



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

Simulation der Modendynamik von Fabry-Pérot-Laserdioden unter Berücksichtigung mikroskopischer Effekte

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

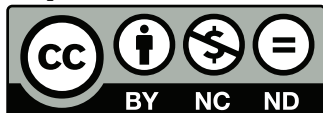
doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von M.Sc. Eduard Kuhn
geboren am 15.07.1993 in Bremen

eingereicht am 09.06.2022

Erstgutachterin: Prof. Dr. Angela Thränhardt
Zweitgutachter: Prof. Dr. Ulrich T. Schwarz
Tag der Verteidigung: 02.11.2022

Das Werk ist lizenziert unter der Lizenz CC BY-NC-ND**4.0 International** Namensnennung - Nicht-kommerziell - Keine Bearbeitung. Ausgenommen ist das Logo der TU Chemnitz sowie Abbildungen und andere Materialien Dritter, bei denen ein Urhebervermerk angegeben ist. Wenn das Material nicht in der Creative-Commons-Lizenz enthalten ist und Ihre beabsichtigte Nutzung nicht durch gesetzliche Bestimmungen erlaubt ist oder über die erlaubte Nutzung hinausgeht, müssen Sie die Erlaubnis direkt beim Urheberrechtseinhaber einholen. Um eine Kopie dieser Lizenz einzusehen, besuchen Sie <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0>.



Bibliografische Beschreibung

Kuhn, Eduard

Simulation der Modendynamik von Fabry-Pérot-Laserdioden unter Berücksichtigung mikroskopischer Effekte
Dissertation an der Fakultät für Naturwissenschaften der Technischen Universität Chemnitz

Dissertation, 2022

185 Seiten, 98 Abbildungen, 21 Tabellen, 142 Literaturzitate

Kurzfassung

In dieser Dissertation werden verschiedene Methoden zur Simulation der Dynamik der optischen Moden einer Fabry-Pérot-Laserdiode diskutiert. Experimentell lässt sich hierbei der Effekt des Modenrollens oder Modenhüpfens beobachten. Hier sind zu einem gegebenem Zeitpunkt nur ein oder zwei longitudinale Moden aktiv, dabei wechseln sich die Moden in einem bestimmten Wellenlängenbereich ab. Eine Erklärung für diesen Effekt sind Vibrationen der Ladungsträgerdichten in den aktiven Schichten bzw. den Quantenfilmen. So werden in der ersten betrachteten Methode die Ladungsträgerdichten bzw. die Besetzungsfunktionen zunächst als ortsabhängig betrachtet, um die Ladungsträger-Vibrationen direkt zu bestimmen. Bei diesem Vorgehen wird eine hohe Rechenzeit benötigt, welche bei einer anderen Methode mithilfe eines effektiven Modenwechselwirkungsterms allerdings erheblich reduziert wird. Im ersten Teil dieser Arbeit wird gezeigt, dass diese beiden Methoden sehr ähnliche Ergebnisse liefern, außerdem wird der effektive Modenwechselwirkungsterm unter Berücksichtigung verschiedener Streuprozesse hergeleitet. Bei Strukturen mit mehreren Quantenfilmen oder größeren Stegbreiten spielt der Transport der Ladungsträger von den Kontakten zu den Quantenfilmen eine große Rolle, welcher in dieser Arbeit mithilfe der Drift-Diffusions-Gleichungen untersucht wird. Abschließend wird die Modendynamik mithilfe des Traveling-Wave-Modells simuliert. Im Gegensatz zu den bisher in dieser Arbeit verwendeten Methoden wird das optische Feld hierbei nicht mehr in die einzelnen Moden aufgeschlüsselt, sondern es wird partielle Differentialgleichung gelöst.

Schlagworte: Galliumnitrid, Laserdiode, Halbleiterlaser, Kantenemittierender Halbleiterlaser, Quantenwell-Laser, Modendynamik, Modenwettbewerb, Halbleiter-Bloch-Gleichungen, Festkörperphysik

Bibliographic description

Kuhn, Eduard

Simulation of the Mode Dynamics in Fabry-Pérot Laser Diodes Considering Microscopic Effects

Chemnitz University of Technology, Faculty of Natural Sciences

Dissertation, 2022

185 pages, 98 figures, 21 tables, 142 citations

Abstract

In this thesis different methods for the simulation of the mode dynamics in Fabry-Pérot laser diodes are discussed. These laser diodes show the effect of mode rolling, where the currently active longitudinal mode changes over time. This effect can be observed experimentally and can be explained by beating vibrations of the carrier densities in the quantum wells. In the first method used in this work the location dependence of the carrier densities and the distribution functions is considered. This procedure requires a lot of computing time, which is significantly reduced in another method using an effective mode interaction term. In the first part of this thesis it is shown that these two methods give very similar results, and the effective mode interaction term is derived taking into account various scattering processes. For structures with multiple quantum wells or broad ridge widths the transport of the charge carriers from the contacts to the quantum wells is important, which is examined in this work using the drift-diffusion equations. Finally, the mode dynamics is simulated using the traveling wave model. In contrast to the methods used so far in this work the optical field is no longer broken down into the individual modes, instead a partial differential equation is solved.

