Modell des Dichtematrixformalismus präsentiert.

KAPITEL 3

Simulation der Spindynamik

Die numerische Simulation der Spindynamik in verschiedenen Halbleiter systemen unter Verwendung des Dichtematrixformalismus bildet den Mittelpunkt der folgenden Abschnitte. Zuerst werden Motivation und Ziele der Simulation formuliert. Darauf aufbauend werden einfache Modelle für verschiedene 2D-Halbleiterstrukturen eingeführt. Im Anschluss stellen wir die EOM der Elektronen auf. Im Unterschied zur Ladungsträgerdynamik berücksichtigen wir den Spin der Elektronen in den EOM explizit. Es folgt eine Beschreibung der numerischen Simulation der EOM. Im letzten Abschnitt werden die Ergebnisse der Simulation präsentiert und interpretiert. Der Vergleich mit experimentellen und theoretischen Arbeiten bildet den Abschluss.

3.1 Motivation

Im vorangegangenen Kapitel wurde der Zusammenhang zwischen den mikroskopischen T_1 - und T_2 -Zeiten der erweiterten Bloch-Gleichungen mit den Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten des Experiments diskutiert. Dabei wurde zur Beschreibung der experimentellen Observablen der Dichtematrixformalismus verwendet. Unser Ziel ist es, die Dynamik dieser Observablen zu simulieren. Der Dichtematrixformalismus hat im Gegensatz zu den bisherigen *phänomenologischen* Ansätzen, wie z. B. in Ref. [3], den Vorteil, dass die Gleichungen die Spindynamik beschreiben ohne Annahmen bzgl. der Streuzeit oder des Temperaturbereichs vorauszusetzen. Wir wollen folglich die Spindynamik im Rahmen einer vollständig mikroskopischen Beschreibung erfassen.

Aus den bisherigen Betrachtungen wird klar, dass die makroskopischen Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten in der Spin-up/down Basis definiert ist. Daraus verwenden wir in der numerischen Simulation diese Basis. Wir konzentrieren uns auf den Temperaturbereich größer 150 K, da dieser für zukünftige spintronische Bauelemente, die bei Raumtemperatur betrieben werden sollen, interessant ist. Dies bedeutet, dass die Streuung durch die Ladungsträger-Phonon-Wechselwirkung

dominiert wird. Wir vernachlässigen Vielteilchen-Effekte, wie die Coulomb-Wechselwirkung, und betrachten ausschließlich den DP-Mechanismus, wie im KAPITEL 2 erläutert. Wir beschränken unsere Untersuchungen auf das elektronische Subsystem in der 2D-Halbleiterstruktur, das auch von experimenteller Seite im Zentrum des Interesses steht. Die EOM sind bestimmt durch die der Einträge der Spindichtematrix aus Glg. (2.1).

3.2 Die Modellsysteme

Für die Numerik beschränken wir uns auf zwei exemplarische 2D-Halbleitersysteme, nämlich auf den *symmetrischen QW* (siehe Abb. 1.2(a)) und auf die *trigonale Heterostruktur* (siehe Abb. 1.1).

Als Material für den symmetrischen QW wählen wir das in den Experimenten zur Spinrelaxation gebräuchliche, nämlich AlGaAs und GaAs, das in (100) Richtung gewachsen ist. Das Potenzial in Wachstumsrichtung wird dann durch das quantenmechanische Modell eines Potenzialtopfs approximiert. Wir gehen davon aus, dass der QW *ideal symmetrisch* ist und beschränken uns auf Ladungsträgerdichten, die nur zu einer Besetzung des untersten Subbands führen. Als Modell verwenden wir den unendlich tiefen Potenzialtopf. Die Enveloppenfunktion des untersten Subbandzustandes hat die Form

$$\zeta(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(k_z z + \frac{\pi}{2}\right), \quad (3.1)$$

wobei L die Breite des QW ist. Durch die Wahl der Wellenfunktion vernachlässigen wir das endliche Eindringen des Zustands in die Barrieren des QW. Daher ist für unsere Betrachtungen nur das Trogmaterial (GaAs) von Bedeutung. Die quantisierte Eigenenergie des Zustands ist gegeben durch

$$\epsilon(z) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2}{L^2}, \quad (3.2)$$

was einer Quantisierung des Wellenvektors in z -Richtung entspricht. Er hat den Wert $k_z = \pi/L$. Da der symmetrische QW aufgrund des gewählten Materials nur durch den BIA-Term zur Spinrelaxation beitragen kann, ist das Modell geeignet die Spindynamik unter Einfluss des Dresselhaus-Terms zu untersuchen. Mit der vorgegebenen Wachstumsrichtung schreibt sich die Spin-Bahn-Wechselwirkung als

$$\Omega(\mathbf{k})|_{\text{BIA, 2D}} = \frac{\gamma}{\hbar} \begin{pmatrix} k_x (k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle) \\ k_y (\langle k_z^2 \rangle - k_x^2) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

In unserem Modell ist $\langle k_z^2 \rangle$ gleich $(\pi/L)^2$. Der Parameter γ kann durch die Materialparameter von GaAs ausgedrückt werden [2] und hat die Form

$$\gamma = \frac{4\Delta}{\sqrt{(E_g + \Delta)(3E_g + 2\Delta)}} \frac{m^*}{m_{cv}} \frac{1}{\sqrt{2m^*{}^3E_g}}. \quad (3.4)$$

m^*	$0,067 m_0$	Δ	0,341 eV
E_g	1,50 eV	ω_{LO}	35,4 meV
ϵ_s	12,9	ϵ_∞	10,8
m_0	$9,109 \times 10^{-31}$ kg		

Tabelle 3.1: Werte der Materialparameter der numerischen Simulation.

Die Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband ist gegeben durch E_g , die Spin-aufspaltung des Valenzbandes entspricht Δ und m_{cv} ist eine Konstante von der Größe der freien Elektronenmasse [2]. In der numerischen Simulation wurde m_{cv} gleich der freien Elektronenmasse m_0 gesetzt. Die verwendeten Werte der Materialparameter sind in Tabelle 3.1 aufgeführt.

Das zweite Modell der numerischen Untersuchung ist die trigonale Heterostruktur bestehend aus n -dotiertem AlGaAs und undotiertem GaAs. Der Potenzialverlauf in Wachstumsrichtung entspricht einem dreiecksförmigen Trog, wie in Abb. 1.1 dargestellt. Die Dreiecksform lässt sich durch die Stärke der n -Dotierung und zusätzlich durch ein externes elektrisches Feld steuern. Wie im Fall des QW vereinfachen wir die Betrachtung durch die Annahme, dass der Potenzialsprung an der Grenzfläche zwischen den Materialien unendlich hoch ist und die Wellenfunktion nicht in das AlGaAs eindringen kann. Dies hat, wie im QW-Modell, zur Folge, dass nur die Materialparameter von GaAs in der Simulation verwendet werden. Des Weiteren gehen wir auch hier von Ladungsträgerdichten aus, die nur zu einer Besetzung des untersten Subbands im trigonalen Trog führen. Wir verwenden für die Zustände im Trog die im KAPITEL 1 eingeführte Wellenfunktion, die Airy Funktion.

Wie der Potenzialverlauf des trigonalen Troges deutlich macht, handelt es sich um eine asymmetrische Heterostruktur, d. h. es existieren neben den BIA- auch SIA-Beiträge zur Spin-Bahn-Wechselwirkung. Um den numerischen Aufwand in behandelbaren Grenzen zu halten, beschränken wir uns ausschließlich auf den Rashba-Term. Eine Berücksichtigung des Rashba- *und* des Dresselhaus-Beitrags würde die Verwendung eines analytischen Modells zur Beschreibung der Heterostruktur unmöglich machen¹. In unserem Modell wird der Rashba-Term geschrieben als

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|_{\text{SIA}} = \frac{\alpha}{\hbar} \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

mit $\alpha = \alpha_0 E_z$ und $\alpha_0 = 5,33 \times 10^{-20}$ eV. Das elektrische Feld in Wachstumsrichtung, bestimmt durch die Dotierung und ein zusätzliches externes Feld, ist gegeben durch E_z .²

Die beiden vorgestellten Systeme machen es möglich, die Spinrelaxation und -dephasierung anhand von analytischen Modellen separat für BIA- und SIA-Terme

¹In diesem Fall wäre eine mikroskopische Beschreibung im Rahmen eines $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Modells notwendig, um $\langle k_z^2 \rangle$ zu bestimmen.

²Im Folgenden wird das elektrische Feld in Wachstumsrichtung mit E bezeichnet.

zu untersuchen. Eine mikroskopische Beschreibung der Spindynamik, basierend auf diesen Modellen, setzt die Lösung der EOM der Dichtematrixeinträge voraus.

3.3 Die Bewegungsgleichungen der Spindichtematrix

Für die mikroskopische Beschreibung der Spindynamik in der numerischen Simulation verwenden wir den Dichtematrixformalismus in der Spin-up/down Basis. Unser Ziel ist die Berechnung der Dynamik der makroskopischen Observablen S und C . Die Beiträge des Hamiltonians zur Dynamik können in zwei Anteile untergliedert werden.

Der kohärente Anteil ist gegeben durch Glg. (2.3). Da wir die Spindynamik bei hohen Temperaturen untersuchen, ist der zweite Anteil, die Streuung, bestimmt durch optische Phononen der Frequenz ω_{LO} [52]. In der Spin-up/down Basis ist der Streuanteil des Hamiltonians formal der gleiche wie im spinlosen Fall. Der Grund dafür ist, dass der Spin- und der orbitale Freiheitsgrad der Ladungsträger in dieser Basis entkoppelt sind. Dies hat zur Folge, dass die Streuung ausschließlich *spinerhaltend* ist. Der Hamiltonian und die zugehörigen EOM können damit aus dem spinlosen Multisubbandfall, wie z. B. in Ref. [94] dargestellt, übernommen werden. Wir beschränken uns dabei auf die Streubeiträge in zweiter Bornscher Näherung.

Die EOM des Diagonaleintrags $\varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k})$ ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) = & -\frac{1}{\hbar} \left[\Omega_x(\mathbf{k}) \Im\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} - \Omega_y(\mathbf{k}) \Re\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} \right] \\ & - [\Gamma_{\uparrow\uparrow}^{\text{out}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{\text{out}}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) \\ & + [\Gamma_{\uparrow\uparrow}^{\text{in}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{\text{in}}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k})], \end{aligned} \quad (3.6)$$

mit den Streuraten

$$\begin{aligned} \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{\text{out}}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |g^{\text{e}}(q)|^2 \delta [\epsilon(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) \mp \hbar\omega(T)] \\ & \times [1 - \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})] \left[\beta(T) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

und

$$\begin{aligned} \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{\text{in}}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |g^{\text{e}}(q)|^2 \delta [\epsilon(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) \mp \hbar\omega(T)] \\ & \times \varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \left[\beta(T) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right], \end{aligned} \quad (3.8)$$

die die Streuung aus bzw. in den untersuchten Zustand beschreiben. Beim Vergleich der Streuraten mit denen der Eigenbasis wird deutlich, dass hier nur innerhalb eines Spinzustandes gestreut wird, da die Wechselwirkungsmatrixelemente nicht explizit

vom Spin abhängen und die Besetzungswahrscheinlichkeiten sich nur auf einen Spin-zustands beziehen.

Die analoge EOM lässt sich für den Diagonaleintrag $\varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})$ in Form von

$$\begin{aligned}\partial_t \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) = & +\frac{1}{\hbar} \left[\Omega_x(\mathbf{k}) \Im\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} - \Omega_y(\mathbf{k}) \Re\{\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})\} \right] \\ & - [\Gamma_{\downarrow\downarrow}^{\text{out}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Gamma_{\downarrow\downarrow}^{\text{out}}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ & + [\Gamma_{\downarrow\downarrow}^{\text{in}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Gamma_{\downarrow\downarrow}^{\text{in}}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})]\end{aligned}\quad (3.9)$$

bestimmen. Sie unterscheidet sich im kohärenten Regime nur um ein Vorzeichen. Die Streuraten sind durch Ersetzung von \uparrow durch \downarrow in den Glgn. (3.7) und (3.8) gegeben.

Die Dynamik des Nebendiagonaleintrags $\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})$ unterliegt der EOM

$$\begin{aligned}\partial_t \varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{2\hbar} \left[i\Omega_x(\mathbf{k}) - \Omega_y(\mathbf{k}) \right] [\varrho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \varrho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})] \\ & - \frac{1}{2} \sum_{m=\uparrow,\downarrow} [\Gamma_{mm}^{\text{out}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Gamma_{mm}^{\text{out}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ & \quad + \Gamma_{mm}^{\text{in}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Gamma_{mm}^{\text{in}}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} m=\uparrow,\downarrow} [\bar{\Gamma}_{mm}^{\text{out}}(\mathbf{k}) + \bar{\Gamma}_{mm}^{\text{in}}(\mathbf{k})] \varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}).\end{aligned}\quad (3.10)$$

Wie im Fall der Eigenbasis ist der inkohärente Anteil des Nebendiagonaleintrags durch zwei Beiträge bestimmt. Der erste, proportional zu $\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})$, entspricht dem Boltzmann-Grenzfall und enthält die Summe aller Streuterme der Diagonaleinträge. Dies ist ein Charakteristikum, das aus der Ladungsträgerdynamik bekannt ist. Zusätzlich ergeben sich Beiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls, die proportional zu $\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ sind. Die entsprechenden Streuraten sind gegeben durch

$$\begin{aligned}\bar{\Gamma}_{mm}^{\text{out}}(\mathbf{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} |g^e(q)|^2 \delta [\epsilon(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) \mp \hbar\omega(T)] \\ & \times [1 - \varrho_{mm}(\mathbf{k})] \left[\beta(T) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]\end{aligned}\quad (3.11)$$

und

$$\begin{aligned}\bar{\Gamma}_{mm}^{\text{in}}(\mathbf{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} |g^e(q)|^2 \delta [\epsilon(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) \mp \hbar\omega(T)] \\ & \times \varrho_{mm}(\mathbf{k}) \left[\beta(T) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right].\end{aligned}\quad (3.12)$$

Auch sie weisen die Struktur auf, die aus der spinlosen Ladungsträgerdynamik zu erwarten ist. Aufgabe der numerischen Simulation ist es, das gekoppelte Gleichungssystem, gegeben durch die Glgn. (3.6), (3.9) und (3.10), zu lösen.

Um die makroskopische Spinpolarisation S und die makroskopische Spinkohärenz C , wie in den Glgn. (2.111) und (2.112) definiert, zu erhalten, müssen die Lösungen der EOM über \mathbf{k} aufsummiert werden. Die numerische Lösung des gekoppelten Gleichungssystems kann nur für diskrete \mathbf{k} -Werte durchgeführt werden. Folglich

muss der zweidimensionale kontinuierliche \mathbf{k} -Raum auf einem quadratischen Gitter äquidistant diskretisiert werden. Beziiglich dieser \mathbf{k} -Werte wird das gekoppelte Gleichungssystem unter Verwendung des *Runge-Kutta Verfahrens* [119, 84] iterativ durch *direkte Integration* gelöst. Zur Optimierung der Effizienz und der Genauigkeit der Methode wurde die *Runge-Kutta-Fehlberg-(4, 5)* Methode mit adaptiver Schrittweitensteuerung aus der **GSL**-Bibliothek [43] benutzt. Die Grenzen des Gitters wurden für alle untersuchten Parameterwerte bei der gleichen Energie gewählt, um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten. Aus Symmetriegründen kann die Integration der EOM auf den ersten Quadranten des \mathbf{k} -Raums beschränkt werden.

Die Numerik wird ab einer bestimmten Systemgröße bzw. ab einer Maximalzahl von Punkten im \mathbf{k} -Raum instabil. Dieser Wertebereich unterscheidet sich bei verschiedenen Parameterwerten um maximal 4 Punkte im ersten Quadranten. Um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse sicherzustellen, wurde die Anzahl der Gitterpunkte für alle Parameter auf den maximal möglichen Wert gesetzt, bei dem alle Rechnungen konvergieren.

Ein weiteres zu lösendes Problem stellt die Endlichkeit des \mathbf{k} -Raums in Zusammenhang mit der Streuung zwischen den einzelnen \mathbf{k} -Zuständen dar, da prinzipiell eine Streuung aus dem endlichen Bereich möglich ist. Um die Teilchenzahlerhaltung zu wahren, wird die Streuung aus dem gerasterten \mathbf{k} -Bereich unterdrückt. Der Bereich wird hinreichend groß gewählt, um eine Equilibrierung der Zustände zu ermöglichen, ohne dass das räumliche Raster zu ungenau wird. Eine Angabe von mathematischen Ausdrücken für die Erfüllung aller Bedingungen ist nicht möglich. Der ideale Parameterbereich kann nur anhand der Konvergenz der Numerik zuverlässig bestimmt werden.

Die Auswertung der Streuterme in den Glgn. (3.7), (3.8), (3.11) und (3.12), die aufgrund der Summation über die Endzustände, d. h. über die Wellenvektoren der möglichen Endzustände, ebenfalls nur numerisch möglich ist, wird in **ANHANG E** beschrieben. Die Darstellung der Ergebnisse der Numerik findet sich im nächsten Abschnitt.

3.4 Die Ergebnisse der Simulation

Prinzipiell ist für die Spindynamik der Elektronen eine Nichtgleichgewichtsverteilung der Spins notwendig. Diese wird experimentell durch die Anregung mit zirkular polarisiertem Licht erzeugt. Da wir uns bei der Simulation auf die Spindichtematrix des elektronischen Subsystems beschränken, müssen wir die Anfangsbedingungen in Übereinstimmung mit dieser Situation wählen, da der direkte Einfluss eines Lichtfeldes nicht berücksichtigt wird.

Wir gehen davon aus, dass eine spin-selektive Anregung vom Valenz- in das Leitungsband stattgefunden hat und die Elektronen in den beiden Spinzuständen thermisch equilibriert sind, d. h. die Besetzungsfunktionen der beiden Spinzustände entsprechen Fermiverteilungen mit unterschiedlichen chemischen Potenzialen. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da nach einer optischen Anregung die Thermalisierung der

Ladungsträger in den jeweiligen Spinreservoirs auf einer im Vergleich zur Spinrelaxationszeit sehr kurzen Zeitskala stattfindet und keine Langzeiteffekte auf die Spindynamik hat [115]. Die Ausgangssituation entspricht außerdem einer verschwindenden Spinkohärenz C zum Zeitpunkt $t = 0$. In der Simulation bedeutet dies, dass die Anfangswerte für die Dichtematrixeinträge gegeben sind durch

$$\varrho_{mm}(\mathbf{k})|_{t=0} = \frac{1}{e^{\frac{E(\mathbf{k})-\mu_m}{k_B T}} + 1} \quad (3.13)$$

$$\varrho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})|_{t=0} = 0, \quad (3.14)$$

mit m gleich \uparrow oder \downarrow . Im Gleichgewicht sind die beiden chemischen Potenziale gleich und durch die Fermienergie E_F gegeben, die sich mit Hilfe der Ladungsträgerdichte schreiben lässt als

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_s. \quad (3.15)$$

Über die Differenz der chemischen Potenziale $\mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ wird die Spinpolarisation S zum Zeitpunkt $t = 0$ variiert.

Die Präsentation und Diskussion der numerischen Ergebnisse wird entsprechend der unterschiedlichen Spin-Bahn-Wechselwirkungsmechanismen in die Fälle der Rashba- und der Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgespalten.