Keywords: gallium nitride, laser diode, semiconductor laser, edge-emitting semiconductor laser, quantum well laser, mode dynamics, mode competition, semiconductor Bloch equations, solid state physics

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
2	Optische Moden in der Laserdiode	13
2.1	Struktur einer Fabry-Pérot-Laserdiode	13
2.2	Maxwell-Gleichungen	14
2.3	Wellenleiter-Theorie	15
2.4	Frequenzabstände der longitudinalen Moden	17
2.5	Effektive eindimensionale Gleichung	21
2.6	Hamilton-Operator	23
3	Beschreibung der Quantenfilme	25
3.1	Hamilton-Operator	25
3.2	Besetzungsfunktionen und Ladungsträgerdichte	28
3.3	Halbleiter-Bloch-Gleichungen	29
3.4	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie	34
3.5	Näherung der effektiven Massen	38
3.6	Beschreibung der Streuterme	38
3.7	Coulomb-Streuung	40
3.8	Phonon-Streuung	42
3.9	Suszeptibilität	44
3.10	Spontane Emission	47
4	Modendynamik mit einfachem Pumpterme	53
4.1	Zusätzliche Terme in den Bewegungsgleichungen	53
4.2	Photonenverluste und Leistung	54
4.3	Zusammenstellen der Bewegungsgleichungen	55
4.4	Vereinfachungen in diesem Kapitel	56
4.5	Adiabatische Eliminierung der mikroskopischen Polarisaton	58
4.6	Ratengleichungen	60
4.7	Modendynamik mit Ratengleichungen	63
4.8	Fourierentwicklung der Besetzungsfunktionen	65
4.9	Beispiel mit Dynamik der Besetzungsfunktionen	68
4.10	Bewegungsgleichungen der Ladungsträgerdichten	69
4.11	Beispiel mit Dynamik der Ladungsträgerdichten	71
4.12	Fazit	74
5	Analyse der Modenwechselwirkung	75
5.1	Herleitung der Modenwechselwirkungsterme	75
5.2	Modenwechselwirkung mit konstanter Streuzeit	81
5.3	Kompliziertere Streuterme	84
5.4	Einfluss der Photonendichte	86
5.5	Einfluss der Modenfunktionen	87
5.6	Spektrales Lochbrennen	89
5.7	Einfaches Modendynamik-Modell	94
5.8	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	100
5.9	Fazit	103

6	Drift-Diffusions-Gleichungen	105
6.1	Bestimmung der Ladungsträgerdichten	105
6.2	Drift-Diffusions-Gleichungen	106
6.3	Thermodynamisches Gleichgewicht	107
6.4	Statistische Funktionen	108
6.5	Finite-Volumen-Verfahren	109
6.6	Scharfetter-Gummel-Methode	109
6.7	Kopplung mit dem Quantenfilm	111
6.8	Simulationsergebnisse für verschiedene Strukturen	113
6.9	Simulation der Modendynamik	120
6.10	Modendynamik der Laserdiode mit kleiner Stegbreite	121
6.11	Modendynamik der Laserdiode mit zwei Quantenfilmen	123
6.12	Modendynamik für die Laserdiode mit großer Stegbreite	124
6.13	Fazit	127
7	Traveling-Wave-Modell	129
7.1	Ansatz für das optische Feld	129
7.2	Das vollständige Modell	132
7.3	Numerische Implementierung	134
7.4	Ortsabhängigkeit des Feldes	138
7.5	Modendynamik	140
7.6	Einfluss der Anfangsbedingungen	142
7.7	Symmetrischer Modenkopplungsterm	143
7.8	Mikroskopisches Traveling-Wave-Modell	145
7.9	Fazit	149
8	Zusammenfassung und Ausblick	151
9	Anhang	155
9.1	Software	155
9.2	Dynamische Abschirmung	155
9.3	Coulomb-Summen	157
9.4	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Parameter	159
9.5	Parametrisierung der dielektrischen Funktion	161
9.6	Parametrisierung der Mobilität	162
9.7	Beispielstruktur der Laserdiode	163
9.7.1	Struktur A	164
9.7.2	Struktur B	164
9.7.3	Struktur C	164
9.8	Weitere Parameter	165