3.4.1 Spindynamik durch Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung

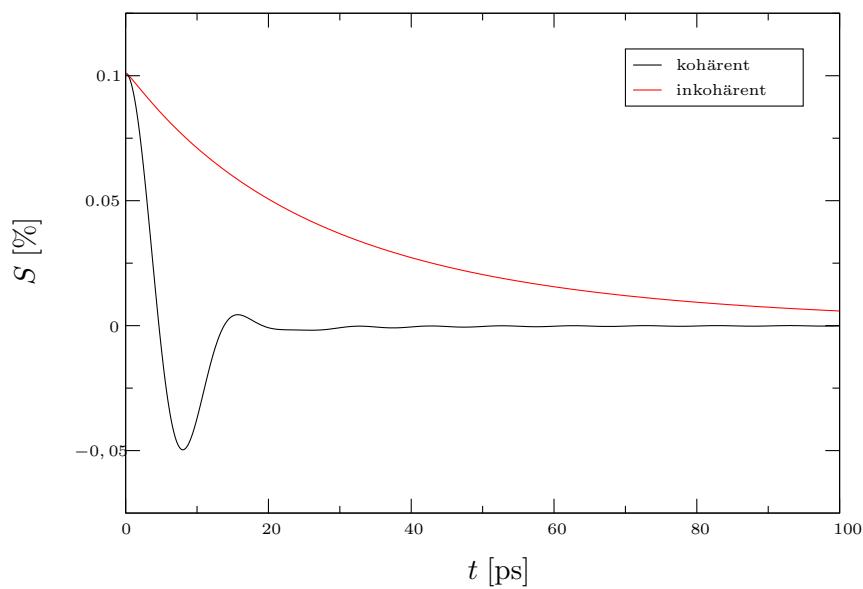
Im Fall der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung gehen wir von der trigonalen Heterostruktur aus, deren Form durch das elektrische Feld E gesteuert wird. Wie im ANHANG E erläutert, wird die Streuung in diesem Fall exakt berücksichtigt. Um den Effekt der Streuung auf die Spindynamik zu untersuchen, wird zuerst die Dynamik der Spinpolarisation S und der Spinkohärenz C mit und ohne Streuung betrachtet. Abb. 3.1 zeigt den wechselseitigen Einfluss von S auf C durch die Kopplung der EOM. Die ursprünglich nicht vorhandene Spinkohärenz wird durch die endliche Spinpolarisation aufgebaut. Im kohärenten Fall wird S auf einer sehr kurzen Zeitskala gedämpft, da die einzelnen Spins um lokal unterschiedlich starke Magnetfelder präzedieren. Dies entspricht den bekannten Beobachtungen von NMR- und ESR-Experimenten und stellt einen reversiblen Prozess dar. Die Spinkohärenz bleibt dagegen aufgrund der inkohärenten Summation im kohärenten Regime auf einem konstanten Niveau. Das Rauschen in C bei großen Zeiten beruht auf der Instabilität der direkten Integration.

Unter Berücksichtigung der Streuung ändert sich das Bild grundlegend. Die Zerfallszeit der Spinpolarisation wächst auf ein Vielfaches des kohärenten Regimes an und weist keine Oszillationen mehr auf. Dies ist ein Effekt des *motional narrowing* Regimes, da die Spins zwischen zwei Streuereignissen keine volle Präzession mehr ausführen können. Auch das Anwachsen der Spinrelaxationszeit ist diesem Regime bzw. dem damit verknüpften DP-Mechanismus zuzuschreiben, da die Streuung die Spinrelaxation wegen $\tau_{SR} \sim \tau_p^{-1}$ unterdrückt. Die maximale Spinkohärenz wird bei Berücksichtigung der Streuung im Vergleich zum kohärenten Regime stark unterdrückt. Die Spindphasierungszeit ist gegeben durch das Abklingen der Enveloppen

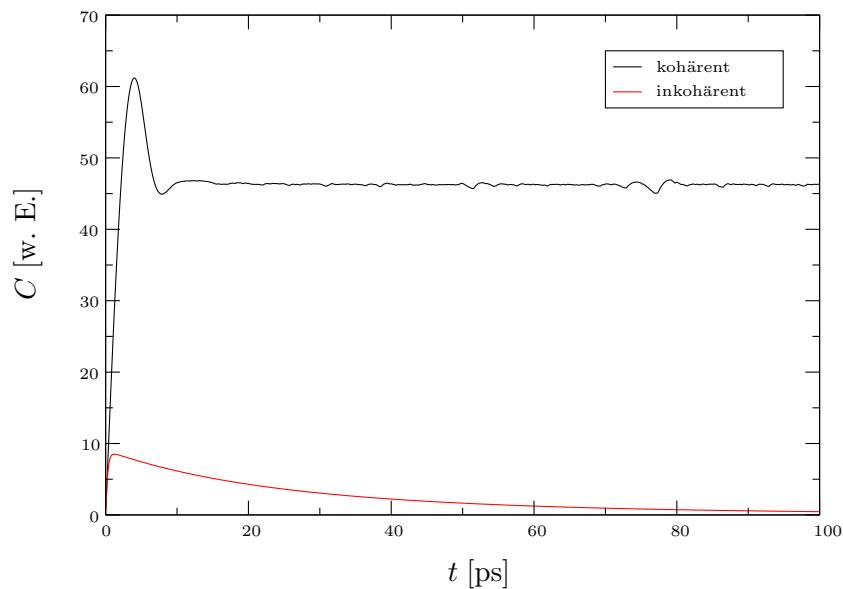
von C . Im Unterschied zum kohärenten Fall wird sie aufgrund der inkohärenten Summation vollständig abgebaut. Zusammenfassend ist festzustellen, dass durch die Streuung an LO-Phonenen das *motional narrowing* Regime erreicht und somit der DP-Mechanismus in der Simulation beschrieben wird.

Da wir nur Einteilchen-Effekte in der Simulation berücksichtigen, sollten die Spinrelaxations- und die Spindphasierungszeiten keine Abhängigkeit von der anfänglichen Spinpolarisation S oder der Ladungsträgerdichte n_s aufweisen. Die Resultate der Simulation sind unter Variation dieser Parameter in Abb. 3.2 und 3.3 gezeigt. Die Werte der Simulation sind durch Kreise (τ_{SR}) bzw. Quadrate (τ_{SD}) gekennzeichnet. Als Richtlinie dient die mittlere Zerfallszeit, die als durchgehende Linie eingezeichnet ist. Für die numerischen Werte wurden Fehlergrenzen von 10 % angenommen, die bei der direkten Integration gerechtfertigt sind. Man erkennt, dass die Ergebnisse wie erwartet praktisch keine Abhängigkeit bzgl. der Parameter S und n_s aufweisen. Allerdings ist bei der Variation von S eine leicht steigende Tendenz bei der Spindphasierungszeit festzustellen. Diese ist ein rein numerisches Artefakt. Es beruht darauf, dass mit steigender Spinpolarisation bei konstanter Ladungsträgerdichte in einem Spinreservoir effektiv mehr „Streukanäle“ zur Verfügung stehen als bei niedrigeren Spinpolarisationen. Dies führt zu einer kürzeren Streuzeit und damit entsprechend des DP-Mechanismus zu einer längeren Spindphasierungszeit. Die Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte zeigt in beiden Fällen [Abb. 3.3(a) und 3.3(b)] eine leicht sinkende Tendenz, deren Ursprung ebenfalls in der Numerik zu suchen ist. Bei Zunahme des Parameterwerts n_s steigt entsprechend Glg. (3.15) die Fermienergie. Da die *cut-off* Energie in der Simulation in allen Fällen gleich gewählt wurde, bedeutet dies, dass für die Randomisierung im diskretisierten \mathbf{k} -Raum weniger Zustände zur Verfügung stehen und folglich die Streuung weniger effektiv ist, was sich in einer längeren Streuzeit τ_p manifestiert. In Übereinstimmung mit dem DP-Mechanismus werden dann die Zeiten τ_{SR} und τ_{SD} kürzer.

Interessante Effekte treten bei der Variation des elektrischen Feldes E auf, das die Stärke der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung bestimmt. Die numerischen Resultate sind in Abb. 3.4(a) dargestellt. Die Variation von E ändert die mittlere Präzessionsfrequenz der Elektronenspins, d. h. je größer das Feld, desto „schneller“ die Präzessionsbewegung. Da die Temperatur in allen Rechnungen konstant gehalten wird, bleibt die Streureate aufgrund der Streuung an optischen Phononen konstant. Je nach Feldstärke können die Spins ihre Präzessionsbewegung um das effektive Magnetfeld unterschiedlich weit ausführen, bevor sie gestreut werden. Damit ist es möglich, die Dynamik in verschiedene Regime zu führen. Für kleine Feldstärken bzw. langsame Präzessionsgeschwindigkeiten befindet man sich im *motional narrowing* Regime, in dem die Relaxationszeiten durch einen exponentiellen Abfall der Spinpolarisation bestimmt sind. Dies ist bis zu einer Feldstärke von ca. $1,0 \times 10^5$ V/cm der Fall. Die Spinrelaxationszeiten nehmen mit steigender Feldstärke bzw. Präzessionsfrequenz ab. Für höhere Feldstärken kommt man in einen Übergangsbereich, in dem die Spinpolarisation nicht mehr dem exponentiellen Zerfall unterliegt. Erhöht man die Feldstärke weiter, so verlässt man das *motional narrowing* Regime und die Spins können wieder volle Präzessionszyklen durchlaufen. Dies manifestiert sich in den Oszillationen von S bei $E = 7,5 \times 10^5$ V/cm und $E = 1,0 \times 10^6$ V/cm. Der

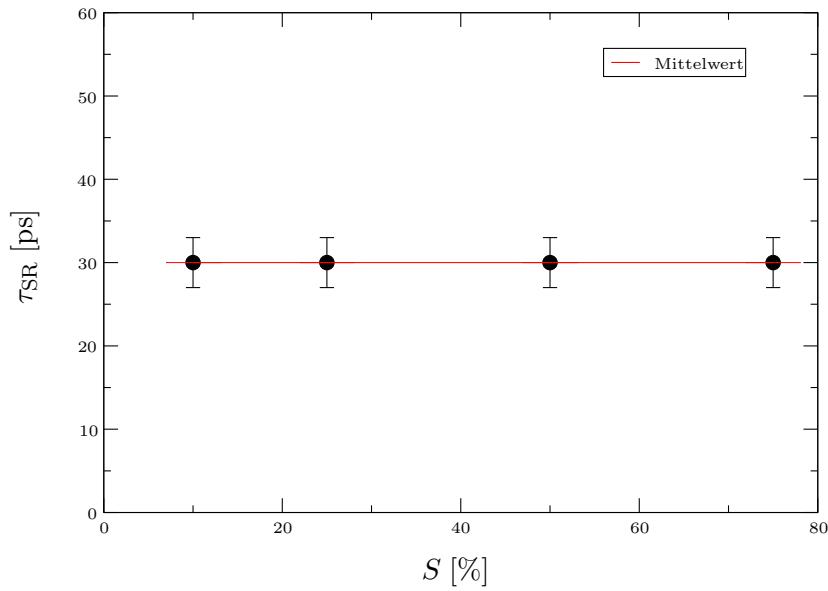


(a) Spinpolarisation - SIA

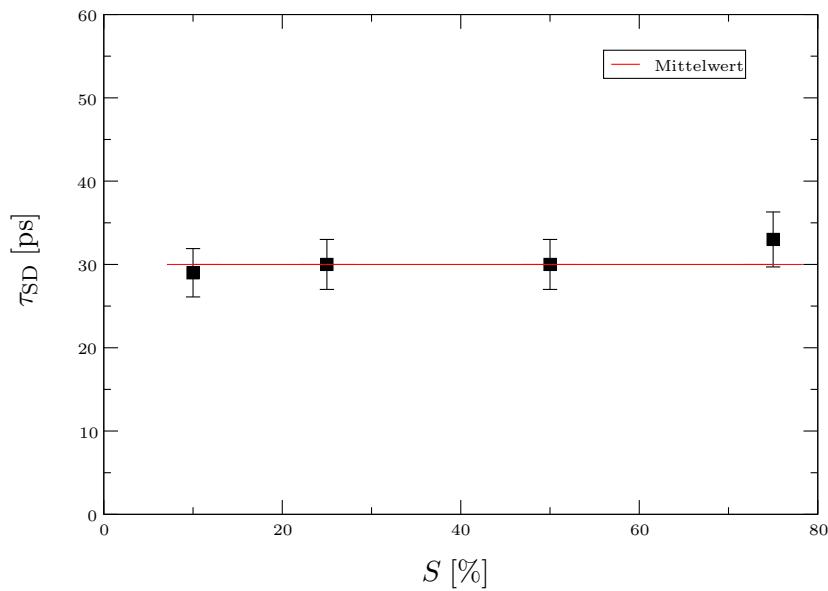


(b) Spinkohärenz - SIA

Abbildung 3.1: Vergleich der Dynamik der Spinpolarisation S und der Spinkohärenz C mit und ohne Streuung unter Einfluss der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die Parameter der Simulation sind $T = 200$ K, $n_s = 4,0 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$, $E = 1,0 \times 10^5$ V/cm und $S = 10\%$.

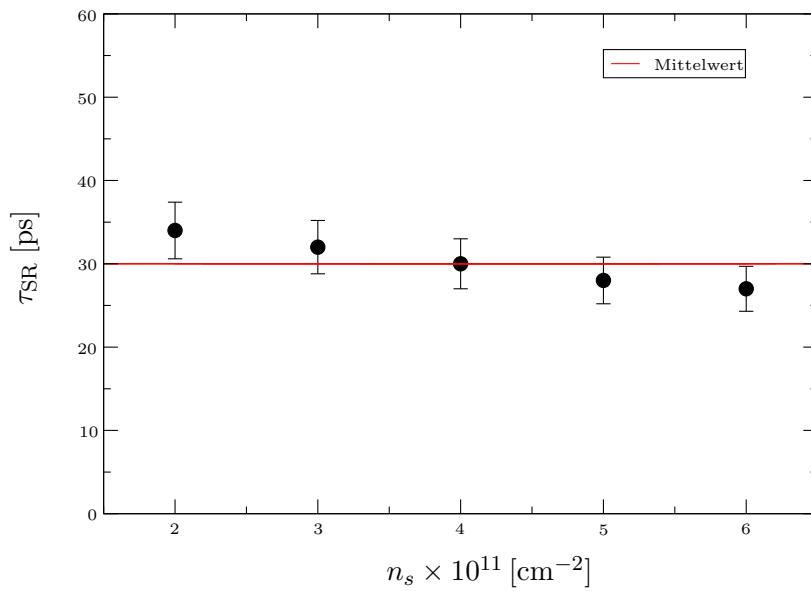


(a) Spinrelaxationszeit - SIA

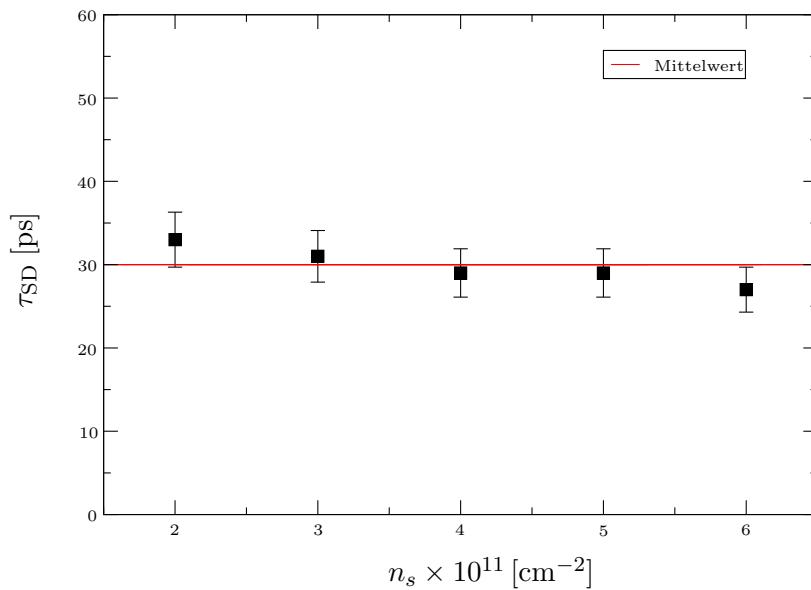


(b) Spindephasierungszeit - SIA

Abbildung 3.2: Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindephasierungszeit von der Spinpolarisation S . Die Parameter der Simulation sind $T = 200\text{ K}$, $n_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ und $E = 1,0 \times 10^5 \text{ V/cm}$. Die mittleren Spinrelaxations- bzw. Spindephasierungszeiten sind als rote Linie dargestellt. Die schwarzen Punkte bzw. Quadrate kennzeichnen die Werte der Simulation.



(a) Spinrelaxationszeit - SIA



(b) Spindphasierungszeit - SIA

Abbildung 3.3: Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeit von der Ladungsträgerkonzentration n_s . Die Parameter der Simulation sind $T = 200\text{ K}$, $E = 1,0 \times 10^5 \text{ V/cm}$ und $S = 10\text{ \%}$. Die mittleren Spinrelaxations- bzw. Spindphasierungszeiten sind als rote Linie dargestellt. Die schwarzen Punkte bzw. Quadrate kennzeichnen die Werte der Simulation.

beschriebene Verlauf der Dynamik kann mit der phänomenologischen Theorie des DP-Mechanismus nicht dargestellt werden, da sie ausschließlich auf das *motional narrowing* Regime beschränkt ist.

Betrachtet man die Resultate der Simulation in Abhängigkeit von E , so ergibt sich eine charakteristische Abhängigkeit der mit E verknüpften Quantisierungsenergie ϵ der Zustände im dreiecksförmigen Potenzialtopf. Nach der Theorie von D'yakonov und Perel' gehorcht die Spinrelaxationszeit der Relation [28]

$$\tau_{\text{SR}} \sim \frac{1}{\epsilon^2}, \quad (3.16)$$

mit der Eigenenergie ϵ des quantisierten Zustandes. Für die trigonale Heterostruktur lässt sich diese Relation mit dem Feld E umformen zu [4]

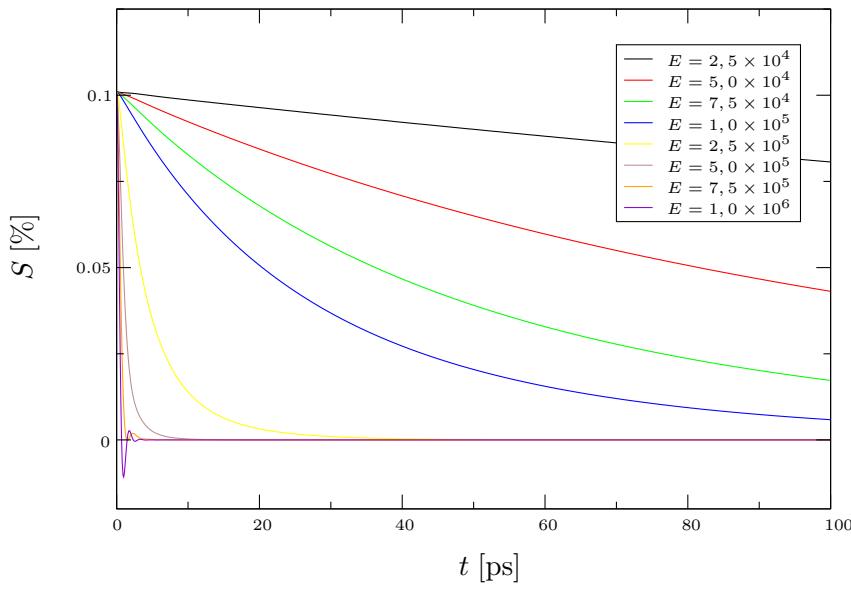
$$\tau_{\text{SR}} \sim \frac{1}{E^{4/3}}. \quad (3.17)$$

Diese Abhängigkeit ist in Abb. 3.4(b) gezeigt. Die schwarze Linie ergibt sich aus der Simulation, wobei die Punkte die einzelnen Rechnungen symbolisieren, während die analytische Abhängigkeit durch die rote Linie dargestellt ist. Man erhält eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Kurven. Die numerische Rechnung unterschätzt die Spinrelaxationszeiten über den gesamten Bereich, was eine Folge der Rasterung des \mathbf{k} -Raums mit endlich vielen Stützstellen ist. Analoge Ergebnisse ergeben sich für die Spinkohärenz C und die Abhängigkeit der Spindphasierungszeit τ_{SD} vom Feld E .