Kapitel 1

Einleitung

Bei einem Laser werden Photonen mittels des Prozesses der stimulierten Emission erzeugt. Um einen Laser zu betreiben, muss die stimulierte Emission gegenüber der Absorption überwiegen und weitere Photonen-Verluste in der Diode kompensieren. Da für jedes erzeugte Photon ein Elektron von einem angeregten in einen nicht angeregten Zustand übergeht, muss das Lasermedium gepumpt werden, damit sich genügend Elektronen in den angeregten Zuständen befinden. Es gibt viele verschiedene Arten von Lasern, welche mit unterschiedlichen Lasermedien, Pump-Methoden und Wellenlängen arbeiten. Zum Beispiel gibt es Gaslaser [1–3], Farbstofflaser [4–7] und Festkörperlaser [8–11]. In dieser Arbeit werden aber Halbleiter-Laser behandelt, speziell Laserdioden.

Bei Laserdioden besteht das aktive Medium aus einer Halbleiterschicht, deren Material eine kleinere Bandlücke aufweist als das umliegende Material. Die Dicke der aktiven Schicht beträgt oft nur wenige Nanometer, daher wird hier auch von einem Quantenfilm gesprochen. Weil die Ladungsträger sich in diesem Fall nur in zwei Raumrichtungen frei bewegen können, weicht die Zustandsdichte von der des Bulk-Materials ab. Es ist auch möglich in einer Laserdiode anstelle eines Quantenfilms mehrere Quantenfilme zu verwenden [12], diese werden dabei durch entsprechende Barriere-Schichten getrennt. Bei Laserdioden wird die aktive Schicht über einen p - n -Übergang elektrisch gepumpt. Es gibt viele verschiedene Arten von Laserdioden, welche sich zum Beispiel in ihrer Größe und der Art, wie das Licht durch die Diode geleitet wird, unterscheiden.

Zu den kleineren Laserdioden gehören zum Beispiel VCSEL (“Vertical-Cavity Surface-Emitting Laser”), hier breitet sich das Licht senkrecht zu den Quantenfilmen aus. Die kreisförmigen Quantenfilme in diesen Dioden haben einen Durchmesser in der Größenordnung von wenigen Mikrometern, dementsprechend sind die Schwellstromstärken niedrig und liegen im Bereich von 1 mA [13]. Aufgrund der guten Energie-Effizienz, der Temperatur-Stabilität und der großen Datenübertragungsraten ist ein wichtiger Anwendungsbereich dieser Art von Laserdioden die optische Kommunikation [14–22].

In dieser Arbeit sollen jedoch Laserdioden behandelt werden, bei denen das Licht parallel zu den Quantenfilmen geleitet wird. Zu diesem Zweck wird bei Kantenemittern ein Wellenleiter benutzt, in dessen Mitte die Quantenfilme eingebettet werden. Das Licht wird an den beiden Enden des Wellenleiters reflektiert. Auf der einen Seite wird meist ein dielektrischer Spiegel verwendet, um möglichst das gesamte Licht zurück zu reflektieren. Dieser besteht wie ein Bragg-Spiegel aus einer Abfolge von dielektrischen Schichten und wird für die verwendete Laserwellenlänge optimiert. Auf der gegenüberliegenden Seite kann die Reflektivität je nach Anwendung angepasst werden, zum Beispiel mit verschiedenen Beschichtungen [23]. Für diese Art von Laserdioden gibt es eine Vielzahl von Anwendungen, zum Beispiel Laser-Displays [24–27], Projektion [28–30], Belichtung [31, 32], Materialbearbeitung [33] und Unterwasser-Kommunikation [34–36].

Die Größe der Bandlücke des Quantenfilms bestimmt die Laser-Wellenlänge einer Laserdiode, daher spielt die Wahl des Materials eine wichtige Rolle. Zum Beispiel werden oft Arsenide und Phosphide benutzt, allerdings sind hier aufgrund der kleinen Bandlücke nur infrarote und rote Laserdioden möglich [37]. Für blaue und grüne Laserdioden werden heutzutage Nitride verwendet, welche wesentlich höhere Bandlücken aufweisen (3.3 eV für Galliumnitrid [38]). Allerdings unterscheiden sich Gitterkonstanten der Nitride stark, beispielsweise $a = 3.545 \text{ \AA}$ für InN und $a = 3.189 \text{ \AA}$ für GaN [39]. Dies muss bei der Konstruktion der Laserdioden berücksichtigt werden, da es sonst zu großen Verspannungen und Rissen im Bauteil kommen kann. Außerdem erwies sich die p -Dotierung zunächst als schwierig [40, 41], dennoch gelang es S. Nakamura, H. Amano und I. Akasaki im Jahr 1989, die ersten GaN-basierten blauen Leuchtdioden (LEDs) herzustellen [42–44]. Kurz darauf in 1996 folgten auch die ersten violetten Laserdioden [45–47]. Bis zu den ersten grünen GaN-basierten Laserdioden dauerte es allerdings noch über 10 Jahre [28, 48–50].