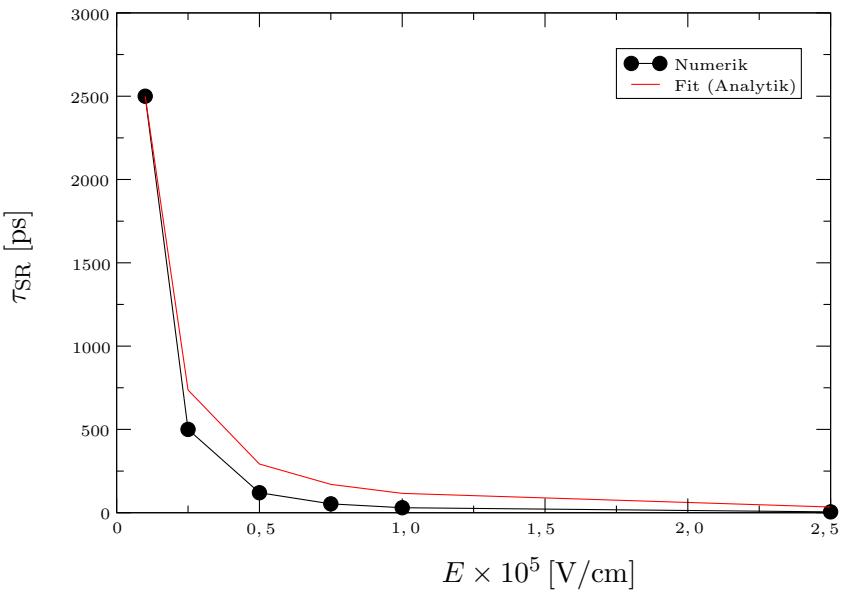
Der letzte zu variierende Parameter der Rechnung ist die Temperatur T . Die Ergebnisse der Simulation für τ_{SR} und τ_{SD} bei verschiedenen Temperaturen sind in Abb. 3.5 abgebildet. Die Theorie nach D'yakonov Perel' [28] prognostiziert für die Abhängigkeit von der Temperatur ein Verhalten der Spinrelaxationszeit wie $1/T$. Dieses Verhalten, in der Abbildung durch die gestrichelte Kurve angedeutet, kann nicht reproduziert werden. Es ist aber zu beachten, dass die DP-Theorie in ihrer phänomenologischen Herleitung für alle Temperaturen von einer festen Streuzeit τ_p ausgeht. Dies ist in unserer mikroskopischen Theorie nicht der Fall, da hier die Streureate und damit die Streuzeit über die phononische Besetzungsdichte explizit von der Temperatur abhängt (siehe ANHANG E). Im Fall des DP-Mechanismus gilt, dass Streuzeit und Spinrelaxationszeit invers proportional zueinander sind. Will man die komplette Temperaturabhängigkeit der Spinrelaxationszeit erfassen, so ist daher folgende Beziehung zu betrachten

$$\begin{aligned} \tau_{\text{SR/SD}} &\sim [T \tau_p(T)]^{-1} \\ &\sim \left[T \left(e^{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k_B T}} - 1 \right) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Vergleicht man das Verhalten der numerischen Ergebnisse mit der Relation (3.18), so stellt man eine gute Übereinstimmung fest. Das dargestellte Verhalten ist der phänomenologischen Theorie *a priori* nicht zugänglich, da sie die Temperaturabhängigkeit der Streuzeit nicht erfassen kann, sondern nur die zwei Grenzfälle von hoher und tiefer Temperatur bei fester Streuzeit betrachtet.

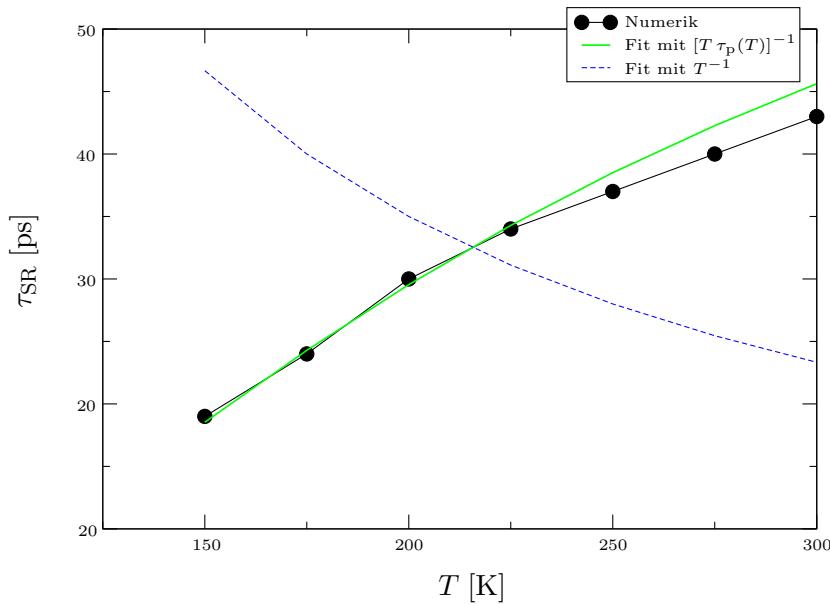


(a) Spinpolarisation - SIA

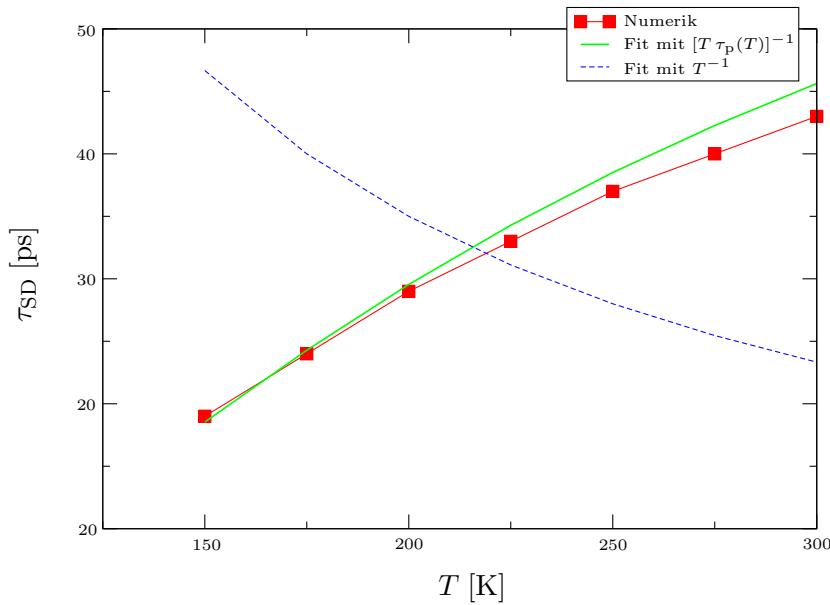


(b) Spinrelaxationszeit - SIA

Abbildung 3.4: Abhängigkeit der Spinrelaxationszeit vom elektrischen Feld E . In Abb. 3.4(a) wird das angelegte elektrische Feld variiert. Die Einheiten der angegebenen Felder sind V/cm . Die Parameter der Simulation sind $T = 200 \text{ K}$, $n_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ und $S = 10 \%$. Abb. 3.4(b) zeigt die Spinrelaxationszeit in Abhängigkeit des Feldes E (schwarze Linie), wobei die Punkte den simulierten Werten entsprechen. Die rote Linie zeigt den Fit mit der Funktion $E^{-4/3}$. Die Parameter der Simulation sind $T = 200 \text{ K}$, $n_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ und $S = 10 \%$.



(a) Spinrelaxationszeit - SIA



(b) Spinphasierungszeit - SIA

Abbildung 3.5: Abhängigkeit der Spinrelaxations- und der Spinphasierungszeit von der Temperatur T . In den Abbildungen 3.5(a) und 3.5(b) sind die numerischen Ergebnisse durch die schwarze bzw. rote Linie dargestellt. Die Symbole entsprechen den einzelnen Simulationspunkten. Die blaue gestrichelte Linie ist der Verlauf der $1/T$ -Abhängigkeit. Die grüne Linie zeigt den Fit mit der Funktion $1/[T \tau_p(T)]$. Die Parameter der Simulation sind $n_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $E = 1,0 \times 10^5 \text{ V/cm}$ und $S = 10\%$.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Simulation die qualitativen Eigenschaften der DP-Spinrelaxation sehr gut beschreibt und gegenüber der phänomenologischen Theorie den Vorteil besitzt, ohne Annahmen bzgl. der Streuung bzw. der Streuzeit auszukommen. Betrachtet man die sich ergebenden Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten *quantitativ*, so muss man feststellen, dass die Resultate nicht den Erwartungen entsprechen, d. h. die Spinrelaxationszeiten prinzipiell stark unterschätzt werden.

Dies hat drei wesentliche Gründe. Der erste beruht auf dem sehr einfachen Modell der Quantenstruktur, das wir verwenden. Das Modell entspricht nicht den realen Strukturen, insbesondere vernachlässigen wir den BIA-Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung und damit die wechselseitige Beeinflussung des SIA- und des BIA-Terms, was im Experiment nicht möglich ist. Der zweite Grund ist, dass wir die Simulation im Einteilchen-Bild durchführen und Vierteilchen-Effekte vernachlässigen. Letztere werden in der phänomenologischen Berechnung der Spinrelaxation mit einbezogen, da dort die elektronischen Mobilitäten des Experiments zur Bestimmung der Streuzeiten benutzt werden. Der dritte und wichtigste Punkt für die Diskrepanz zwischen numerischer Simulation und experimentellen Daten ist aber die Restriktion auf eine endliche Anzahl von Punkten im \mathbf{k} -Raum, die zur Berechnung der Streuung verwendet werden. Hier setzt die Methode der direkten Integration Grenzen, die noch zu überwinden sind. Der letzte Punkt ist unserer Ansicht nach der Grund für die prinzipielle Unterschätzung der Streuzeiten in der Simulation. Trotzdem geben die qualitativen Ergebnisse einen ersten Einblick in das Potenzial der mikroskopischen Theorie im Vergleich zur phänomenologischen Behandlung. Diese ist auch für die im nächsten Abschnitt behandelte Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung zu erkennen.

3.4.2 Spindynamik durch Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung

Betrachtet man einen symmetrischen QW, so ist der einzige Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung gegeben durch den BIA-Term. Er führt, im Unterschied zum SIA-Term, zu einem effektiven Magnetfeld, das nicht nur vom Betrag von \mathbf{k} abhängt, sondern auch von dessen Richtung. Diese Abhängigkeit geht in die zeitliche Evolution der elektronischen Verteilungsfunktionen ein. Die Relevanz der Richtungsabhängigkeit nimmt für große Zeiten zu. Wie im ANHANG E angesprochen, vernachlässigen wir die Richtungsabhängigkeit des effektiven Magnetfeldes in der Berechnung der Streuintegrale und nehmen dafür eine unterschätzte Streureate in Kauf.

Wie im Fall der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung betrachten wir zuerst den Unterschied zwischen der kohärenten und der inkohärenten Dynamik. Man erkennt in Abb. 3.6 im kohärenten Regime die Oszillationen aufgrund der Präzession der Spins um das effektive Magnetfeld. Charakteristisch ist das Abklingen der Oszillationen auch ohne Streuung aufgrund der räumlichen Inhomogenität des Magnetfeldes. Für große Zeiten ist ein leichtes Rauschen auf der Oszillation zu erkennen, das die Instabilität der Numerik zeigt. Berücksichtigt man die Streuung, so ergibt sich im *motional narrowing* Regime eine Unterdrückung der Oszillationen, da die Spins ihre Präzes-

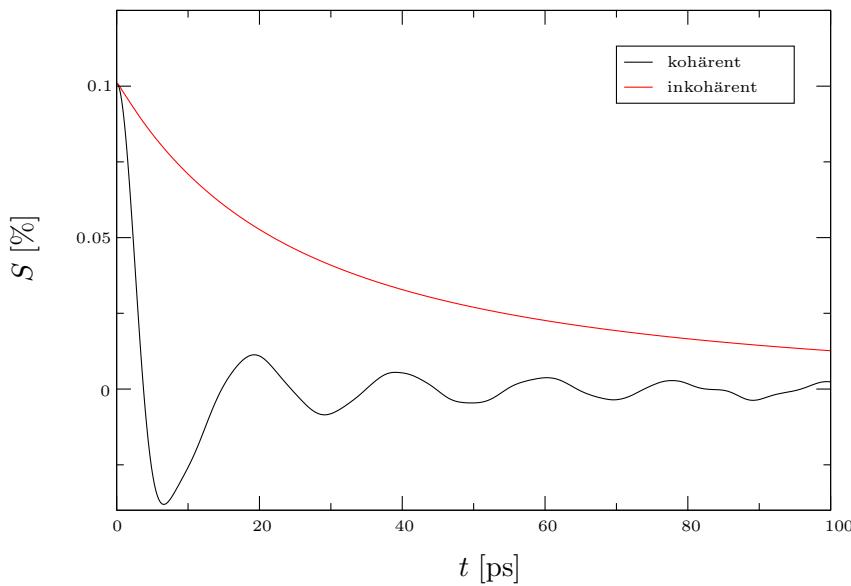
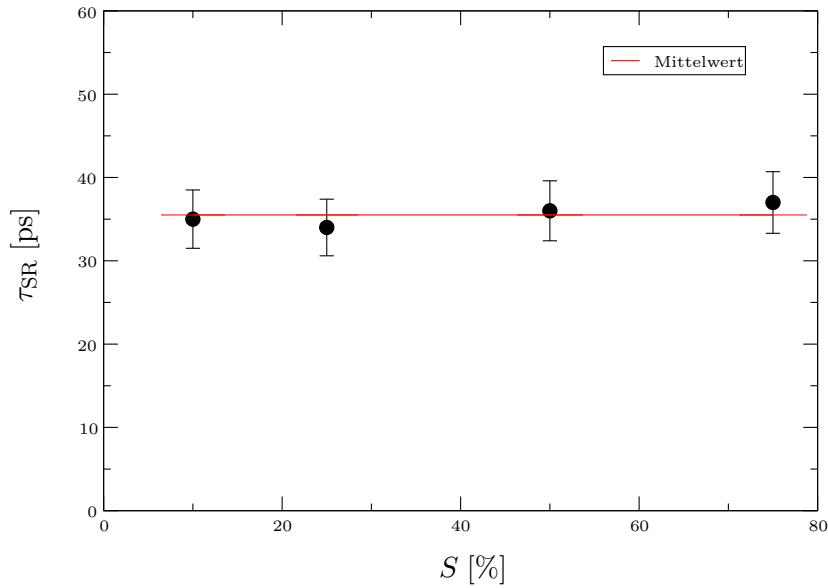


Abbildung 3.6: Vergleich der Dynamik der Spinpolarisation S mit und ohne Streuung unter Einfluss der Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die Parameter der Simulation sind $T = 200 \text{ K}$, $n_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $L = 15 \text{ nm}$ und $S = 10 \%$.

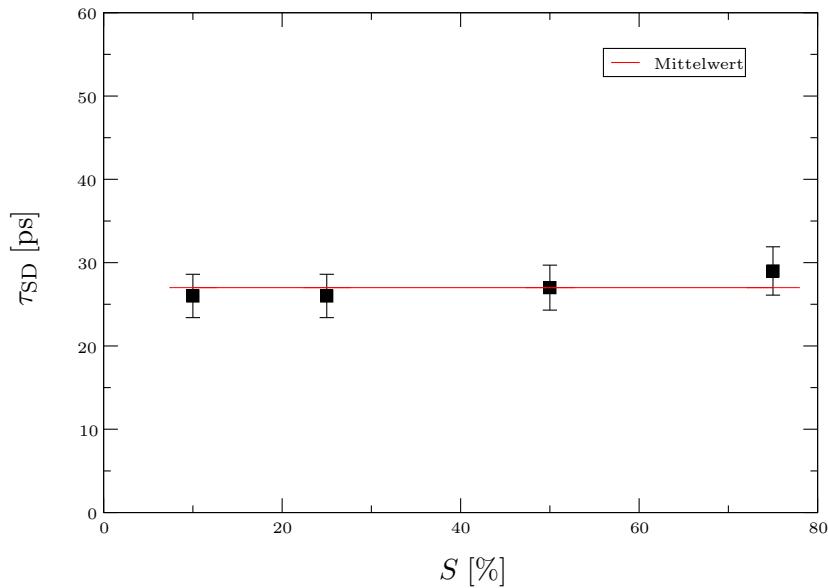
sionsbewegung nicht vollenden können. Darüber hinaus wird die Spinrelaxationszeit im Vergleich zum kohärenten Regime verlängert, was ein Charakteristikum des DP-Mechanismus darstellt. Die zeitliche Entwicklung der Spinkohärenz wurde hier nicht dargestellt, da sie derjenigen der SIA-Spin-Bahn-Wechselwirkung entspricht und somit keine neuen Informationen liefert.

Als nächstes untersuchen wir die Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten von der Spinpolarisation (Abb. 3.7) und von der Ladungsträgerdichte (Abb. 3.8). In beiden Fällen erwarten wir eine Unabhängigkeit der Zeiten vom varierten Parameter. Diese ist im Rahmen der numerischen Möglichkeiten erfüllt, d. h. die Simulationswerte weichen um nicht mehr als 10 % von den mittleren Werten ab. Wie im Fall der SIA-Spin-Bahn-Wechselwirkung weist die Abhängigkeit von der Spinpolarisation ein leicht steigendes Verhalten mit wachsender Polarisation auf, während die Ladungsträgerdichteabhängigkeit tendenziell sinkt. Die Abweichungen der Simulation vom erwarteten Verhalten beruhen auf numerischen Effekten und sind bereits im Fall des SIA-Spin-Bahn-Terms diskutiert und gerechtfertigt worden. Im Unterschied zum vorherigen Fall sind hier die Werte für die Spinrelaxations- und die Spindphasierungszeit unterschiedlich groß. Der Unterschied beruht auf der Richtungsabhängigkeit der Stärke des effektiven Magnetfelds [139]. Die Richtungsanisotropie, die im Fall der Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung nicht vorhanden ist, führt zu dem Unterschied zwischen τ_{SR} und τ_{SD} . Wie nach Ref. [139] zu erwarten, bleibt die Relation $\tau_{\text{SD}} \leq 2\tau_{\text{SR}}$ gültig.

Die Untersuchung der Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeit von der Trogbreite L des QW wird im Folgenden dargestellt. Die Trogbreite geht sowohl in den Dresselhaus-Parameter und damit in die Präzessionsfrequenz, als auch in

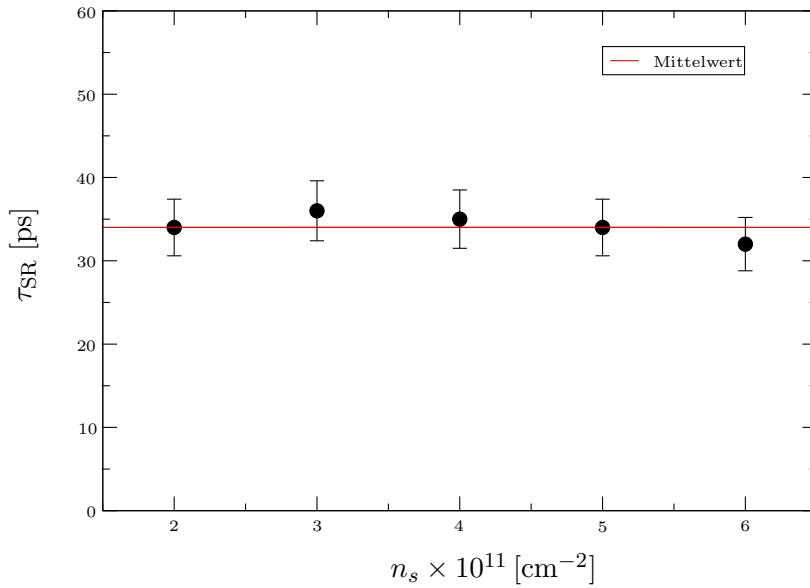


(a) Spinrelaxationszeit - BIA

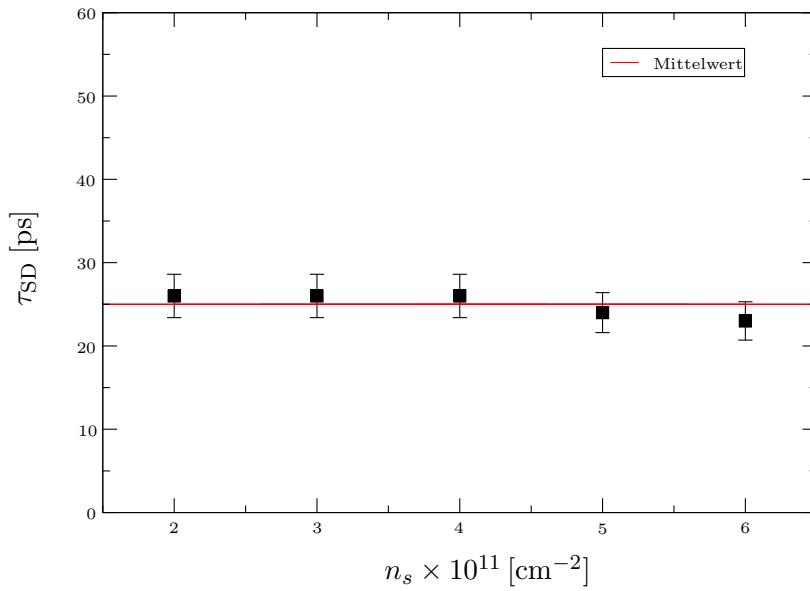


(b) Spindphasierungszeit - BIA

Abbildung 3.7: Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeit von der Spinpolarisation S . Die Parameter der Simulation sind $T = 200\text{ K}$, $n_s = 4,0 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$ und $L = 15\text{ nm}$. Die mittleren Spinrelaxations- bzw. Spindphasierungszeiten sind als rote Linie dargestellt. Die schwarzen Punkte bzw. Quadrate kennzeichnen die Werte der Simulation.