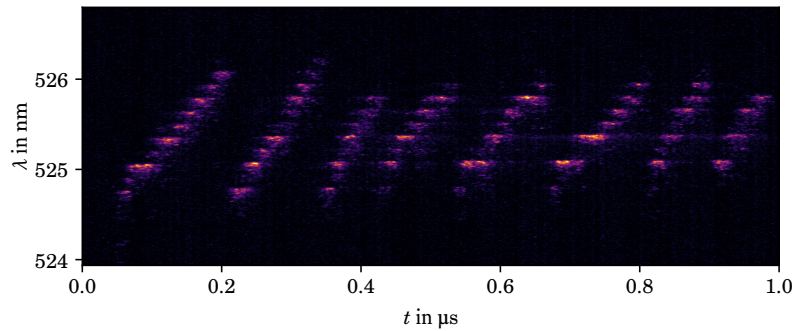


Abbildung 1.1: Streak-Camera-Messung einer grünen Nitrid-Laserdiode mit einer Resonatorlänge von $300\ \mu\text{m}$. Dargestellt ist das Laserlicht aufgeschlüsselt nach Wellenlänge und Zeit. Gemessen von Lukas Uhlig aus der AG Schwarz an der TU Chemnitz, entnommen aus Ref. [51].

Die Resonatorlänge einer Laserdiode bzw. die Länge des Wellenleiters liegt für Kantenemitter meistens in der Größenordnung von mehreren hundert Mikrometern. Aufgrund dieser großen Resonatorlänge können beim Laserbetrieb mehrere optische longitudinale Moden aktiv sein. Um dies zu verhindern, kann eine periodische dielektrische Struktur entlang der aktiven Region verwendet werden, wie zum Beispiel bei “Distributed Feedback Lasern” (DFB) [52]. Bei Fabry-Pérot-Laserdioden hingegen gibt es keine solche periodische Struktur und der Wellenleiter zusammen mit den zwei teildurchlässigen Spiegeln bildet einen Fabry-Pérot-Resonator. Dadurch können mehrere longitudinale Moden an der Laserdynamik beteiligt sein. Es stellt sich heraus, dass die Photonenzahlen dieser longitudinalen Moden eine interessante zeitliche Dynamik aufweisen. Experimentell kann diese zeitliche Dynamik mithilfe einer Streak-Camera untersucht werden, wobei das Laserlicht nach Zeit und Wellenlänge aufgeschlüsselt werden kann [51, 53–55]. Ein Beispiel für eine grüne Laserdiode ist in Abb. 1.1 gezeigt. Dabei kann der Effekt des Modenrollens oder Modenhüpfens beobachtet werden. Hier sind zu einem gegebenen Zeitpunkt nur ein oder zwei longitudinale Moden aktiv, dabei wechseln sich aber die Moden in einem bestimmten Wellenlängenbereich ab. Nachdem zum Beispiel eine Mode für einen Zeitraum in der Größenordnung von $100\ \text{ns}$ den größten Beitrag zum Laser-Output liefert, tut dies danach die benachbarte longitudinale Mode mit der höheren Wellenlänge.

Eine theoretische Erklärung für Halbleiter-Laserdioden geht auf M. Yamada und M. Ahmed zurück [56–60]. Sie führen dieses Verhalten auf nichtlineare Effekte in der optischen Verstärkung und Vibrationen der Ladungsträgerdichte in der aktiven Schicht zurück, welche durch die Überlagerung der verschiedenen longitudinalen Moden angeregt werden. Um dies in Ratengleichungen zu modellieren, verwenden sie effektive Moden-Wechselwirkungsterme. Bei ihrer Arbeit ging es ihnen vor allem um die Untersuchung von Rauschen, was zum Beispiel beim Schreiben oder Auslesen von Daten auf optischen Datenträgern wichtig sein kann [61].