(a) Spinrelaxationszeit - BIA



(b) Spindphasierungszeit - BIA

Abbildung 3.8: Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeit von der Ladungsträgerkonzentration n_s . Die Parameter der Simulation sind $T = 200 \text{ K}$, $L = 15 \text{ nm}$ und $S = 10 \%$. Die mittleren Spinrelaxations- bzw. Spindphasierungszeiten sind als rote Linie dargestellt. Die schwarzen Punkte bzw. Quadrate kennzeichnen die Werte der Simulation.

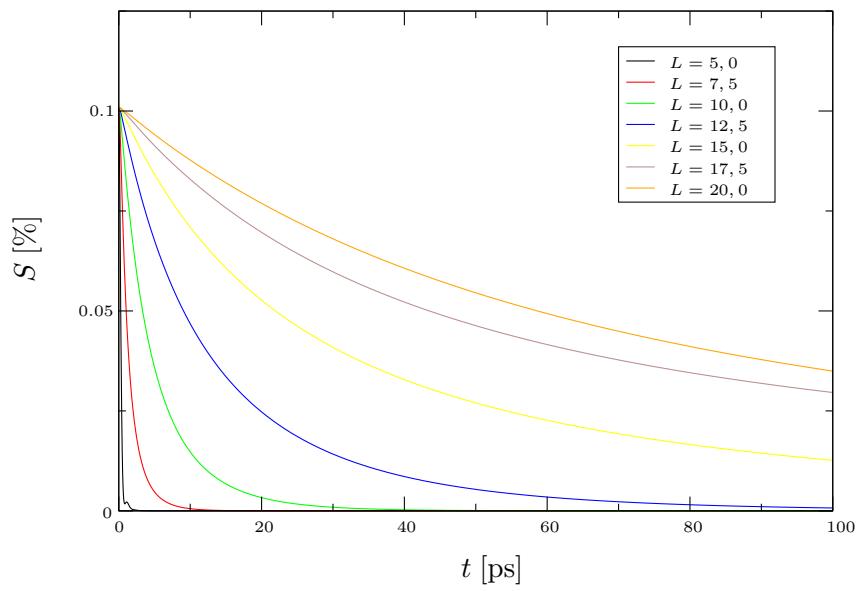
die Quantisierungsenergien der Zustände im Trog ein. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abb. 3.9 präsentiert. Wegen der L -Abhängigkeit des Dresselhaus-Parameters führt eine Variation des Parameters zu unterschiedlichen Präzessionsregimen. Dies zeigt Abb. 3.9(a). Man erkennt, dass die Verringerung der Trogbreite zu einer Abnahme der Spinrelaxationszeit führt. Außerdem weist die Dynamik einen Übergang vom *motional narrowing* Regime (bis zu $L = 12,5$ nm), das durch einen exponentiellen Zerfall der Spinpolarisation gekennzeichnet ist, über einen Zwischenbereich hin zum entgegengesetzten Regime ($L = 5,0$ nm) auf. In letzterem können die Spins eine volle Präzession durchführen und in der Observablen zeigen sich schwache Oszillationen. Das Durchlaufen der unterschiedlichen Verhältnisse von Präzessionsdauer zu Streuzeit zeigt den Vorteil der mikroskopischen Rechnung, da dies der phänomenologischen Theorie nicht zugänglich ist.

Die Zunahme der Spinrelaxationszeit mit der Breite des QW entspricht den theoretischen Erwartungen. Sie manifestiert sich in der Abhängigkeit der Spinrelaxationszeit von der Quantisierungsenergie, wie Abb. 3.9(b) zeigt. Entsprechend den analytischen Ergebnissen aus Ref. [28] ist die Spinrelaxationszeit wegen Glg. (3.16) proportional zum Inversen des Quadrats der Quantisierungsenergie. Die Quantisierungsenergie selbst ist entsprechend Glg. (3.2) proportional zum Inversen des Quadrats der Trogbreite. Man erwartet damit eine Proportionalität von τ_{SR} zu L^4 . Der Vergleich des analytischen Ergebnisses mit der numerischen Simulation in Abb. 3.9(b) weist genau diese Abhängigkeit auf. Somit erhalten wir für die BIA-Spin-Bahn-Wechselwirkung eine qualitative Übereinstimmung mit den Erwartungen der analytischen Theorie. Die gleichen Aussagen gelten auch für die Spindphasierungszeit.

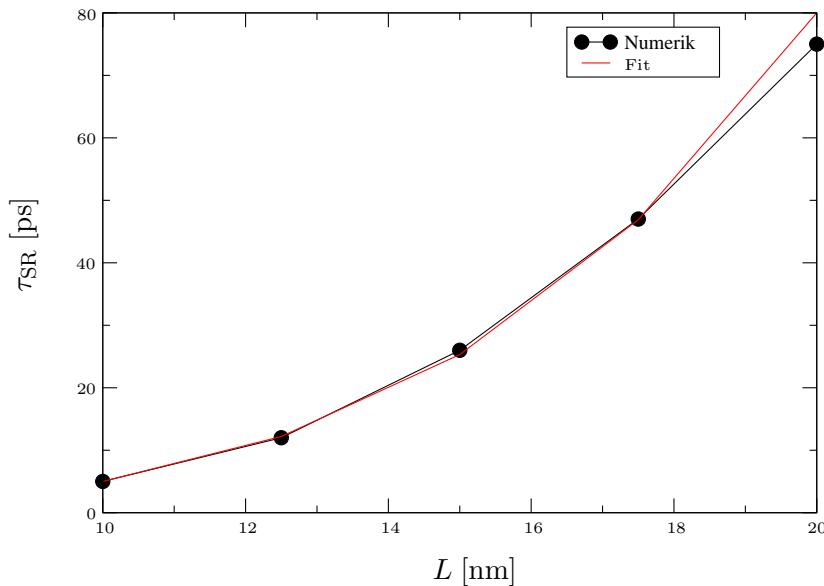
Der letzte Punkt der Untersuchungen bezieht sich auf die Variation der Temperatur T . Die Resultate der Simulation sind in Abb. 3.10 für die Spinrelaxations- und die Spindphasierungszeit dargestellt. Wie im Fall der SIA-Spin-Bahn-Wechselwirkung weisen die Ergebnisse der Simulation nicht das $1/T$ Verhalten auf. Durch die explizite Temperaturabhängigkeit der Streureate über die phononische Besetzungszahl zeigt sich auch hier das Verhalten entsprechend Glg. (3.18).

Wie für die trigonale Heterostruktur ergeben sich für den QW beim quantitativen Vergleich mit Ergebnissen aus Experimenten deutliche Diskrepanzen. Zusätzlich zu den im Abschnitt über die SIA-Spin-Bahn-Wechselwirkung erläuterten Problemen der Simulation kommt die eingangs erwähnte generelle Unterschätzung der Streuung zum Tragen, was zu einer weiteren Verschlechterung der quantitativen Auswertung führt. Trotzdem zeigen die qualitativen Übereinstimmungen mit der analytischen Theorie und die zusätzlichen Möglichkeiten im Vergleich zur phänomenologischen Theorie auch hier das Potenzial des mikroskopischen Ansatzes auf, die *a priori* Annahmen bzgl. des Streu- und Temperaturregimes überflüssig machen.

Bei der Betrachtung der Ergebnisse der Simulation fällt besonders das Verhalten der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten in Abhängigkeit der Temperatur auf. Aus den bereits erwähnten Gründen entspricht diese nicht dem der phänomenologischen Theorie. Von theoretischer Seite wurde die phänomenologische Theorie vor kurzem für beliebige Temperaturen verallgemeinert [53]. In dieser Herleitung wurde aber nur die Streuzeit für verschiedene Temperaturen verallgemeinert, die wesentlichen Punkte der Herleitung an sich wurden in Analogie zur ursprünglichen

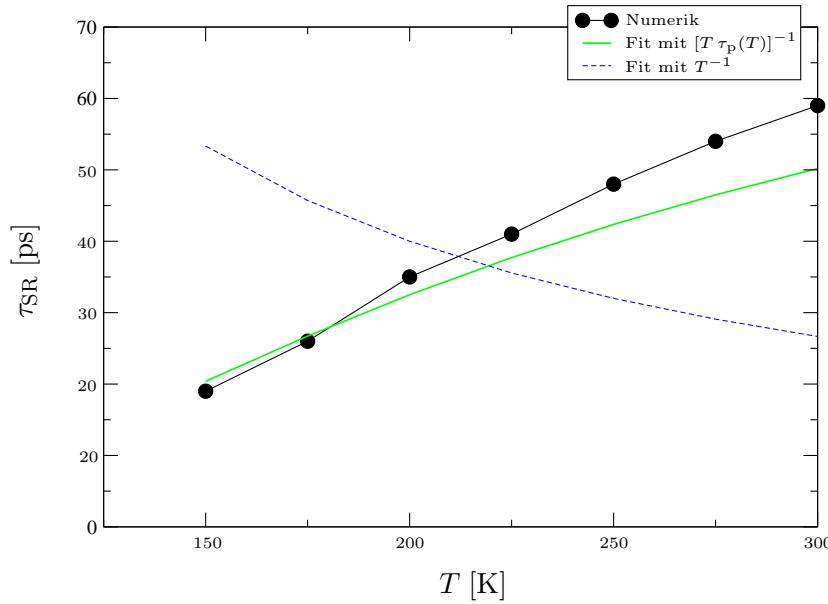


(a) Spinpolarisation - BIA

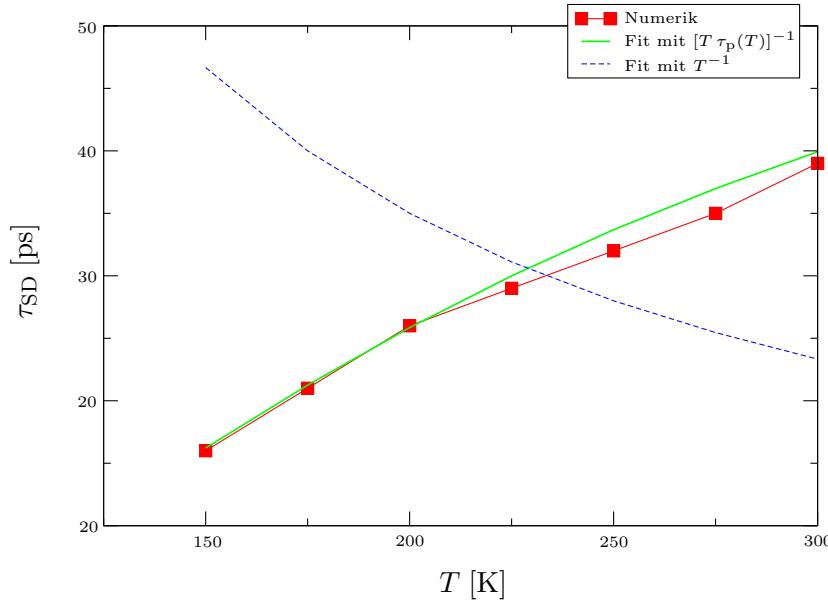


(b) Spinrelaxationszeit - BIA

Abbildung 3.9: Abhängigkeit der Spinrelaxationszeit von der Trogbreite L . In Abb. 3.9(a) wird die Trogbreite variiert. Die Einheiten der angegebenen Breiten sind nm. Die Parameter der Simulation sind $T = 200$ K, $n_s = 4,0 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$ und $S = 10\%$. Abb. 3.9(b) zeigt die Spinrelaxationszeit in Abhängigkeit der Breite L (schwarze Linie), wobei die Punkte den simulierten Werten entsprechen. Die rote Linie zeigt den Fit mit der Funktion L^4 . Die Parameter der Simulation sind $T = 200$ K, $n_s = 4,0 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$ und $S = 10\%$.



(a) Spinrelaxationszeit - BIA



(b) Spindphasierungszeit - BIA

Abbildung 3.10: Abhangigkeit der Spinrelaxations- und der Spindphasierungszeit von der Temperatur T . In den Abbildungen 3.10(a) und 3.10(b) sind die numerischen Ergebnisse durch die schwarze bzw. rote Linie dargestellt. Die Symbole entsprechen den einzelnen Simulationspunkten. Die blaue gestrichelte Linie ist der Verlauf der $1/T$ -Abhangigkeit. Die grune Linie zeigt den Fit mit der Funktion $1/[T \tau_p(T)]$. Die Parameter der Simulation sind $n_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $L = 15 \text{ nm}$ und $S = 10\%$.

Phänomenologie durchgeführt. Leider wurden die darauf aufbauenden Rechnungen nur für Temperaturen bis zu 120 K durchgeführt. Man erkennt aber auch dort im Bereich jenseits von 100 K eine ansteigende Tendenz der Spinrelaxationszeiten für die Streuung an optischen Phononen, die dort als Streuung vom Typ II bezeichnet wird. Auf experimenteller Seite ergeben sich ähnliche Erkenntnisse in den Arbeiten [110], [86] und [87]. Auch dort ist in den experimentellen Daten eine Sättigung oder ein Anstieg der Spinrelaxationszeit für Temperaturen größer als 150 K zu erkennen. Der Grund dafür wird in den Arbeiten nicht geklärt. Unsere Simulation lässt darauf schließen, dass der dominierende Streumechanismus, nämlich die Streuung an optischen Phononen, zu dieser Abweichung von der phänomenologischen Theorie führt. Die Streuung wird eventuell durch Vielteilchen-Effekte zusätzlich beeinflusst, was in einer Abschwächung des Effekts resultieren könnte.

3.4.3 Vergleich mit anderen mikroskopischen Theorien

Der mikroskopische Ansatz zur Beschreibung der Spindynamik in Halbleitern und niedrigdimensionalen Halbleiterstrukturen mit Hilfe des Dichtematrixformalismus wird auch in anderen Arbeiten verwendet³. Zur Herleitung der EOM für die Spin-dichtematrixeinträge wird in diesen Arbeiten der *Keldysh Formalismus* verwendet, um die Streuung zu erfassen. Dieser unterscheidet sich von unserem korrelationsbasierten Schema. Außerdem wird in den Arbeiten zusätzlich zum intrinsischen effektiven Magnetfeld ein externes Magnetfeld in einer Richtung senkrecht zur Wachstumsrichtung angelegt, was zu einer zusätzlichen Erniedrigung der Symmetrie führt. Dies erschwert die numerische Umsetzung, da folglich der komplette \mathbf{k} -Raum in der Numerik berücksichtigt werden muss. Eine Einbeziehung eines derartigen Magnetfeldes wurde versuchsweise auch in unserer Simulation implementiert. Sie führt auf eine quantitative Verschlechterung der Ergebnisse, da die Rasterung des \mathbf{k} -Raums ungenauer gewählt werden muss. Die Simulation zeigt zwar qualitativ das richtige Verhalten, nämlich eine Unterdrückung der Spinrelaxation durch das zusätzliche Magnetfeld, die quantitative Größe der Unterdrückung wird allerdings extrem überschätzt. Die Ergebnisse dieser Rechnungen wurden daher verworfen.

Zusätzlich zu diesem Unterschied treten bereits in den EOM der kohärenten Dynamik Diskrepanzen zwischen unseren Ergebnissen und denen in den zitierten Arbeiten auf (unsere Simulation ist sehr nahe an der in Ref. [115] vorgestellten Situation⁴). Der Ursprung dieses Unterschieds, der nicht mit der veränderten Ausgangssituation zusammenhängt, konnte nicht geklärt werden. Eine Rechnung mit den in Ref. [115] verwendeten EOM ergab eine Vergrößerung der Oszillationsdauer der Observablen im kohärenten Regime im Vergleich zu unseren Ergebnissen.

Ein Vergleich der Streuterme ist aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Formalismen schwierig. Es konnte jedoch auch hier keine eindeutig Zuordnung unserer

³Siehe dazu die Arbeiten von Wu *et al.*: [130], [132], [131], [128], [129], [115], [113], [114], [116], [118] und [117].

⁴In dieser Arbeit wird als Materialsystem GaAs verwendet. Die Temperatur liegt im Bereich von $T = 120$ K bis $T = 300$ K und als Modell für den QW wird ein unendlich tiefer Potenzialtopf verwendet.

Streuterme, deren Form der des spinlosen Falls, d. h. der Ladungsträgerdynamik, entspricht, mit denen in den Arbeiten von Wu *et al.* gefunden werden. Grund dafür sind Streuterme in den zitierten Arbeiten, die keiner Korrelation (auch höherer Ordnung) zugeordnet werden können.

Zusätzlich zu diesen Punkten, die wir bezüglich des Vergleichs der kohärenten Beiträge in den EOM und der Elektron-Phonon-Streuung haben, findet man in der Literatur Kritik an der Beschreibung der Vielteilchen-Effekte, die in den zitierten Arbeiten das Hauptargument bei der Interpretation der numerischen Ergebnisse darstellen. Exemplarisch wird hier in Ref. [42] die Arbeit [114] herausgegriffen.

Der letzte Kritikpunkt an den Arbeiten von Wu *et al.* sind die benutzten Materialparameter. Die Autoren verwenden eine zu große Energielücke zwischen Valenz- und Leitungsband (z. B. Ref. [115]: $E_g = 1,55$ eV für $T > 120$ K; Literaturwert Ref. [77]: $E_g = 1,519$ eV für $T = 0$ K). Auch der g -Faktor entspricht mit $g = 0,44$ nicht dem Literaturwert [77] von $g = -0,44$. Wir nehmen daher Abstand vom Vergleich mit diesen Arbeiten, da dies erst sinnvoll wäre, wenn die Unklarheiten definitiv ausgeräumt werden können.

Bei der Betrachtung unserer numerischen Ergebnisse ist festzuhalten, dass wir eine mikroskopische Beschreibung der Spinrelaxation und -dephasierung nach D'yakonov und Perel' hergeleitet haben, die die erwarteten qualitativen Aspekte der Spinrelaxation und Spindephasierung richtig darstellt. Dariüber hinaus ist sie in einigen Bereichen der phänomenologischen Beschreibung überlegen, insbesondere im Hinblick auf die Variation des Regimes der Dynamik und auf die Temperaturabhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindephasierungszeiten. Es ist zu betonen, dass die Temperaturabhängigkeit experimentell beobachtet wird. Der Vergleich mit der mikroskopischen Theorie von Wu *et al.* (siehe z. B. Ref. [115]) konnte aufgrund einer Vielzahl von Unklarheiten nicht vorgenommen werden.

Der quantitative Mangel der Ergebnisse, die generelle Unterschätzung der Spinrelaxations- und Spindephasierungszeiten, stellt kein prinzipielles Problem unserer mikroskopischen Beschreibung dar, sondern hat seinen Ursprung in der numerischen Methode und kann durch andere numerische Konzepte, z. B. Monte-Carlo-Verfahren [51], überwunden werden. Eine Orientierung an der Simulation der spinlosen Ladungsträgerdynamik in optisch angeregten Systemen im Ultrakurzzeitregime gibt Ausblick auf das prinzipielle Potenzial der Methode [94].

ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Das Ziel dieser Arbeit war es, eine *mikroskopische* Theorie der Spinrelaxation und Spindphasierung in Halbleiter-Quantenstrukturen zu formulieren. Für das Auftreten von Spinrelaxation und Spindphasierung in Halbleiter-Quantenstrukturen ist eine Nichtgleichgewichtsverteilung der Spinzustände notwendig. Sie wird am effektivsten durch die optische Anregung mit zirkular polarisiertem Licht erzeugt, die spin-selektive Übergänge von den Valenzband- in die Leitungsbandzustände bewirkt. Dieses Konzept wird als optische Orientierung bezeichnet.