Das Ziel dieser Arbeit ist die Simulation der Modendynamik von Fabry-Pérot-Laserdioden mithilfe verschiedener Methoden. Die Ergebnisse der verschiedenen Methoden werden dabei miteinander verglichen und es wird diskutiert, welche Effekte berücksichtigt werden müssen, um die Modendynamik korrekt zu beschreiben. Die verwendeten Methoden werden dabei ausgehend von den Maxwell-Gleichungen und dem Hamilton-Operator für einen Halbleiter hergeleitet. Im ersten Teil der Arbeit wird die Dynamik des optischen Feldes über Photonenzahlen beschrieben, welche angeben, wie viele Photonen sich einer bestimmten Mode zuordnen lassen. Die Bewegungsgleichung der Photonenzahlen folgt aus der Heisenberg-Bewegungsgleichung für den Hamilton-Operator eines Halbleiters. Für die Elektronen im Quantenfilm liefert die Heisenberg-Bewegungsgleichung die Halbleiter-Bloch-Gleichungen [62, 63], welche die Dynamik der Ladungsträger in einem optischen Feld beschreiben. Zur besseren Beschreibung der Modendynamik in Laserdioden ist es notwendig, auch die Ortsabhängigkeit der Ladungsträger zu berücksichtigen. Die entsprechenden ortsabhängigen Halbleiter-Bloch-Gleichungen wurden zum Beispiel von O. Hess und T. Kuhn hergeleitet und diskutiert [64].

Ein Vorteil der Halbleiter-Bloch-Gleichungen liegt in der Möglichkeit, Vielteilcheneffekte verschiedener Art zu berücksichtigen. Zu diesen Vielteilcheneffekten gehören die Coulomb-Streuung [65–69] und die Streuung der Ladungsträger mit Phononen [62, 70–72]. Die Einbindung von verschiedenen Streutermen und deren Einfluss auf Absorptionsspektren wurde schon viel untersucht [62, 70, 73, 74]. In dieser Arbeit soll der Einfluss dieser Terme auf die effektiven Modenkopplungsterme und damit auf die Modendynamik betrachtet werden.

In dieser Arbeit werden die Halbleiter-Bloch-Gleichungen verwendet, um effektive Moden-Wechselwirkungsterme herzuleiten, die verwendet werden können, um die Modendynamik einer Laserdiode zu simulieren. Dabei wird der Einfluss verschiedener Vielteilcheneffekte diskutiert. Wird die Streuung der Ladungsträger im Quantenfilm durch eine konstante Streuzeit beschrieben, dann stimmt der Wechselwirkungsterm mit dem von Yamada et. al. [56–60] überein. Für kompliziertere Streuterme gibt es allerdings qualitative Abweichungen im Verhalten der Moden-Wechselwirkung und die Photonendichte am Ort des Quantenfilms muss in der Rechnung berücksichtigt werden.

Bei der Untersuchung der Laserdynamik einer Laserdiode spielt natürlich auch der Pump-Prozess eine entscheidende Rolle. Die Frage ist hier, wie viele Ladungsträger von den Kontakten in bestimmte Regionen der aktiven Schicht gelangen. Zur Beschreibung solch eines Transportprozesses in einem Halbleiter gibt es unterschiedliche Möglichkeiten. Beispielsweise gibt es Monte-Carlo-basierte Methoden [75] und Green-Funktions-basierte Methoden [76]. In dieser Arbeit werden aber die Drift-Diffusions-Gleichungen [77–81] verwendet, welche in der Literatur schon für viele Laser-Simulation eingesetzt wurden, zum Beispiel für VCSEL [82–84], aber auch für andere Laserdioden [85–88]. Diese Methode wird in dieser Arbeit verwendet, um die Stromdichten, mit denen die einzelnen Quantenfilme gepumpt werden, zu bestimmen. Das ist zum Beispiel für Laserdioden mit mehreren Quantenfilmen wichtig, um die Ladungsträgerdichten und damit die optischen Eigenschaften der verschiedenen Quantenfilme festzustellen. Auch bei Strukturen mit großen Stegbreiten spielen diese Stromdichten eine große Rolle. Hier sind sehr viele optische Moden an der Modendynamik beteiligt und die Stromdichten haben einen Einfluss darauf, welche Moden für die Laserdynamik relevant sind.

Im letzten Teil dieser Arbeit soll die Modendynamik anhand der Traveling-Wave-Methode [89–92] diskutiert werden, wo das optische Feld klassisch betrachtet wird. Dazu wird die Wellengleichung für das Feld gelöst, statt Bewegungsgleichungen für die Photonenzahlen der einzelnen Moden zu verwenden. Diese Methode findet vor allem Anwendung in sehr großen Laserdioden [93, 94], bei denen sehr viele optische Moden für die Laserdynamik relevant sind und sich die Aufschlüsselung in einzelne Moden schwierig gestaltet.