Zusätzlich zur Nichtgleichgewichtsverteilung ist das Wechselspiel der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der Streuung in Halbleiter-Quantenstrukturen grundlegender Bestandteil der Spinrelaxation und Spindphasierung. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist ein relativistischer Effekt, der den Spinfreiheitsgrad der Ladungsträger an deren orbitalen Freiheitsgrad koppelt. Die Art und Stärke der Kopplung wird durch die Untersuchung der Bandstruktur mit Hilfe der Enveloppenfunktionsnäherung bestimmt. Die Beiträge zur Spin-Bahn-Wechselwirkung können für die betrachteten zweidimensionalen Strukturen in zwei Teile aufgespalten werden.

Der erste ist bestimmt durch die fehlende Inversionssymmetrie im Volumenmaterial der Halbleiterstruktur, dem BIA- oder Dresselhaus-Term. Der Ursprung des zweiten Terms liegt in der Aufhebung der Inversionssymmetrie durch einen asymmetrischen Verlauf des elektrischen Potenzials in der Halbleiter-Quantenstruktur, dem SIA- oder Rashba-Term. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung führt im Wesentlichen zu zwei Effekten. Sie erzeugt ein effektives, vom Wellenvektor der Ladungsträger abhängiges Magnetfeld, das eine Präzession der einzelnen Spins hervorruft. Zusätzlich kommt es zu einer Mischung der Wellenfunktion der Leitungsbandzustände mit Valenzbandzuständen mit entgegengesetztem Spin. Diese Effekte sind Bedingungen für das Auftreten von Spinrelaxation und Spindphasierung.

Des Weiteren ist die Streuung der Ladungsträger von Bedeutung. Hier sind besonders die Ladungsträger-Phonon-Streuung, die Coulomb-Streuung und die Ladungsträger-Störstellen-Streuung zu nennen, deren Effektivität je nach Temperaturbereich

und Art des Relaxationsmechanismus variiert. Das Zusammenspiel von Spin-Bahn-Wechselwirkung und Streuung führt zu zwei der drei fundamentalen Spinrelaxationsmechanismen, dem D'yakonov-Perel'- und dem Elliott-Yafet-Mechanismus. Der dritte Mechanismus, die Spinrelaxation nach Bir, Aronov und Pikus, beruht auf der Coulomb-Austausch-Streuung und ist unabhängig von der Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Das komplexe Zusammenwirken von spin-selektiver optischer Anregung, Spin-Bahn-Wechselwirkung und Streuung legt das theoretische Konzept der Beschreibung, nämlich das der Bloch-Gleichungen, fest. Die Bloch-Gleichungen bestimmen die Bewegungsgleichungen der Dichtematrix des untersuchten Systems. Durch unsere Erweiterung dieses aus der Ladungsträgerdynamik stammenden Konzepts konnten zwei wichtige Aspekte der Theorie der Spinrelaxation und Spindphasierung mikroskopisch beschrieben werden.

Im ersten Teil der Arbeit wurde ein Zusammenhang zwischen den mikroskopischen Zerfallszeiten T_1 und T_2 , die im Rahmen der Bloch-Gleichungen definiert sind, und den makroskopischen Spinrelaxations- und Spindphasierungszeiten τ_{SR} und τ_{SD} angegeben. Um die Beschreibung im Rahmen der Bloch-Gleichungen zu formulieren, wurden die Bewegungsgleichungen in der Eigenbasis der Zustände aufgestellt. In dieser Basis leiteten wir die Streuraten in der zweiten Bornschen Näherung für die drei bereits erwähnten Streumechanismen ab. Da die Bewegungsgleichungen unter Hinzunahme der Streuung keine geschlossene Hierarchie mehr darstellen, wurde zur Berechnung der T_1 - und T_2 -Zeiten das korrelationsbasierte Abbruchschema verwendet. Es beruht in Abhängigkeit vom Streumechanismus auf verschiedenen Konzepten, nämlich auf dem der phonongestützten Dichtematrizen für die Ladungsträger-Phonon-Streuung, dem der reduzierten Dichtematrizen für die Coulomb-Streuung und dem der nichtlokalen Dichtematrizen für die Ladungsträger-Störstellen-Streuung.

Für den Vergleich der mikroskopischen Zerfallszeiten mit denen des Experiments musste eine unitäre Transformation angewendet werden, die die Observablen des Experiments mit den Einträgen der Dichtematrix in der Eigenbasis verknüpft. Der Zusammenhang zwischen den einzelnen Zeiten konnte bisher nur phänomenologisch beschrieben werden. Unsere Ergebnisse, basierend auf einer mikroskopischen Theorie, bestätigen die phänomenologischen Vorhersagen bezüglich der Systemparameter. Des Weiteren konnte ein quantitativer Zusammenhang zwischen den Observablen des Experiments bzw. deren Zerfall und den mikroskopischen T_1 - und T_2 -Zeiten angegeben werden. Da die Resultate im Rahmen dieser Arbeit nur Leitungsbandzustände erfassen, wäre es für zukünftige Projekte von Interesse, auch die Lochzustände des Valenzbandes systematisch mit dem vorgestellten Formalismus zu untersuchen. Dies gewinnt vor dem Hintergrund der aktuellen spintronischen Konzepte, die auf verdünnten magnetischen Halbleitern basieren, zusätzlich an Bedeutung [123, 125].

Der zweite Teil der Arbeit widmete sich der numerischen Simulation der Spindynamik in Halbleiter-Quantensystemen. Wir verwendeten im Gegensatz zu den üblichen Ansätzen wiederum eine mikroskopische Theorie basierend auf dem Dichtematrixformalismus. In Anlehnung an die Ladungsträgerdynamik in optisch getriebenen Halb-

leitern wurden die Bewegungsgleichungen der Dichtematrix unter Berücksichtigung der Streuung in zweiter Bornscher Näherung ohne Vielteilchen-Effekte aufgestellt. Um den numerischen Aufwand in zu bewältigenden Grenzen zu halten, wurden die Gleichungen nur für den D'yakonov Perel' Mechanismus formuliert. Dies ist in Hinblick auf den Vergleich mit Experimenten kein Nachteil, da dieser Mechanismus in einem Großteil der Experimente dominiert. Um den Streumechanismus optimal zu erfassen, beschränkten wir uns auf den Temperaturbereich größer als 120 K, da dort die Streuung vor allem durch optische Phononen bestimmt ist. Die Wahl des Temperaturbereichs ist auch in Hinblick auf spintronische Anwendungen sinnvoll. Bei der Beschreibung der Halbleiter-Quantenstrukturen wurde eine Idealisierung vorgenommen. Wir betrachteten das Modell des unendlich tiefen Quantentrogs und das einer Heterostruktur mit trigonalem Potenzialverlauf. Obwohl die Vereinfachung in Hinblick auf den Vergleich mit Experimenten von Nachteil ist, erlaubte sie uns eine separate Untersuchung der Spinrelaxation aufgrund von SIA- und BIA-Termen.

Die numerische Simulation lieferte qualitativ sehr gute Ergebnisse. Die phänomenologisch vorhergesagte Abhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeit von der Quantisierungsenergie in den 2D-Halbleiterstrukturen wurden bestätigt. Ebenso zeigte sich die erwartete Unabhängigkeit der Spinrelaxations- und Spindphasierungszeit sowohl von der initialen Spinpolarisation als auch von der Ladungsträgerdichte. Der Vorteil der mikroskopischen Beschreibung ergab sich bei der Betrachtung des Zusammenhangs von Präzessionsfrequenz der Spins und Streuzeit der Ladungsträger. Hier ist der phänomenologische Ansatz auf das *motional narrowing* Regime festgelegt, während unsere Simulation neben diesem für den D'yakonov Perel' Spinrelaxationsmechanismus relevanten Regime auch das entgegengesetzte Regime und den Übergangsbereich zwischen den beiden darstellen konnte. Ein weiterer Vorteil der mikroskopischen Methode wurde bei Betrachtung der Temperaturabhängigkeit der Zerfallszeiten festgestellt. Hier geht der phänomenologische Ansatz stets von einer temperaturunabhängigen Streuzeit aus bzw. betrachtet nur die Grenzfälle hoher oder tiefer Temperaturen. Diese Einschränkung ist für die Streuung an Phononen nicht sinnvoll, da die Streureate über die phononische Besetzungsfunktion explizit von der Temperatur abhängt. Berücksichtigt man dies, so ergibt sich das in unserer Arbeit präsentierte Verhalten, das sowohl in experimentellen als auch in anderen theoretischen Arbeiten, die die Temperaturabhängigkeit des Streumechanismus berücksichtigen, beobachtet wird. Einziger Mangel unserer Simulation ist die schlechte quantitative Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Die Ursache dafür ist jedoch nicht im verwendeten Formalismus, sondern in der numerischen Umsetzung zu suchen, die noch nicht optimal ist. Das Potenzial der numerischen Simulation der Spindynamik auf der Basis des Dichtematrixformalismus ist aber prinzipiell beliebig groß.

Ausgehend von den Ergebnissen dieser Arbeit können die nächsten Schritte zur Verbesserung der Numerik klar formuliert werden. Zuerst muss das technische Fundament der Umsetzung verbessert werden. Dies bedeutet, dass die direkte Integration durch die in der Theorie der Ladungsträgerdynamik erfolgreich verwendete Monte-Carlo-Methode ersetzt werden muss [51, 94]. Im Rahmen der verbesserten numerischen Methode ist die Berücksichtigung von Vielteilchen-Effekten sowohl im

kohärenten Bereich, in Form von renormierten Energien, als auch im inkohärenten Bereich, als Streumechanismus und als Quelle der Abschirmung der Ladungsträger, das nächste Ziel. Gleichzeitig wäre für einen quantitativen Vergleich mit experimentellen Daten eine realistischere Modellierung der Halbleiter-Quantenstrukturen von Vorteil. Nach erfolgreicher Implementation dieser Punkte ist in einem nächsten Schritt die Wechselwirkung mit dem anregenden Lichtfeld in der numerischen Simulation mit zu beschreiben, die in unserer Rechnung durch eine passende Anfangsbedingung ersetzt wurde. Dies bedeutet, dass sowohl die Valenzbandzustände in der Theorie betrachtet werden müssen, als auch die Nebendiagonaleinträge der Dichtematrix, die die Dynamik der Interbandpolarisation enthalten. Dies wäre insbesondere in Hinblick auf die Ultrakurzzeitedynamik von großer Bedeutung. Als letzter Punkt ist der Transfer auf Systeme mit weiter reduzierten Dimension, z. B. Quantenpunkte zu nennen, die von großem theoretischen und experimentellen Interesse sind, da sie als Kandidaten für die Realisierung des festkörperbasierten Quanten-Computers gelten [106].

ANHANG A

Irreversible Dephasierung im Dichtematrixformalismus

Im Dichtematrixformalismus ist die Kohärenz in einem System bestimmt durch die Nebendiagonaleinträge in der Dichtematrix [45]. Sie wird in einen *reversiblen* und einen *irreversiblen* Anteil aufgespalten [62]. Der reversible Anteil kann in Resonanzexperimenten durch eine definierte Abfolge von π - und $\pi/2$ -Pulsen rückgängig gemacht werden [102]. Dies entspricht dem Prinzip von Kernspin- oder Elektronenspin-echo Experimenten. Der irreversible Anteil der Dephasierung führt dagegen zu einem *unumkehrbaren* Kohärenzverlust. Beide Anteile können im Rahmen des Dichtematrixformalismus unterschieden werden. Dies wird hier allgemein für ein optisch angeregtes Zwei-Niveau-System verdeutlicht. Das Zwei-Niveau-System besteht aus n einzelnen Subsystemen, die separat optisch gekoppelt werden. Die Struktur der Dichtematrix ist gegeben durch

$$\boldsymbol{\varrho}(n) = \begin{pmatrix} \varrho_{11}(n) & \varrho_{12}(n) \\ \varrho_{21}(n) & \varrho_{22}(n) \end{pmatrix}. \quad (\text{A-1})$$

Die Einträge sind definiert als

$$\varrho_{ij}(n) := \langle a_i^\dagger(n) a_j(n) \rangle, \quad (\text{A-2})$$

mit dem Erzeugungsoperator (Vernichtungsoperator) $a_i^\dagger(n)$ [$a_i(n)$] eines Zustandes im Niveau i mit der Quantenzahl n . Als Maß für die reversible Kohärenz im gesamten System definiert man die *kohärente Summe der Nebendiagonalelemente*

$$\mathcal{C} := \left| \sum_n \varrho_{12}(n) \right|. \quad (\text{A-3})$$

Die *inkohärente Summe der Nebendiagonaleinträge*

$$C := \sum_n |\varrho_{12}(n)| \quad (\text{A-4})$$

repräsentiert den irreversiblen Anteil. Um die Bedeutung dieser Größen zu vertiefen, betrachtet man ein Ensemble von Zwei-Niveau-Systemen mit einer Zustandsdichte der Form

$$D(\omega) = \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2}. \quad (\text{A-5})$$

Dies entspricht einer kohärenten optischen Anregung der Zwei-Niveau-Systeme des Ensembles, deren Übergangsenergie im Bereich der Anregungsenergie $\hbar\omega_0$ liegt.

Nach der Anregung ergibt sich aus den Bloch-Gleichungen für den Zerfall des Nebendiagonalelements

$$\varrho_{12}(t) = \varrho_{12}|_{t=0} e^{-(i\omega + \frac{1}{T_2})t}, \quad (\text{A-6})$$

wobei $\varrho_{12}|_{t=0}$ der Wert des Nebendiagonalelements zum Zeitpunkt $t = 0$ ist. Die Phasenverlustzeit T_2 wurde phänomenologisch eingeführt. Die Summation der Kohärenzen kann analytisch durchgeführt werden. Das Ergebnis der kohärenten Summe der Nebendiagonalelemente lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2} e^{-(i\omega + \frac{1}{T_2})t} \right| \\ &= \frac{\pi}{\Gamma} e^{-(\Gamma + \frac{1}{T_2})t}. \end{aligned} \quad (\text{A-7})$$

In Analogie erhält man das Resultat für die inkohärente Summe der Nebendiagonalelemente

$$\begin{aligned} C &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2} \left| e^{-(i\omega + \frac{1}{T_2})t} \right| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2} \left| e^{-\frac{t}{T_2}} \right| \\ &= \frac{\pi}{\Gamma} e^{-\frac{t}{T_2}}. \end{aligned} \quad (\text{A-8})$$

Anhand dieser Ergebnisse erkennt man, dass die inkohärente Summe der Nebendiagonaleinträge allein mit der Phasenverlustzeit T_2 zerfällt. Dies bezeichnet man auch als *homogene Verbreiterung* [109]. Im Unterschied dazu wird die kohärente Summe der Nebendiagonaleinträge sowohl durch die Phasenverlustzeit T_2 als auch durch das Wegmitteln der verschiedenen überlagerten Frequenzen gedämpft. Man bezeichnet dies als *inhomogene Verbreiterung* [109]. Die Mittelungsprozesse können durch die oben angesprochenen π - und $\pi/2$ -Pulse rückgängig gemacht werden. Zur Unterscheidung von der irreversiblen Zerfallszeit wird für die reversible Zerfallszeit oftmals das Symbol T_2^* eingeführt.

Obige Rechnung zeigt, dass die inkohärente Summation das Maß für die irreversible Kohärenz im System und damit für die Dephasierungszeit ist. Dieses Beispiel lässt sich direkt auf die *Spinkohärenz* übertragen. Daher wird in dieser Arbeit die Spinkohärenz eines Ensembles stets mit der inkohärenten Summe der Nebendiagonaleinträge in der Spindichtematrix gleichgesetzt.

ANHANG B

Elektron-Phonon-Streuung

In diesem Anhang werden die EOM der phonongestützten Dichtematrizen in zweiter Bornscher Näherung berechnet, die im Hauptteil der Arbeit nicht explizit dargestellt wurden. Dies betrifft die phonongestützten Dichtematrizen aus den Zeilen zwei bis vier von Glg. (2.26). Wir unterscheiden, ob es sich um die EOM des Diagonal- oder des Nebendiagonaleintrags der Dichtematrix handelt. Im ersten Fall lässt sich Glg. (2.26) durch die Ersetzung von \bar{m}_c durch m_c umschreiben in

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon}} &= \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left[2i \Im \left\{ g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b(\mathbf{q}) c_{\bar{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \right\} \right. \\ &\quad \left. - 2i \Im \left\{ g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B-1})$$

Folglich müssen wir für den Diagonaleintrag nur noch die phonongestützte Dichtematrix $\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle$ betrachten. Deren EOM hat entsprechend dem im KAPITEL 2 aufgestellten Abbruchschema die Form

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \left[g_{m_c \tilde{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}') b^\dagger(\mathbf{q}') b(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \right. \\ &\quad \left. + g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}) \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}') c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}') \rangle \right. \\ &\quad \left. - g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^{e*}(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}') c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

Beiträge, die entweder keinen makroskopischen Erwartungswert haben oder zu einer Interbandpolarisation führen, wurden vernachlässigt. Nach der Faktorisierung erhält man

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &\approx [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad + g_{m_c m_c}^{e*}(\mathbf{q}) [\varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) + (1 + \beta(\mathbf{q})) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \\ &\quad \quad + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})]. \end{aligned} \quad (\text{B-3})$$

Die Anwendung der Markov und der adiabatischen Näherung liefert schließlich die gesuchten Streuterme aufgrund von $s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q})$ in der EOM des Diagonaleintrags

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, m'_c} |g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \\ &\quad \times \{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 + \beta(\mathbf{q})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \\ &\quad - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \} . \end{aligned} \quad (\text{B-4})$$

Damit sind alle Streubeiträge für $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ in zweiter Bornscher Näherung erfasst.

Für das Nebendiagonalelement betrachten wir zuerst die Beiträge im Boltzmann-Grenzfall. Die EOM sind gegeben durch

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum [g_{\tilde{m}'_c m'_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}') c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}') \rangle \\ &\quad - g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}') c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle] , \end{aligned} \quad (\text{B-5})$$

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum [g_{\tilde{m}_c m'_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}') b(\mathbf{q}') b^\dagger(\mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) \rangle \\ &\quad - g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k}') c_{-m_c}(\mathbf{k}) \rangle] \end{aligned} \quad (\text{B-6})$$

und

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum [g_{m'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) b^\dagger(\mathbf{q}) b(\mathbf{q}') c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{q}') \rangle \\ &\quad + g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\mathbf{k}') c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle] . \end{aligned} \quad (\text{B-7})$$

Es wurde die Abkürzung $\bar{s}_{m_{c1} m_{c2}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) := \langle c_{m_{c1}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}) c_{m_{c2}}(\mathbf{k}) \rangle$ für phonongestützte Dichtematrizen mit einem bosonischen Erzeuger eingeführt. Die Faktorisierung nach makroskopischen Erwartungswerten liefert als Zwischenergebnis

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &\approx [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad - g_{-m_c m'_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \\ &\quad - \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] , \end{aligned} \quad (\text{B-8})$$

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &\approx [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &\quad + g_{m_c m'_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \\ &\quad - \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \end{aligned} \quad (\text{B-9})$$

und

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \approx & [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ & - g_{-m_c m'_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q}) \\ & + \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] . \end{aligned} \quad (\text{B-10})$$

Nach dem üblichen Vorgehen erhält man damit die restlichen Beiträge zur Selbstenergie im Boltzmann-Grenzfall. Die EOM lassen sich darstellen als

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} |g_{-m_c m'_c}^e(\mathbf{q})|^2 \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\ & \left. - i\pi \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \right\} \times \\ & \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 + \beta(\mathbf{q})] \right. \\ & \left. + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) , \end{aligned} \quad (\text{B-11})$$

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} |g_{m_c m'_c}^e(\mathbf{q})|^2 \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\ & \left. - i\pi \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \right\} \times \\ & \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 + \beta(\mathbf{q})] \right. \\ & \left. + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{B-12})$$

und

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon1}} = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} |g_{m'_c - m_c}^e(\mathbf{q})|^2 \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\ & \left. - i\pi \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \right\} \times \\ & \left\{ [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \beta(\mathbf{q}) \right. \\ & \left. + \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) . \end{aligned} \quad (\text{B-13})$$

Die Streuprozesse im Boltzmann-Grenzfall enthalten aber nur einen Teil der für das Nebendiagonalelement in zweiter Bornscher Näherung relevanten Streuprozesse.

Die EOM der phonongestützten Dichtematrizen, die die Streuprozesse jenseits des Boltzmann-Grenzfalls enthalten, haben die Form

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum [g_{m_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}') b^\dagger(\mathbf{q}') b(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \\ &+ g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}') c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle] , \end{aligned} \quad (\text{B-14})$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &- \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum [g_{-m_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{q}') b(\mathbf{q}') c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}') \rangle \\ &+ g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}') c_{-m_c}(\mathbf{k}) \rangle] \end{aligned} \quad (\text{B-15})$$

und

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) &= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &- \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}' \tilde{m}_c \tilde{m}'_c} \sum [g_{\tilde{m}_c m_c}^e(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}') b(\mathbf{q}') b^\dagger(\mathbf{q}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ &- g_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}^e(\mathbf{q}) \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}') c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle] . \end{aligned} \quad (\text{B-16})$$

Nach der Faktorisierung der Vier-Punkt-Dichtematrizen in ihre makroskopischen Bestandteile ergeben sich die EOM zu

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &\approx [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] s_{m_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &+ g_{m_c - m'_c}^{e*}(\mathbf{q}) [\varrho_{-m'_c m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \\ &+ \varrho_{-m'_c m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] , \end{aligned} \quad (\text{B-17})$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) &\approx [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &- g_{-m_c - m'_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \beta(\mathbf{q}) \\ &+ \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \end{aligned} \quad (\text{B-18})$$

und

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) &\approx [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \bar{s}_{m_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\ &+ g_{-m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) [\varrho_{-m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \\ &- \varrho_{-m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] . \end{aligned} \quad (\text{B-19})$$

Wendet man auf diese Gleichungen die Markov und adiabatische Näherung an, so erhält man die Streubeiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls für das Nebendia-

gonalelement der Spindichtematrix. Die einzelnen Terme sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon2}} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} g_{-m_c - m'_c}^e(\mathbf{q}) g_{m_c m'_c}^{e*}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
 &\quad \times \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\
 &\quad \left. + i\pi \delta [\epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \right\} \\
 &\quad \times \left\{ \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 + \beta(\mathbf{q})] + [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \beta(\mathbf{q}) \right\}, \\
 \end{aligned} \tag{B-20}$$

$$\begin{aligned}
 \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon2}} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} g_{-m_c - m'_c}^e(\mathbf{q}) g_{m_c m'_c}^{e*}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
 &\quad \times \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\
 &\quad \left. + i\pi \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{q})] \right\} \\
 &\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 + \beta(\mathbf{q})] \right\} \\
 \end{aligned} \tag{B-21}$$

und

$$\begin{aligned}
 \partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{phonon2}} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{q} m'_c} g_{m'_c m_c}^e(\mathbf{q}) g_{-m'_c - m_c}^{e*}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
 &\quad \times \left\{ \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \hbar\omega(\mathbf{q})} \right. \\
 &\quad \left. + i\pi \delta [\epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{q})] \right\} \\
 &\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \beta(\mathbf{q}) + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \beta(\mathbf{q}) \right\}. \\
 \end{aligned} \tag{B-22}$$

Damit sind alle Streuterme für die Elektron-Phonon-Streuung in zweiter Bornscher Näherung sowohl im Boltzmann-Grenzfall als auch jenseits des Boltzmann-Grenzfalls für das Nebendiagonalelement erfasst.

ANHANG C

Coulomb-Streuung

In diesem Abschnitt werden die wesentlichen Schritte zur Herleitung der Coulomb-Streuterme präsentiert, die auf den Vier-Punkt-Dichtematrizen von Glg. (2.62) bzw. auf den zugeordneten reduzierten Vier-Punkt-Dichtematrizen beruhen. Wir behandeln dafür die einzelnen Terme der Coulomb-Wechselwirkung separat. Für jeden einzelnen Term wird die Herleitung wie im KAPITEL 2 aufgeteilt in die Beiträge für den Diagonaleintrag und den Nebendiagonaleintrag der Spindichtematrix. Bei letztem wird außerdem zwischen Streuprozessen des Boltzmann-Grenzfalls und jenseits des Boltzmann-Grenzfalls unterschieden.

Bewegungsgleichungen in 2. Bornscher Näherung für die Elektron-Elektron-Streuung

Wie aus Glg. (2.62) ersichtlich, existieren für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zwei Vier-Punkt- und damit auch zwei reduzierte Vier-Punkt-Dichtematrizen.

Die EOM des ersten Beitrags, der für $\varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})$ relevant ist, hat die Form

$$\begin{aligned}
 & i\hbar \partial_t \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
 &= [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
 & \quad \times \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
 & \quad + \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m'_c m_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{q}) \\
 & \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
 & \quad \left. - [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \tag{C-1}
 \end{aligned}$$

Die Integration der Gleichung erfolgt unter Anwendung der Markov und der adia-

batischen Näherung. Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx \frac{\pi}{i} \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m'_c m_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. - [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (\text{C-2})
\end{aligned}$$

In gleicher Weise lässt sich die EOM des zweiten Beitrags aufstellen

$$\begin{aligned}
& i\hbar \partial_t \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& = [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
& \quad \times \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \quad + \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m_c m'_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. - [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (\text{C-3})
\end{aligned}$$

Dieser Beitrag lässt sich nach Anwendung der eingeführten Näherungen schreiben als

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx \frac{\pi}{i} \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m_c m'_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \delta [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. - [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (\text{C-4})
\end{aligned}$$

Das Einsetzen von Glg (C-2) und (C-4) in die ursprüngliche EOM des Diagonaleintrags führt zu den Streubeiträgen aufgrund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, die in Glg. (2.73) und (2.74) angegeben sind. Wie im KAPITEL 2 diskutiert, ist dies bereits der vollständige Beitrag in zweiter Bornscher Näherung.

Für das Nebendiagonalelement ist eine Unterscheidung der Streuterme in die des Boltzmann-Grenzfalls und die jenseits des Boltzmann-Grenzfalls sinnvoll.

Im Boltzmann-Grenzfall sind die Streuterme wie im Fall des Diagonaleintrags aus zwei Beiträgen aufgebaut. Die EOM des ersten Beitrags ist bestimmt durch die

Gleichung

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m'_c - m_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
&\quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) , \quad (\text{C-5})
\end{aligned}$$

die, nach einer Integration mit der Markov und der adiabatischen Näherung, geschrieben werden kann als

$$\begin{aligned}
& \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m'_c - m_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
& \quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) . \quad (\text{C-6})
\end{aligned}$$

In Analogie lässt sich der zweite Beitrag zur Streuung formulieren als

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{-m_c}(\bar{\mathbf{k}}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{-m_c}(\bar{\mathbf{k}}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m_c m'_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
&\quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) , \quad (\text{C-7})
\end{aligned}$$

der nach der Integration dargestellt werden kann als

$$\begin{aligned}
& \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{-m_c}(\bar{\mathbf{k}}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{\tilde{m}'_c m_c m'_c \tilde{m}_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) . \quad (\text{C-8})
\end{aligned}$$

Damit sind die Streubeiträge im Boltzmann-Grenzfall durch die Glgn. (C-6) und (C-8) vollständig bestimmt.

Die zusätzlichen Beiträge zur Streuung in den EOM des Nebendiagonalelements sind erst im Bereich jenseits des Boltzmann-Grenzfalls erfasst. Auch hier ergeben sich zwei Beiträge, wobei der erste gegeben ist durch

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_c \tilde{m}_c m_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \quad (\text{C-9})
\end{aligned}$$

Die Lösung der EOM nach dem bekannten Vorgehen führt auf die Gleichung

$$\begin{aligned}
& \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_c \tilde{m}_c m_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
& \quad \left. + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \quad (\text{C-10})
\end{aligned}$$

In Analogie zum ersten Beitrag ist die EOM des zweiten gegeben durch

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= [\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_c \tilde{m}_c - m'_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\} \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) , \quad (\text{C-11})
\end{aligned}$$

die nach der Integration einschließlich der Markov und der adiabatischen Näherung

die Form

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_c \tilde{m}_c - m'_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
& \quad \left. + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\} \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (C-12)
\end{aligned}$$

hat. Die Glgn. (C-10) und (C-12) führen nach dem Einsetzen in die ursprüngliche EOM für das Nebendiagonalelement zu

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{\text{ee}, 2} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_c \tilde{m}'_c \\ m'_c}} \bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \quad (C-13)$$

Die Selbstenergie lässt sich in zwei Teile separieren gemäß

$$\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) = \hbar [\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - i\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] . \quad (C-14)$$

Wie im KAPITEL 2 angesprochen, koppelt hier, im Unterschied zum Beitrag aufgrund des Austausch-Terms, der Beitrag jenseits des Boltzmann-Grenzfalls das Nebendiagonalelement bei \mathbf{k} mit dem bei $\mathbf{k} + \mathbf{q}$. Wir geben den Bestandteil $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$, der proportional zu den δ -Funktionen ist, explizit an. Er hat die Form

$$\begin{aligned}
& \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \\
& = \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}_{\tilde{m}_c - m_c m'_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_c \tilde{m}_c m_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ \delta[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) + \epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
& \quad \left. + \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad - \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}_{\tilde{m}_c m'_c m_c \tilde{m}'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}, -\mathbf{q}) \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_c \tilde{m}_c - m'_c}^{\text{ee}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ \delta[\epsilon_{\tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}) + \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}) \right. \\
& \quad \left. + \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}'_c \tilde{m}'_c}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_c \tilde{m}_c}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q})] \right\} . \quad (C-15)
\end{aligned}$$

Wie im KAPITEL 2 erwähnt, ist $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^{\text{ee}}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ eine Differenz der einzelnen Beiträge.

Bewegungsgleichungen in 2. Bornscher Näherung für die Elektron-Loch-Coulomb-Streuung

Im Folgenden wird die Herleitung der Streubeträge aufgrund der Elektron-Loch Coulomb-Streuung präsentiert. Die Vorgehensweise ist dabei die gleiche wie im Fall der Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

Zuerst betrachten wir die beiden Beiträge zum Diagonalelement der Spindichtematrix. Der erste ist gegeben durch die EOM

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
&\quad \left. - [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}, \tag{C-16}
\end{aligned}$$

die sich nach der Integration mit Hilfe der Markov und der adiabatischen Näherung schreiben lässt als

$$\begin{aligned}
& \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \approx \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
&\quad \left. - [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \tag{C-17}
\end{aligned}$$

Genauso kann die EOM des zweiten Beitrags bestimmt werden zu

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m'_c}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
&\quad \left. - [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \tag{C-18}
\end{aligned}$$

Nach der Anwendung der Markov und der adiabatischen Näherung ergibt sich die

Lösung der Gleichung zu

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \approx \frac{\pi}{i} \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m'_c}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. - [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\}. \quad (C-19)
\end{aligned}$$

Damit ist die Elektron-Loch Coulomb-Streuung für das Diagonalelement mit den Glgn. (C-17) und (C-19) vollständig beschrieben.

Die Streubeiträge für das Nebendiagonalelement werden in den Boltzmann-Grenzfall und in den Beitrag jenseits des Boltzmann-Grenzfalls unterteilt. Der erste Beitrag im Boltzmann-Grenzfall ist bestimmt durch die EOM

$$\begin{aligned}
& i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& = [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
& \quad \times \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \quad + \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v - m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}), \quad (C-20)
\end{aligned}$$

die sich nach der Integration und der Anwendung von Markov und adiabatischer Näherung schreiben lässt als

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v - m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right. \\
& \quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}). \quad (C-21)
\end{aligned}$$

Ein analoges Vorgehen für den zweiten Beitrag führt von der ursprünglichen EOM

der Form

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m'_c}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
&\quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \\
\end{aligned} \tag{C-22}$$

zum Endergebnis

$$\begin{aligned}
& \delta\langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m'_c}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
& \quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) \\
\end{aligned} \tag{C-23}$$

Zusätzlich zu den Beiträgen aus Glg. (C-21) und (C-23) existieren noch die Beiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls. Der erste Beitrag in diesem Grenzfall hat für die Elektron-Loch-Coulomb-Wechselwirkung die Form

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
&\quad + \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\} \varrho_{-m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\
\end{aligned} \tag{C-24}$$

die sich entsprechend dem üblichen Vorgehen nach der Integration darstellen lässt

als

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v'}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{m_c' \tilde{m}_v' m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
& \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c'}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}_v'}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \left. + \pi\hbar\delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c'}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}_v'}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v' \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \right. \\
& \left. + \varrho_{\tilde{m}_v' \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] \right\} \varrho_{-m_c' m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) . \tag{C-25}
\end{aligned}$$

Gleiches Vorgehen liefert beim zweiten Beitrag, ausgehend von der EOM

$$\begin{aligned}
& i\hbar \partial_t \delta \langle c_{m_c'}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}_v'}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& = [\epsilon_{m_c'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\
& \times \delta \langle c_{m_c'}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}_v'}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& + \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}_v' \tilde{m}_v - m_c'}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v' \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
& \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v' \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{m_c' - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \tag{C-26}
\end{aligned}$$

das Ergebnis

$$\begin{aligned}
& \delta \langle c_{m_c'}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{-m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}_v'}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \rangle \\
& \approx \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}_v' \tilde{m}_v - m_c'}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\
& \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}_v'}(\bar{\mathbf{k}})} \right. \\
& \left. + \pi\hbar\delta [\epsilon_{m_c'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}_v'}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\
& \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v' \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\
& \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v' \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \varrho_{m_c' - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) . \tag{C-27}
\end{aligned}$$

Die Resultate von Glg. (C-25) und (C-27) können in Form eines Selbstenergiebeitrags dargestellt werden. Dieser ergibt für $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$ die EOM

$$\partial_t \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})|_{C,2} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}_v' \\ m_c'}} \bar{\Sigma}_{m_c' - m_c'}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{m_c' - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) , \tag{C-28}$$

mit der Selbstenergie

$$\bar{\Sigma}_{m'_c - m'_c}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) = \hbar [\bar{\Omega}_{m'_c - m'_c}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - i \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] . \quad (\text{C-29})$$

Wie in den bereits diskutierten Fällen ist die Struktur von $\bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})$ gegeben durch

$$\begin{aligned} & \bar{\Gamma}_{m'_c - m'_c}^C(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \\ &= \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, \mathbf{q}) \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v - m'_c}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\ & \quad \times \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right. \\ & \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{-m_c - m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right\} \\ & - \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}_{-m_c \tilde{m}_v \tilde{m}'_v - m'_c}^C(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{q}) \mathcal{V}_{-m'_c \tilde{m}'_v \tilde{m}_v m_c}^C(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\ & \quad \times \delta [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] \\ & \quad \times \left\{ [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}})] [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q}) \right. \\ & \quad \left. + \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(\bar{\mathbf{k}}) \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{q})] \right\} . \end{aligned} \quad (\text{C-30})$$

Die Interpretation dieser Gleichung im Unterschied zum Beitrag durch Elektron-Phonon-Streuung und zur Austausch-Wechselwirkung ist bereits für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung besprochen worden.

Bewegungsgleichungen in 2. Bornscher Näherung für die Elektron-Loch Austausch-Streuung

Die Streubeiträge zur EOM des Diagonalelements sind vollständig im KAPITEL 2 diskutiert worden, da sich die zugehörige EOM in der Form

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})|_X &= \sum_{\bar{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \sum_{\substack{\tilde{m}_v \tilde{m}'_v \\ m'_c}} 2i \Im \left\{ \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}_v m_c \tilde{m}'_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \right. \\ & \quad \times \left. \langle c_{m'_c}^\dagger(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) c_{m_c}(\mathbf{k}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(\bar{\mathbf{k}}) v_{\tilde{m}_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{C-31})$$

darstellen lässt. Für das Nebendiagonalelement ist der erste Beitrag im Boltzmann-Grenzfall ebenfalls im KAPITEL 2 besprochen worden. Wir beschränken uns daher

auf den zweiten Beitrag, dessen EOM gegeben ist durch

$$\begin{aligned}
& i\hbar\partial_t \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&= [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\
&\quad \times \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
&\quad - \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v - m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
&\quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
&\quad \left. [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) .
\end{aligned} \tag{C-32}$$

Die Gleichung für die reduzierte Vier-Punkt-Dichtematrix ist nach einer Integration einschließlich der Markov und adiabatischen Näherung darzustellen als

$$\begin{aligned}
& \delta\langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}'_v}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) v_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \rangle \\
& \approx -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{m'_c \tilde{m}'_v - m_c \tilde{m}_v}^X(\bar{\mathbf{k}}, -\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \\
& \quad \times \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \\
& \quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) + \epsilon_{\tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) - \epsilon_{m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \right\} \\
& \quad \times \left\{ \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q})] [1 - \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}})] \right. \\
& \quad \left. + [1 - \varrho_{\tilde{m}'_v \tilde{m}'_v}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{m'_c m'_c}(-\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{q}) \varrho_{\tilde{m}_v \tilde{m}_v}(\bar{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) .
\end{aligned} \tag{C-33}$$

Die Beiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls wurden bereits in KAPITEL 2 präsentiert.

ANHANG D

Elektron-Störstellen-Streuung

Dieser Abschnitt zeigt die Herleitung der Streuterme aufgrund der nichtlokalen Dichtematrizen, die bei der Elektron-Störstellen-Streuung auftreten. Ein Teil davon wurde bereits im KAPITEL 2 behandelt. Es werden hier nur die noch fehlenden Terme erläutert.

Wir folgen der im KAPITEL 2 eingeführten Aufteilung in EOM der Diagonal- und Nebendiagonaleinträge der elektronischen Spindichtematrix.

Die EOM des Diagonaleintrags kann aus Glg. (2.97) bestimmt werden zu

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c \tilde{m}_c}(\mathbf{k}) = & \sum_{\mathbf{q} m'_c} \left[2i\Im \left\{ U_{m'_c m_c}(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k}) \rangle \right\} \right. \\ & \left. - 2i\Im \left\{ U_{m_c m'_c}(\mathbf{q}) \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D-1})$$

Der Streubeitrag aufgrund von $\varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q})$ ist noch zu untersuchen. Die EOM dieses Eintrags lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) = & [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}' \tilde{m}_c} \left[U_{m_c \tilde{m}_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}') c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \right. \\ & \left. - U_{\tilde{m}_c m'_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}') \rangle \right]. \end{aligned} \quad (\text{D-2})$$

Wie im Hauptteil kann die EOM integriert werden und liefert nach Anwendung der Markov und der adiabatischen Näherung die Gleichung

$$\begin{aligned} \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \approx & -i\pi U_{m'_c m_c}^*(\mathbf{q}) \delta [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \\ & \times \{ \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) [1 - \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k})] \\ & - [1 - \varrho_{m'_c m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{m_c m_c}(\mathbf{k}) \}. \end{aligned} \quad (\text{D-3})$$

Einsetzen dieses Ausdrucks in Glg. (D-1) führt zu den in KAPITEL 2 nicht besprochenen Beiträgen in Glg. (2.100). Damit sind alle Streubeiträge im Boltzmann-

Grenzfall und in zweiter Bornscher Näherung zum Diagonaleintrag der Dichtematrix bestimmt.