Kapitel 2

Optische Moden in der Laserdiode

Bei der Simulation einer Laserdiode muss sowohl die Dynamik der Elektronen und Löcher im Bauteil als auch die Dynamik des elektromagnetischen Feldes berücksichtigt werden. In diesem Kapitel werden dazu zunächst die Eigenschaften der optischen Moden, die für den Betrieb einer Laserdiode wichtig sind, diskutiert. Zu diesem Zweck wird in diesem Kapitel zunächst die Struktur der Fabry-Pérot-Laserdioden vorgestellt, die in dieser Arbeit simuliert werden sollen. Anschließend werden die Maxwell-Gleichungen genutzt um eine Differentialgleichung zur Beschreibung der optischen Moden in einem Wellenleiters herzuleiten, siehe hierzu auch Ref. [95]. Die numerische Lösung dieser Gleichung wird danach anhand zweier verschiedener Dioden-Strukturen diskutiert. Die Lösung der Modengleichung liefert auch einen effektiven Brechungsindex, welcher die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes im Wellenleiter bestimmt.

2.1 Struktur einer Fabry-Pérot-Laserdiode

Bei einer Laserdiode wird das Licht durch stimulierte Emission in einem oder mehreren Quantenfilmen erzeugt. Bei diesem Prozess rekombinieren ein Elektron und ein Loch zu einem Photon. Damit der Laser funktioniert, müssen diese Ladungsträger konstant in den Quantenfilm (QW) gepumpt werden. Bei den Kantenemitter-Laserdioden, wie sie in dieser Arbeit diskutiert werden, wird dies durch einen p - n -Übergang realisiert. Hierbei wird der Bereich zwischen Quantenfilm und einem Kontakt p -dotiert und der Bereich zwischen Quantenfilm und dem anderen Kontakt n -dotiert. Wird dann eine Spannung angelegt, fließen Elektronen von der einen Seite zum Quantenfilm und Löcher von der anderen Seite zum Quantenfilm. Der Quantenfilm besitzt eine kleinere Bandlücke im Vergleich zum umliegenden Material, daher sammeln sich die Ladungsträger im Quantenfilm, wo sie rekombinieren können.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist das Verhalten des elektromagnetischen Feldes in der Laserdiode. Im Gegensatz zur spontanen Emission wird bei der stimulierten Emission ein Photon benötigt, um ein weiteres Photon zu erzeugen. Dementsprechend ist es wichtig, dass die Photonen die Laserdiode nicht sofort verlassen, sondern eine längere Zeit in der Laserdiode verbleiben. Bei den Kantenemitter-Laserdioden wird deswegen ein Wellenleiter verwendet, an dessen beiden Enden teildurchlässige Spiegel angebracht sind. Der Wellenleiter besteht dabei aus einem Material, dessen Brechungsindex größer ist als die Brechungsindizes der umliegenden Materialien, um die räumliche Ausdehnung der elektromagnetischen Moden möglichst zu beschränken.

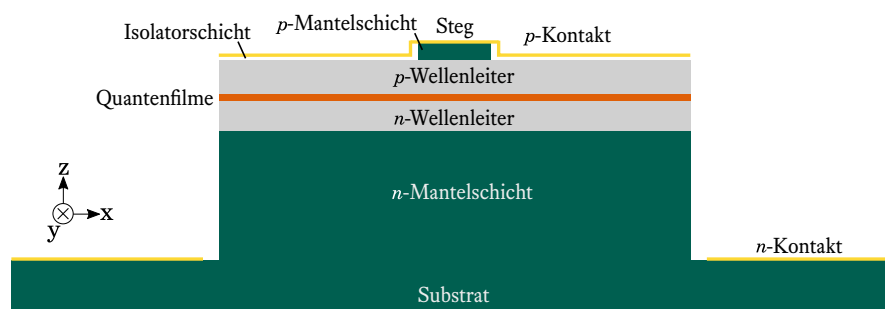


Abbildung 2.1: Skizze des Querschnitts einer Laserdiode

Das Maximum der Wellenleiter-Moden befindet sich möglichst in der Nähe der Quantenfilme, um eine möglichst effiziente stimulierte Emission zu gewährleisten. Bei Fabry-Pérot-Laserdioden, wie sie in dieser Arbeit betrachtet werden, gibt es keine Änderungen der Struktur in Ausbreitungsrichtung des optischen Feldes. Bei anderen Kantenemitter-Laserdioden wie DFB-Lasern wird hingegen eine periodische Struktur im Wellenleiter verbaut, sodass die Leitung bestimmter optischer Moden bevorzugt wird.

Die Struktur der hier betrachteten Laserdioden ist in Abb. 2.1 skizziert. Dabei ist anzumerken, dass die Strukturen heutzutage verwendeter Laserdioden komplexer sind, zum Beispiel ist die Region in der Nähe der Quantenfilme in der Regel nicht dotiert, siehe auch Kapitel 9.7 im Anhang. Die Konvention für das Koordinatensystem, welches im Folgenden benutzt wird, ist hier auch dargestellt. Die Laserdiode besteht aus verschiedenen Schichten und die Richtung senkrecht zu diesen Schichten bzw. die Wachstumsrichtung ist durch die z -Achse gegeben, wie in der Halbleiter-Theorie üblich. In der Literatur bezüglich Wellenleiter ist die z -Richtung die Ausbreitungsrichtung der Photonen im Wellenleiter, da diese Richtung aber schon vergeben ist, wird im Folgenden die y -Koordinate hierfür verwendet. Übrig bleibt die x -Koordinate, diese wird in der Literatur auch als laterale Koordinate bezeichnet. Bezüglich der x -Achse wird der Koordinaten-Nullpunkt in die Mitte der Diode gelegt.

Wie in Abb. 2.1 dargestellt, wird bei Kantenemitter-Laserdioden oft ein Steg verwendet. Dieser Steg bewirkt zum einen zusätzliche Beschränkung der Wellenleiter-Moden in x -Richtung. Außerdem gewährleistet eine Isolatorschicht, dass die Löcher nur vom Steg aus in den Quantenfilm gelangen können. Die Ladungsträgerdichte im Quantenfilm direkt unterhalb des Stegs ist dementsprechend auch wesentlich größer als in den anderen Teilen der Laserdiode. Aufgrund der Kombination dieser beiden Effekte werden wesentlich kleinere Stromstärken benötigt, um den Laser zu betreiben.

In Kapitel 9.7 im Anhang sind die Parameter der Strukturen, welche in dieser Arbeit simuliert werden, dargestellt. Die Resonatorlänge bzw. die Länge des Wellenleiters liegt hier in der Größenordnung von 1 mm und ist in den hier betrachteten Strukturen damit viel größer als die Höhe und Breite der Laserdioden, welche in der Größenordnung von 10 μm liegen.

2.2 Maxwell-Gleichungen

Für eine gegebene Laserdioden-Struktur bleibt die Frage, wie sich das optische Feld in dem Wellenleiter ausbreitet und welche Wellenlängen erlaubt sind. Den Ausgangspunkt hierfür stellen die *Maxwell-Gleichungen* dar, welche in der klassischen Elektrodynamik verwendet werden, um die Dynamik des elektromagnetischen Feldes zu beschreiben. Die Maxwell-Gleichungen lauten im Vakuum [96]

$$\begin{aligned}\text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \text{rot } \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0.\end{aligned}$$

Statt dem *elektrischen Feld* \mathbf{E} und dem *magnetischen Feld* \mathbf{B} können auch das *skalare Potential* ϕ und das *Vektorpotential* \mathbf{A} verwendet werden. Die Maxwell-Gleichungen für die Potentiale lauten

$$\begin{aligned}-\Delta \phi - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} &= \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \text{rot rot } \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu_0 \mathbf{j},\end{aligned}$$

wobei die Felder aus

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \text{rot } \mathbf{A}, \\ \mathbf{E} &= -\nabla \phi - \dot{\mathbf{A}}\end{aligned}$$

berechnet werden können. Während die Felder physikalische Observablen sind, ist es möglich, bei den Potentialen eine Eichung zu wählen, um die Gleichungen für das vorliegende Problem möglichst einfach

zu gestalten. In der Halbleiter-Theorie wird dazu die Coulomb-Eichung benutzt, bei der die Divergenz des Vektorpotentials verschwindet [97]:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0.$$

Damit vereinfachen sich die Maxwell-Gleichungen zu

$$\begin{aligned} \Delta \phi &= -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} - \Delta \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu_0 \mathbf{j}, \end{aligned}$$

dementsprechend gilt selbst im zeitabhängigen Fall immer noch die Poisson-Gleichung für das skalare Potential. Außerdem ist der optische bzw. transversale Anteil des elektrischen Feldes allein im Vektorpotential enthalten [96, 97]:

$$\mathbf{E}_{\text{opt}} = -\dot{\mathbf{A}}.$$

Innerhalb eines Bauteils gelten mit der dielektrischen Funktion $\epsilon(\mathbf{r})$ die makroskopischen Maxwellgleichungen