Die Streubeiträge zum Nebendiagonalelement werden im Folgenden präsentiert. Als Ausgangspunkt dient Glg. (2.97). In ihr findet man vier nichtlokale Dichtematrizen, die zu vier EOM führen. Da es sich um Zwei-Punkt-Dichtematrizen handelt, ist die Darstellung der Beiträge im Boltzmann-Grenzfall und jenseits des Boltzmann-Grenzfalls für die nichtlokalen Dichtematrizen sehr übersichtlich. Wir weichen daher von der bisherigen separaten Herleitung der beiden Grenzfälle ab und präsentieren beide Beiträge in einer EOM. Die EOM der nichtlokalen Dichtematrizen, beschränkt auf die makroskopischen Terme, haben die Form

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = & [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}' \tilde{m}_c} [U_{m'_c \tilde{m}_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{q}') c_{-m_c}(\mathbf{k}) \rangle \\ & - U_{\tilde{m}_c - m_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}') \rangle] , \end{aligned} \quad (\text{D-4})$$

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) = & [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}' \tilde{m}_c} [U_{m_c \tilde{m}_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}') c_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle \\ & - U_{\tilde{m}_c m'_c}^*(\mathbf{q}') \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}') \rangle] , \end{aligned} \quad (\text{D-5})$$

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}) = & [\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \varrho_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}' \tilde{m}_c} [U_{\tilde{m}_c m'_c}(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}') c_{-m_c}(\mathbf{k}) \rangle \\ & - U_{-m_c \tilde{m}_c}(\mathbf{q}') \langle c_{m'_c}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}') \rangle] \end{aligned} \quad (\text{D-6})$$

und

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = & [\epsilon_{m_c}(\mathbf{k}) - \epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}' \tilde{m}_c} [U_{\tilde{m}_c m_c}(\mathbf{q}') \langle c_{\tilde{m}_c}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}') c_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle \\ & - U_{m'_c \tilde{m}_c}(\mathbf{q}') \langle c_{m_c}^\dagger(\mathbf{k}) c_{\tilde{m}_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{q}') \rangle] . \end{aligned} \quad (\text{D-7})$$

Sie können nach einer Einschränkung bezüglich des Wechselwirkungsmatrixelements entsprechend dem Boltzmann-Grenzfall und dem Fall jenseits des Boltzmann-Grenzfalls vereinfacht werden. Nach einer Integration und der Anwendung von Markov und

adiabatischer Näherung erhält man für die gesuchten Ausdrücke die Gleichungen

$$\begin{aligned} \varrho_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) &\approx \frac{1}{i\hbar} \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})} \right. \\ &\quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \right\} \\ &\quad \times [U_{m'_c m_c}^*(\mathbf{q}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) - U_{-m'_c - m_c}^*(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q})], \end{aligned} \quad (\text{D-8})$$

$$\begin{aligned} \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) &\approx \frac{1}{i\hbar} \left\{ i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})} \right. \\ &\quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \right\} \\ &\quad \times [U_{m_c - m'_c}^*(\mathbf{q}) \varrho_{-m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - U_{-m_c m'_c}^*(\mathbf{q}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})], \end{aligned} \quad (\text{D-9})$$

$$\begin{aligned} \varrho_{m'_c - m_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}) &\approx \frac{1}{i\hbar} \left\{ -i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})} \right. \\ &\quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \epsilon_{-m_c}(\mathbf{k})] \right\} \\ &\quad \times [U_{m_c m'_c}(\mathbf{q}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k}) - U_{-m_c - m'_c}(\mathbf{q}) \varrho_{m'_c - m'_c}(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \end{aligned} \quad (\text{D-10})$$

und

$$\begin{aligned} \varrho_{m_c m'_c}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) &\approx \frac{1}{i\hbar} \left\{ i\hbar \frac{\mathcal{P}}{\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})} \right. \\ &\quad \left. + \pi\hbar\delta[\epsilon_{m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{m_c}(\mathbf{k})] \right\} \\ &\quad \times [U_{-m'_c m_c}(\mathbf{q}) \varrho_{-m'_c m'_c}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - U_{m'_c - m_c}(\mathbf{q}) \varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})]. \end{aligned} \quad (\text{D-11})$$

Eingesetzt in die ursprüngliche EOM des Nebendiagonalelements der Dichtematrix führen diese auf die im Hauptteil dargestellten Selbstenergiebeiträge in den Glgn. (2.103) und (2.106). Es ist zu beachten, dass in den vier Gleichungen die Terme proportional zu $\varrho_{m_c - m_c}(\mathbf{k})$ dem Boltzmann-Grenzfall entsprechen. Die verbleibenden Terme ergeben die Selbstenergiebeiträge jenseits des Boltzmann-Grenzfalls.

ANHANG E

Berechnung der Streuintegrale für die numerische Simulation

Die numerische Untersuchung der Spindynamik in 2D-Halbleitersystemen erfolgt im Temperaturbereich von $T = 150$ K bis $T = 300$ K. In diesem Bereich ist die Streuung bestimmt durch die Wechselwirkung der Elektronen mit *longitudinal optischen* (LO) Phononen, die so genannte *Fröhlich Wechselwirkung* [36]. Eine detaillierte Einführung in diese Art der Streuung in 2D-Systemen findet man in Ref. [90] und [93]. Wir demonstrieren im Folgenden die numerische Auswertung der Streubeiträge an einem Beispiel.

Das Wechselwirkungsmatrixelement für die LO-Phonon-Streuung ist gegeben durch [97]

$$g^e(\mathbf{q}, q_z) = i \left[\frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2 V \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{q^2 + q_z^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \zeta^*(z) \zeta(z) e^{i q_z z}. \quad (\text{E-1})$$

Wir benutzen das Modell von *volumenartigen* Phononen und vernachlässigen Quantisierungs- oder Confinementeffekte. Die Relevanz der Modelle quantisierter Phononen ist umstritten [99] und der Einfluss auf die Dynamik sehr gering [72].

Für das Wechselwirkungsmatrixelement wird der dreidimensionale Wellenvektor der Phononen \mathbf{q}_{3D} in den in-plane Anteil \mathbf{q} und den Anteil in Wachstumsrichtung q_z aufgespalten. Eine Eigenschaft der LO Phononen ist die Unabhängigkeit ihrer Energie vom Wellenvektor, d. h.

$$\omega_{\text{LO}}(\mathbf{q}) = \omega_{\text{LO}}. \quad (\text{E-2})$$

Diese Eigenschaft überträgt sich auf die phononische Verteilungsfunktion, die nur von der Temperatur T abhängt und die Form

$$\beta(\mathbf{q}) \rightarrow \beta(T) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k_B T}} - 1} \quad (\text{E-3})$$

hat. k_B ist die Boltzmann Konstante. Für die Auswertung der Streubeiträge aus KAPITEL 3 ist ein Übergang von der Summation über \mathbf{q} zur Integration über den \mathbf{q} -Raum nötig. Die Auswertung wird im Folgenden für die Streurate $\Gamma^{\text{out}}(\mathbf{k}')$ diskutiert. Entsprechend Ref. [73] lässt sich $\Gamma^{\text{out}}(\mathbf{k}')$ schreiben als

$$\Gamma^{\text{out}}(\mathbf{k}') = \int d^2 \mathbf{k}' \int dq_z \frac{V}{\hbar\pi^2} \delta[\epsilon(\mathbf{k}') - \epsilon(\mathbf{k}) - \hbar\omega_{\text{LO}}] |g^e(\mathbf{q}, q_z)|^2 \beta(T) [1 - \varrho_{mm}(\mathbf{k}')] . \quad (\text{E-4})$$

Wie man sieht, hängt nur $g^e(\mathbf{q}, q_z)$ explizit von q_z ab und die Integration über q_z kann entsprechend der Gleichung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_z |g^e(\mathbf{q}, q_z)|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2\pi^2 V \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{1}{q_z^2 + q_z^2} \quad (\text{E-5})$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dz dz' |\zeta(z)|^2 |\zeta(z')|^2 e^{iq_z(z-z')} \quad (\text{E-6})$$

separat berechnet werden. Sie liefert

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{1}{q_z^2 + q_z^2} e^{iq_z(z-z')} = \frac{\pi}{q} e^{-q|z-z'|} . \quad (\text{E-7})$$

Für das Überlappintegral der Enveloppenfunktionen führen wir die Abkürzung

$$\mathcal{F}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz dz' |\zeta(z)|^2 |\zeta(z')|^2 e^{-q|z-z'|} \quad (\text{E-8})$$

ein. Mit Glg. (E-7) und (E-8) kann das Streuintegral geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \Gamma^{\text{out}}(\mathbf{k}') &= \frac{e^2 \omega_{\text{LO}}}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \int d^2 \mathbf{k}' \delta[\epsilon(\mathbf{k}') - \epsilon(\mathbf{k}) - \hbar\omega_{\text{LO}}] \frac{\mathcal{F}(q)}{q} \\ &\quad \times \beta(T) [1 - \varrho_{mm}(\mathbf{k}')] . \end{aligned} \quad (\text{E-9})$$

Die Integration über \mathbf{k}' erfolgt in der Polarnotation, d. h.

$$d^2 \mathbf{k}' \rightarrow dk' d\vartheta k' .$$

Das Integral kann unter Verwendung der δ -Funktion berechnet werden, wobei zu beachten ist, dass

$$\delta[f(x)] = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} \right|^{-1} \delta(x - x_i) ,$$

mit $f(x_i) = 0$. Dies ergibt einen zusätzlichen Faktor $m^*/(\hbar^2 k')$. Außerdem lässt sich aus der δ -Funktion Information über den Wellenvektor des Endzustands gewinnen, der der Gleichung

$$k' = \sqrt{k^2 + \frac{2m^*\omega_{\text{LO}}}{\hbar}} \quad (\text{E-10})$$

unterliegt. Man erhält als Ergebnis der Integration über k

$$\Gamma^{\text{out}}(\mathbf{k}') = \frac{e^2 m^* \omega_{\text{LO}}}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \beta(T) \int_0^{2\pi} d\vartheta \frac{\mathcal{F}(q)}{q} [1 - \varrho_{mm}(\mathbf{k}')] .$$

Die verbleibende Winkelabhängigkeit ist gegeben durch

$$\begin{aligned} q(\vartheta) &= |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| \\ &= \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta}. \end{aligned} \quad (\text{E-11})$$

Das Integral über ϑ muss numerisch ausgeführt werden [14]. In der Simulation wird dies unter Verwendung einer adaptiven Quadraturmethode der **GSL**-Bibliothek [43] durchgeführt. Die übrigen Streubeiträge ergeben sich auf analoge Weise. Glg. (E-11) beinhaltet die für die LO-Phonon-Streuung charakteristische elektronische Zustandsdichte in zwei Dimensionen $m^* \pi / \hbar^2$ [73].

Das Resultat kann weiter vereinfacht werden, wenn die fermionische Verteilungsfunktion $\varrho_{mm}(\mathbf{k})$ nur vom Betrag von \mathbf{k} abhängt, da sie dann nicht in der Integration berücksichtigt werden muss. Dies ist für die Rashba-Spin-Bahn-Wechselwirkung gerechtfertigt. Im Fall der Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung ist dies nur für $t = 0$ korrekt. In der numerischen Simulation setzen wir trotzdem in beiden Fällen $\varrho_{mm}(\mathbf{k}) = \varrho_{mm}(k)$ und nehmen eine Unterschätzung der Streuung im Falle der Dresselhaus-Spin-Bahn-Wechselwirkung in Kauf.

Das Überlappintegral $\mathcal{F}(q)$ kann für die behandelten Modellsysteme analytisch berechnet werden. Im Fall des unendlich tiefen Quantentrogs der Breite L ergibt sich das Überlappintegral zu [91]

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(q) &= \frac{3}{u^2 + 4\pi^2} (1 - e^{-u}) + \frac{u}{u^2 + 4\pi^2} \\ &\quad - \left[\frac{u^2 - 4\pi^2}{u^2 + 4\pi^2} \frac{1}{u^2 + 4\pi^2} (1 - e^{-u}) \right] \\ &\quad + \frac{2}{u} \left[1 - \frac{1}{u} (1 - e^{-u}) \right], \end{aligned} \quad (\text{E-12})$$

mit $u = L q$.

Für die trigonale Heterostruktur kann das Überlappintegral unter Verwendung der Fang-Howard-Stern Wellenfunktion [108] geschrieben werden als

$$\mathcal{F}(q) = \frac{\beta}{8} \frac{8\beta^2 + 9\beta q + 3q^2}{(\beta + q)^3}, \quad (\text{E-13})$$

mit dem materialspezifischen Parameter β , der für GaAs typischerweise im Bereich von $2 - 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ liegt. Für die Simulation wurde der Parameterwert $\beta = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ verwendet.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] ALLEN, L. und J. H. EBERLY, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, Wiley, New York, 1975.
- [2] ARONOV, A. G., G. E. PIKUS und A. N. TITKOV, *Spin relaxation of conduction electrons in p-type III-V compounds*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **84**, 1170 (1983), [Sov. Phys. JETP **57**, 680 (1983)].
- [3] AVERKIEV, N. S., L. E. GOLUB und M. WILLANDER, *Spin relaxation anisotropy in two-dimensional semiconductor systems*, J. Phys.: Condens. Matter **14**, R271 (2002).
- [4] AVERKIEV, N. S., L. E. GOLUB und M. WILLANDER, *Spin Relaxation in Asymmetrical Heterostructures*, Fiz. Tek. Pol. **36**, 97 (2002), [Semiconductors **36**, 91 (2002)].
- [5] AWSCHALOM, D. D. und K. J. M., *Electron Spin and Optical Coherence in Semiconductors*, Physics Today **52**, 33 (1999).
- [6] AXT, V. M., T. KUHN und A. STAHL, *Coherent Description of Coulomb Scattering in Semiconductor Optics*, phys. stat. sol. (b) **234**, 368 (2002).
- [7] AXT, V. M. und S. MUKAMEL, *Nonlinear optics of semiconductor and molecular nanostructures; a common perspective*, Rev. Mod. Phys. **70**, 145 (1998).
- [8] AXT, V. M. und A. STAHL, *A dynamics-controlled truncation scheme for the hierarchy of density matrices in semiconductor optics*, Z. Phys. B **93**, 195 (1994).
- [9] AXT, V. M. und A. STAHL, *The role of the biexciton in a dynamic density matrix theory of the semiconductor band edge*, Z. Phys. B **93**, 205 (1994).
- [10] AXT, V. M., K. VICTOR und A. STAHL, *Influence of a phonon bath on the hierarchy of electronic densities in an optically excited semiconductor*, Phys. Rev. B **53**, 7244 (1996).

- [11] BAIBICH, M. N., J. M. BROTO, A. FERT, F. NGUYEN VAN DAU, F. PETROFF, P. EITENNE, G. CREUZET, A. FRIEDERICH und J. CHAZELAS, *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [12] BASTARD, G., *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique, Les Ulis Cedex, 1988.
- [13] BETZ, M., G. GÖGER, A. LAUBEREAU, P. GARTNER, L. BÁNYAI, H. HAUG, K. ORTNER, C. R. BECKER und A. LEITENSTORFER, *Subthreshold Carrier-LO Phonon Dynamics in Semiconductors with Intermediate Polaron Coupling: A Purely Quantum Kinetic Relaxation Channel*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4684 (2001).
- [14] BINDER, E., *Kohärenzzerfall in optisch angeregten Halbleitern*, Dissertation, Universität Stuttgart (1996).
- [15] BIR, G. L., G. A. ARONOV und G. E. PIKUS, *Spin relaxation of electrons due to scattering by holes*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **69**, 1382 (1975), [Sov. Phys. JETP **69**, 705 (1975)].
- [16] BLOCH, F., *Nuclear Induction*, Phys. Rev. **70**, 460 (1946).
- [17] BRUNETTI, R., C. JACOBINI und F. ROSSI, *Quantum theory of transient transport in semiconductors: A Monte Carlo approach*, Phys. Rev. B **39**, 10781 (1989).
- [18] BYCHKOV, Y. A. und É. I. RASHBA, *Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*, Pis'ma Zh. Eksp. Theor. Fiz. **39**, 66 (1984), [JETP Lett. **39**, 79 (1984)].
- [19] CARDONA, M., *Band Parameters of Semiconductors with Zincblende, Wurzite and Germanium Structure*, J. Phys. Chem. Solids **24**, 1543 (1963).
- [20] CARDONA, M., F. H. POLLAK und J. G. BROERMAN, *Band Structure of Gallium Arsenide: Spin-Orbit Splitting*, Phys. Lett. **19**, 276 (1965).
- [21] CARTOIXÀ, X., D. Z.-Y. TING und Y.-C. CHANG, *A resonant spin lifetime transistor*, Appl. Phys. Lett. **83**, 1462 (2003).
- [22] COHEN-TANNOUDJI, C., B. DIU und F. LALOË, *Quantum Mechanics 1 + 2*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [23] DÄRR, A., J. P. KOTTHAUS und T. ANDO, *Electron-spin resonance in an inversion layer on InSb*, in: *Proceedings of the 13th International Conference on the Physics of Semiconductors*, herausgegeben von F. G. Fumi, S. 774, 1976.
- [24] DAS SARMA, S., J. FABIAN, X. HU und I. ŽUTIĆ, *Spin electronics and spin computation*, Solid State Commun. **119**, 207 (2001).

- [25] DATTA, S. und D. DAS, *Electronic analog of the electro-optic modulator*, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [26] DÖHRMANN, S., D. HÄGELE, J. RUDOLPH, D. SCHUH, M. BICHLER und M. OESTREICH, *Anomalous Spin Dephasing in (110) GaAs Quantum Wells: Anisotropy and Intersubband Effects*, Phys. Rev. Lett. **93**, 147405 (2004).
- [27] DRESSELHAUS, G., *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc-Blende Structures*, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [28] D'YAKONOV, M. I. und V. Y. KACHOROVSKII, *Spin relaxation of two-dimensional electrons in noncentrosymmetric semiconductors*, Fiz. Tekh. Poluprovodn **20**, 178 (1986), [Sov. Phys. Semicond. **20**, 110 (1986)].
- [29] D'YAKONOV, M. I. und V. I. PEREL', *Spin Orientation of Electrons associated with the Interband Absorption of Light in Semiconductors*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 1954 (1971), [Sov. Phys. JETP **33**, 1053 (1971)].
- [30] D'YAKONOV, M. I. und V. I. PEREL', *Spin Relaxation of Conduction Electrons in noncentrosymmetric Semiconductors*, Fiz. Tverd. Tela **13**, 3581 (1971), [Sov. Phys. Solid State **13**, 3023 (1972)].
- [31] D'YAKONOV, M. I. und V. I. PEREL', *Optical orientation in a system of electrons and lattice nuclei in semiconductors*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **38**, 362 (1973), [Sov. Phys. JETP **38**, 177 (1973)].
- [32] ELLIOTT, R. J., *Theory of the Effect of Spin-Orbit Coupling on Magnetic Resonance in Some Semiconductors*, Phys. Rev. **96**, 266 (1954).
- [33] FANG, F. F. und W. E. HOWARD, *Negative field-effect mobility on (110) Si surfaces*, Phys. Rev. Lett. **16**, 797 (1966).
- [34] FLATTÉ, M. E. und J. M. BYERS, *Spin Diffusion in Semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4220 (2000).
- [35] FLATTÉ, M. E., J. M. BYERS und W. H. LAU, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, Kap. Spin Dynamics in Semiconductors, Nanoscience and Technology, Springer, Berlin, 2002.
- [36] FRÖHLICH, H., H. PELZER und S. ZIENAU, Phil. Mag. **41**, 221 (1950).
- [37] GANICHEV, S. D., S. N. DANILOV, V. V. BEL'KOV, E. L. IVCHENKO, M. BICHLER, W. WEGSCHEIDER, D. WEISS und W. PRETTL, *Spin-Sensitive Bleaching and Monopolar Spin Orientation in Quantum Wells*, Phys. Rev. Lett. **88**, 057401 (2002).
- [38] GANICHEV, S. D. und W. PRETTL, *Spin photocurrents in quantum wells*, J. Phys.: Condens. Matter **15**, R935 (2003).

- [39] GEHRIG, E. und O. HESS, *Spatio-Temporal Dynamics and Quantum Fluctuations in Semiconductor Lasers*, Bd. 189 von *Springer Tracts in Modern Physics*, Springer, Berlin, 2003.
- [40] GLAZOV, M. M. und E. L. IVCHENKO, *Precession Spin Relaxation Mechanism Caused by Frequent Electron-Electron Collisions*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **75**, 476 (2002), [JETP Lett. **75**, 403 (2002)].
- [41] GLAZOV, M. M. und E. L. IVCHENKO, *D'yakonov-Perel' Spin Relaxation Controlled by Electron-Electron Scattering*, J. Supercond.: Nov. Magn. **16**, 735 (2003).
- [42] GLAZOV, M. M. und E. L. IVCHENKO, *Effect of Electron-Electron Interaction on Spin Relaxation of Charge Carriers in Semiconductors*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **126**, 1465 (2004), [JETP **99**, 1279 (2004)].
- [43] GSL, *GNU Scientific Library*, <http://www.gnu.org/software/gsl>.
- [44] HAUG, H. und A. P. JAUHO, *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, Springer, Berlin, 1998.
- [45] HAUG, H. und S. W. KOCH, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors*, World Scientific, Singapore, 1993, 2. Aufl.
- [46] HAUG, H. und S. W. KOCH, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors*, World Scientific, Singapore, 2004, 4. Aufl.
- [47] HEBERLE, A. P., W. W. RÜHLE und K. PLOOG, *Quantum Beats of Electron Larmor Precession in GaAs Wells*, Phys. Rev. Lett. **72**, 3887 (1994).
- [48] HU, X., R. DE SOUSA und S. DAS SARMA, *Decoherence and dephasing in spin-based solid state quantum computers*, cond-mat/0108339 (2001).
- [49] IVCHENKO, E. L. und G. E. PIKUS, *Superlattices and other heterostructures*, Bd. 110 von *Springer Series in Solid State Sciences*, Springer, Berlin, 1997.
- [50] IVCHENKO, E. L., A. A. TOROPOV und P. VOISIN, *Interface optical anisotropy in a heterostructure with different cations and anions*, Phys. Solid State **40**, 1924 (1998).
- [51] JACOBINI, C. und L. REGGIANI, *The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*, Rev. Mod. Phys. **55**, 645 (1983).
- [52] KAINZ, J., *Theorie der Spinrelaxation und Intersubband-Absorption in Halbleiter-Quantenstrukturen*, Dissertation, Universität Regensburg (2004).
- [53] KAINZ, J., U. RÖSSLER und R. WINKLER, *Temperature dependence of D'yakonov Perel' spin relaxation in zinc-blende semiconductor quantum structures*, Phys. Rev. B **70**, 195322 (2004).

- [54] KANE, E. O., *Energy band structure in p-type Germanium and Silicon*, J. Phys. Chem. Solids **1**, 82 (1956).
- [55] KANE, E. O., *Band structure of indium antimonide*, J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [56] KANE, E. O., *Semiconductors and Semimetals*, Bd. 1, S. 75, Academic Press, New York, 1966.
- [57] KHITROVA, G., H. M. GIBBS, F. JAHNKE, M. KIRA und S. W. KOCH, *Nonlinear optics of normal-mode-coupling semiconductor microcavities*, Rev. Mod. Phys. **71**, 1591 (1999).
- [58] KIKKAWA, J. M., J. A. GUPTA, I. MALAJOVICH und D. D. AWSCHALOM, *Spin coherence in semiconductors: storage, transport and reduced dimensionality*, Physica E **9**, 194 (2001).
- [59] KUHN, T., *Ladungsträgerdynamik in Halbleitersystemen fern vom Gleichgewicht: Elektronisches Rauschen und kohärente Prozesse*, Shaker, Aachen, 1994.
- [60] KUHN, T., *Theory of transport properties of semiconductor nanostructures*, Kap. 6: Density matrix theory of coherent ultrafast dynamics, Chapman & Hill, London, 1998.
- [61] KUHN, T., *private Mitteilung* (2004).
- [62] KUHN, T. und F. ROSSI, *Analysis of Coherent and Incoherent Phenomena in Photoexcited Semiconductors: A Monte Carlo Approach*, Phys. Rev. Lett. **69**, 977 (1992).
- [63] KUHN, T. und F. ROSSI, *Monte Carlo simulation of ultrafast processes in photoexcited semiconductors: coherent and incoherent dynamics*, Phys. Rev. B **46**, 7496 (1992).
- [64] KUZNETSOV, A. V., *Interaction of ultrashort light pulses with semiconductors: Effective Bloch equations with relaxation and memory effects*, Phys. Rev. B **44**, 8721 (1991).
- [65] LASSNIG, R., $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ *theory, effective mass approach and and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-AlGaAs heterostructures*, Phys. Rev. B **31**, 8076 (1985).
- [66] LECHNER, C. und U. RÖSSLER, *Extension of the Semiconductor Bloch Equations for Spin Dynamics*, in: *Proceedings of the 27th ICPS*, herausgegeben von J. Menéndez und C. Van de Walle, AIP Publishing, New York, S. 1336, 2004.
- [67] LECHNER, C. und U. RÖSSLER, *A microscopic approach to spin dynamics: meaning of spin relaxation times*, Phys. Rev. B **72**, 045311 (2005).

- [68] LECHNER, C. und U. RÖSSLER, *The spin-dependent semiconductor Bloch equations: a microscopic theory of Bir-Aronov-Pikus spin-relaxation*, Phys. Rev. B **72**, 153317 (2005).
- [69] LINDBERG, M. und S. W. KOCH, *Effective Bloch equations for Semiconductors*, Phys. Rev. B **38**, 3342 (1988).
- [70] LÖWDIN, P.-O., *A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory*, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [71] LÖWDIN, P.-O., *Studies in Perturbation Theory IV. Solution of Eigenvalue Problem by Projection Operator Formalism*, J. Math. Phys. **3**, 969 (1962).
- [72] LUGLI, P., P. BORDONE, S. GUALDI, P. POLI und S. M. GOODNICK, *Hot phonons in quantum well systems*, Solid-State Electron. **32**, 1881 (1989).
- [73] LUNDSTROM, M., *Fundamentals of carrier transport*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [74] LUTTINGER, J. M., *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [75] LUTTINGER, J. M. und W. KOHN, *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [76] LUTTINGER, J. M. und W. KOHN, *Quantum Theory of Electrical Transport Phenomena. II*, Phys. Rev. **109**, 1892 (1958).
- [77] MADELUNG, O. (Hg.), *Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Bd. 17 a, Springer, Berlin, 1982.
- [78] MAIALLE, M. Z. und M. H. DEGANI, *Electron-spin relaxation in p-type quantum wells via electron-hole exchange interaction: The effects of the valence - band spin mixing and of an applied longitudinal electric field*, Phys. Rev. B **55**, 13771 (1997).
- [79] MAIALLE, M. Z., E. A. DE ANDRADA E SILVA und L. J. SHAM, *Exciton spin dynamics in quantum wells*, Phys. Rev. B **47**, 15776 (1993).
- [80] MAPLESOFT, *Maple 9.5*, <http://www.maplesoft.com>.
- [81] MAYER, H. und U. RÖSSLER, *Spin splitting and anisotropy of cyclotron resonance in the conduction band of GaAs*, Phys. Rev. B **44**, 9048 (1991).
- [82] MEIER, F. und B. P. ZAKHARCHENYA (Hg.), *Optical Orientation*, Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [83] NITTA, J., T. AKAZAKI, H. TAKAYANAGI und T. ENOKI, *Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ heterostructure*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).
- [84] NUMERICAL RECIPES, <http://www.nr.com>.

- [85] OESTREICH, M., M. BENDER, J. HÜBNER, D. HÄGELE, W. W. RÜHLE, T. HARTMANN, P. J. KLAR, W. HEIMBRODT, M. LAMPALZER, K. VOLZ und W. STOLZ, *Spin injection, spin transport and spin coherence*, Semicond. Sci. Technol. **17**, 285 (2002).
- [86] OHNO, Y., R. TERAUCHI, T. ADACHI, F. MATSUKURA und H. OHNO, *Spin Relaxation in GaAs(110) Quantum Wells*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4196 (1999).
- [87] OHNO, Y., R. TERAUCHI, T. ADACHI, F. MATSUKURA und H. OHNO, *Electron spin relaxation beyond D'yakonov Perel' interaction in GaAs/AlGaAs quantum wells*, Physica E **6**, 817 (2000).
- [88] PAPADAKIS, S. J., E. P. DEPOORTERE, H. C. MANOHARAN, M. SHAYEGAN und R. WINKLER, *The Effect of Spin Splitting on the Metallic Behavior of a Two-Dimensional System*, Science **283**, 2056 (1999).
- [89] PIKUS, G. E. und A. N. TITKOV, *Optical Orientation*, Kap. : Spin Relaxation under Optical Orientation in Semiconductors, Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [90] PRICE, P. J., *Two-Dimensional Electron Transport in Semiconductor Layers: I. Phonon Scattering*, Ann. of Phys. **133**, 217 (1981).
- [91] PRICE, P. J., *Polar-optical-mode scattering for an ideal quantum-well heterostructure*, Phys. Rev. B **30**, 2234 (1984).
- [92] PRINZ, G. A., *Magnetoelectronics*, Science **282**, 1660 (1998).
- [93] RIDDOCH, F. A. und B. K. RIDLEY, *On the scattering of electrons by polar optical phonons in quasi-2D quantum wells*, J. Phys. C **16**, 6971 (1983).
- [94] ROSSI, F. und T. KUHN, *Theory of ultrafast phenomena in photoexcited semiconductors*, Rev. Mod. Phys. **74**, 895 (2002).
- [95] RÖSSLER, U., *Nonparabolicity and warping in the conduction band of GaAs*, Solid State Commun. **49**, 943 (1984).
- [96] RÖSSLER, U., *Optical Response and Spin Relaxation in Semiconductor Systems under Excitation with Arbitrary Polarization*, phys. stat. sol. (b) **234**, 385 (2002).
- [97] RÖSSLER, U., *Solid State Theory*, Springer, Berlin, 2004.
- [98] RÖSSLER, U. und J. KAINZ, *Microscopic interface asymmetry and spin-splitting of electron subbands in semiconductor quantum structures*, Solid State Commun. **121**, 313 (2002).
- [99] RÜCKER, H., E. MOLINARI und P. LUGLI, *Microscopic calculation of the electron-phonon interaction in quantum wells*, Phys. Rev. B **45**, 6747 (1992).
- [100] RUDOLPH, J., D. HÄGELE, H. M. GIBBS, G. KHITROVA und M. OESTREICH, *Laser threshold reduction in a spintronic device*, Appl. Phys. Lett. **82**, 4516 (2003).

- [101] SAKURAI, J. J., *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, New York, 1994.
- [102] SCHÄFER, W. und M. WEGENER, *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*, Advanced Texts in Physics, Springer, Berlin, 2002.
- [103] SCHILP, J., T. KUHN und G. MAHLER, *Electron-phonon quantum kinetics in pulse-excited semiconductors: Memory and renormalization effects*, Phys. Rev. B **50**, 5435 (1994).
- [104] SCHLIEMANN, J., J. CARLOS EGUES und D. LOSS, *Nonballistic Spin-Field-Effect Transistor*, Phys. Rev. Lett. **90**, 146801 (2003).
- [105] SCHMIDT, G., D. FERRAND, L. W. MOLENKAMP, A. T. FILIP und B. J. VAN WEES, *Fundamental obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive semiconductor*, Phys. Rev. B **62**, R4790 (2000).
- [106] SHAM, L., *Semiconductor Devices: Closer to Coherence Control*, Science **277**, 1258 (1997).
- [107] STERN, F., *Self-Consistent Results for n-Type Si Inversion Layers*, Phys. Rev. B **5**, 4891 (1972).
- [108] STERN, F. und W. E. HOWARD, *Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit*, Phys. Rev. **163**, 816 (1967).
- [109] SVELTO, O. und D. C. HANNA, *Principles of Lasers*, Plenum Press, New York, 1982, 2. Aufl.
- [110] TERAUCHI, R., Y. OHNO, T. ADACHI, A. SATO, F. MATSUKURA, A. TACKEUCHI und H. OHNO, *Carrier Mobility Dependence of Electron Spin Relaxation in GaAs Quantum Wells*, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 2549 (1999).
- [111] TORREY, H. C., *Transient Nutations in Nuclear Magnetic Resonance*, Phys. Rev. **76**, 1059 (1949).
- [112] VASKO, F. T. und A. KUZNETSOV, *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures*, Graduate Texts in Contemporary Physics, Springer, Berlin, 1998.
- [113] WENG, M. Q. und M. W. WU, *Kinetic theory of spin transport in n-type semiconductor quantum wells*, J. Appl. Phys. **93**, 410 (2003).
- [114] WENG, M. Q. und M. W. WU, *Rashba-effect-induced spin-dephasing in n-type InAs quantum wells*, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 5563 (2003).
- [115] WENG, M. Q. und M. W. WU, *Spin dephasing in n-type GaAs quantum wells*, Phys. Rev. B **68**, 075312 (2003).
- [116] WENG, M. Q. und M. W. WU, *Spin dephasing in n-type GaAs quantum wells in the presence of high magnetic fields in Voigt configuration*, phys. stat. sol. (b) **239**, 121 (2003).

- [117] WENG, M. Q. und M. W. WU, *Multisubband effect in spin dephasing in semiconductor quantum wells*, Phys. Rev. B **70**, 195318 (2004).
- [118] WENG, M. Q., M. W. WU und L. JIANG, *Hot-electron effect in spin dephasing in n-type GaAs quantum wells*, Phys. Rev. B **69**, 245320 (2004).
- [119] WIEDEMANN, H., *Numerische Physik*, Springer, Berlin, 2004.
- [120] WINKLER, R., *Einteilchenzustände und Exzitonen in geschichteten Halbleiterstrukturen*, Dissertation, Universität Regensburg (1994).
- [121] WINKLER, R., *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Bd. 191 von *Springer Tracts in Modern Physics*, Springer, Berlin, 2003.
- [122] WINKLER, R., *Rashba spin splitting and Ehrenfest's Theorem*, Physica E **22**, 450 (2004).
- [123] WINKLER, R., *Spin Density Matrix of Spin-3/2 Hole Systems*, Phys. Rev. B **70**, 125301 (2004).
- [124] WINKLER, R., *private Mitteilung* (2005).
- [125] WINKLER, R., *Spin Polarization of Quasi Two-Dimensional Hole Systems*, Phys. Rev. B **71**, 113307 (2005).
- [126] WOLF, S. A., D. D. AWSCHALOM, S. A. BUHRMAN, S. A. DAUGHTON, S. VON MOLNÁR, M. L. ROUKES, A. Y. CHTCHELKANOVA und D. M. TREGER, *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*, Science **294**, 1488 (2001).
- [127] WOLTERINK, T., V. AXT und T. KUHN, *Role of exchange interaction Coulomb quantum kinetics*, Phys. Rev. B **67**, 115311 (2003).
- [128] WU, M. W., *Kinetic Theory of Spin Coherence of Electrons in Semiconductors*, J. of Supercond. **14**, 245 (2001).
- [129] WU, M. W. und M. KUWATA-GONOKAMI, *Can D'yakonov Perel' effect cause spin dephasing in GaAs(110) quantum wells?*, Solid State Commun. **121**, 509 (2002).
- [130] WU, M. W. und H. METIU, *Kinetics of spin coherence of electrons in an undoped semiconductor quantum well*, Phys. Rev. B **61**, 2945 (2000).
- [131] WU, M. W. und C. NING, *Dyakonov-Perel Effect on Spin Dephasing in n-Type GaAs*, phys. stat. sol. (b) **222**, 523 (2000).
- [132] WU, M. W. und C. NING, *A novel mechanism for spin dephasing due to spin-conserving scatterings*, Eur. Phys. J. B **18**, 373 (2000).
- [133] YAFET, Y., *g-Factor and Spin-Lattice relaxation of Conduction Electrons*, Bd. 14 von *Solid State Physics*, S. 1, 1963.

- [134] YOUNG, D., J. A. GUPTA, E. JOHNSTON-HALPERIN, R. EPSTEIN, Y. KATO und D. D. AWSCHALOM, *Optical, electrical and magnetic manipulation of spins in semiconductors*, Semincond. Sci. Technol. **17**, 275 (2002).
- [135] ZAWADSKI, W. und P. PFEFFER, *Spin splitting of subband energies due to inversion asymmetry in semiconductor heterostructures*, Semincond. Sci Technol. **19**, R1 (2004).
- [136] ZHIRNOV, V. V., R. K. CAVIN, J. A. HUTCHBY und G. I. BOURIANOFF, *Limits to Binary Logic Switch Scaling - A Gedanken Model*, Proc. IEEE **91**, 1934 (2003).
- [137] ZIMMERMANN, R., *Transverse relaxation and polarization specifics in the dynamical Stark effect of excitons*, phys. stat. sol. (b) **159**, 317 (1990).
- [138] ZIMMERMANN, R., J. WAUER, A. LEITENSTORFER und C. FÜRST, *Observation of memory effects in electron-phonon quantum kinetics*, J. of Lum. **76** & **77**, 34 (1998).
- [139] ŽUTIĆ, I., J. FABIAN und S. DAS DARMA, *Spintronics: Fundamentals and applications*, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).

PUBLIKATIONSLISTE

1. *Spin relaxation and dephasing: a microscopic approach,*
C. Lechner, U. Rössler,
Poster Präsentation, PASPS III, Santa Barbara (2004).
2. *Extension of the Semiconductor Bloch Equations for Spin Dynamics,*
C. Lechner, U. Rössler,
Eds.: J. Menéndez, C.G. Van de Walle,
Physics of Semiconductors (27th ICPS)
AIP Publishing, New York (2004).
3. *Microscopic approach to spin dynamics: meaning of spin relaxation times,*
C. Lechner, U. Rössler,
Phys. Rev. B **72**, 045311 (2005).
4. *The spin-dependent semiconductor Bloch equations: a microscopic theory of Bir-Aronov-Pikus spin-relaxation,*
C. Lechner, U. Rössler,
Phys. Rev. B **72**, 153317 (2005).

DANKSAGUNG

Ich möchte mich an dieser Stelle bei allen bedanken, die mich auf dem Weg zur Fertigstellung begleitet und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Dabei ist an erster Stelle mein Betreuer Prof. Dr. Ulrich Rössler zu nennen, der mir ein freies und doch zielgerichtetes Arbeiten möglich machte und stets für Diskussionen zur Verfügung stand. Darüber hinaus gab er mir stets die Chance meine Arbeit zu präsentieren, sei es auf Konferenzen oder in Seminarvorträgen. Ohne ihn wäre diese Arbeit nicht so erfolgreich verlaufen, wie sie es ist.

Für die finanzielle Unterstützung will ich mich bei der DFG Forschergruppe *Ferromagnet-Halbleiter-Nanostrukturen*, die großzügig die finanziellen Mittel für diese Arbeit zur Verfügung stellte.

Besonderer Dank gebührt auch den Mitstreitern bzw. Vorreitern im Bereich der Spinrelaxation, Herrn Dr. Josef Kainz und Herrn Prof. Dr. Roland Winkler. Beiden danke ich für die vielen Diskussionen (nicht nur über die Physik ...).

Speziell im Bereich der Numerik schulde ich Herrn Prof. Dr. Tilmann Kuhn und Herrn Privatdozent Dr. Vollrath Martin Axt der Universität Münster Dank. Durch deren Anregungen wurden bereits im Vorfeld einige numerische „Stolpersteine“ aus dem Weg geräumt

Für das angenehme Arbeitsumfeld, das ich am Lehrstuhl genießen durfte, will ich mich bei allen ehemaligen und jetzigen Lehrstuhlmitgliedern bedanken, besonders bei meinen Zimmerkollegen Josef, Michael L., Harald, Andreas, Mike, Bernhard und Michael H. .

Hier muss auch besonders die „gute Seele“ des Lehrstuhls, Angela Reisser, hervorgehoben werden, die nicht nur mit der täglichen Kaffee- und Tee-Runde das Klima am Lehrstuhl so wunderbar gestaltet, sondern auch immer bei den verschiedensten (meist administrativen) Tätigkeiten zur Seite stand.

Herzlichen Dank auch an Andreas Jung und die Laufgruppe „Grifoni-Richter“ für die sportliche Entspannung nach oder auch zwischen den Arbeitsstunden des Tages.

Dank gebührt auch den EDV Betreuern der Fakultät, Fritz Wünsch und Rudolf

Holzer, und der Linux Truppe des Rechenzentrums (Christoph Bauer, Christian Guggenberger, Peter Gruber und Matthias Böhm), die eine hervorragende EDV Infrastruktur geschaffen haben und fleißig pflegen. Mit in diesen Reihen sind die Workgroupmanager am Lehrstuhl zu nennen, Andreas Jung, Josef Kainz, Michael Wimmer, Michael Hartung und Andreas Lassl. Es war mir eine große Freude mit Euch zusammenzuarbeiten.

Auch meinen Eltern, Großeltern und Schwiegereltern will ich für die moralische Unterstützung Dank sagen.

Zum Abschluss gebührt der größte Dank meiner Frau als emotionale Stütze „in guten wie in schlechten Zeiten“.