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) &= \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \text{rot } \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial (\epsilon \mathbf{E})}{\partial t}, \end{aligned}$$

beziehungsweise gilt für die Potentiale

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{A}) &= \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \text{rot rot } \mathbf{A} + \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} + \frac{\epsilon}{c^2} \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu_0 \mathbf{j}. \end{aligned}$$

Daher muss die Coulomb-Eichung entsprechend angepasst werden, sodass die Poisson-Gleichung immer noch gilt. Die generalisierte Coulomb-Eichung lautet [97]

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{A}) = 0.$$

Mit dieser Eichung folgt die modifizierte Poisson-Gleichung

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}.$$

Besitzt die dielektrische Funktion $\epsilon(\mathbf{r})$ nur eine schwache Ortsabhängigkeit, verschwindet näherungsweise die Divergenz des Vektorpotentials wie bei der Coulomb-Eichung im Vakuum. Damit lässt sich wieder eine Wellengleichung für das Vektorpotential herleiten:

$$\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} - \Delta \mathbf{A} + \frac{\epsilon}{c^2} \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \mu_0 \mathbf{j}. \quad (2.1)$$

2.3 Wellenleiter-Theorie

Für die Beschreibung des optischen Feldes in der Lasersimulation ist es sinnvoll, das Feld in Modenfunktionen zu entwickeln. Diese Moden erfüllen näherungsweise die Maxwell-Gleichungen und können schon vor der Lasersimulation für die Struktur der Laserdiode untersucht werden. Das Ziel ist nun, für eine gegebene Struktur die optischen Moden und deren Ausbreitungsgeschwindigkeit im Wellenleiter zu bestimmen. Bei der Simulation der Laserdynamik ist es ausreichend, die Dynamik der Modenkoeffizienten zu betrachten, was die numerische Komplexität stark verringert. Für das Vektorpotential lautet diese Entwicklung

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p \epsilon_0}} \left[B_p \mathbf{u}_p(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_p^*(\mathbf{r}) B_p^* \right]. \quad (2.2)$$

Bei dieser Entwicklung werden die einzelnen Moden mit p nummeriert. Die *Modenfunktionen* $\mathbf{u}_p(\mathbf{r})$ enthalten die Ortsabhängigkeit und die Zeitabhängigkeit ist in den komplexen *Modenkoeffizienten* B_p enthalten. Die Modenkoeffizienten oszillieren mit der *Modenfrequenz* ω_p : $B_p \propto e^{-i\omega_p t}$ [97]. Eine Ableitung von Gl. (2.2) nach der Zeit ergibt das optische elektrische Feld

$$\mathbf{E}_{\text{opt}}(\mathbf{r}) = \sum_p i \sqrt{\frac{\hbar\omega_p}{2\epsilon_0}} \left[B_p \mathbf{u}_p(\mathbf{r}) - \mathbf{u}_p^*(\mathbf{r}) B_p^* \right]. \quad (2.3)$$

Die Modenfunktionen sind bezüglich der dielektrischen Funktion normiert und müssen natürlich die generalisierte Coulomb-Eichung erfüllen:

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{u}_p) = 0, \quad \int d^3 \mathbf{r} \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{u}_p^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_q(\mathbf{r}) = \delta_{pq}. \quad (2.4)$$

Der Vorfaktor in Gl. (2.2) wurde so gewählt, dass das Betragsquadrat der Modenkoeffizienten gerade der Anzahl an Photonen in der Mode entspricht, was für die quantenoptische Behandlung wichtig ist [97]. Nun fehlt noch eine Gleichung zur Bestimmung der Modenfunktionen und der Modenfrequenzen. In den Strukturen, wie sie im Folgenden betrachtet werden, ist die Resonatorlänge viel größer als die Ausmaße der Diode in den Richtungen senkrecht dazu. Für die Modenfunktionen ist es daher sinnvoll, die Ausbreitung in Resonatorrichtung zu separieren. Außerdem werden die zwei möglichen Polarisationsrichtungen getrennt voneinander behandelt. Die Ausbreitungsrichtung wird im Folgenden immer mit y bezeichnet, dementsprechend sind x und z als Polarisationsrichtung möglich. Als transversalelektrische (TE-) Moden werden Moden bezeichnet, deren Polarisationsrichtung parallel zum Quantenfilm ist, dies wäre hier die x -Richtung, siehe Abb. 2.1. In diesem Fall lautet der Ansatz der Modenfunktion:

$$\mathbf{u}_p^{\text{TE}}(\mathbf{r}, \omega) = \left(\mathbf{e}_x u_p^x(x, z, \omega) + \mathbf{e}_y u_p^y(x, z, \omega) \right) e^{ik_p(\omega)y}. \quad (2.5)$$

Die Ortsabhängigkeit in Ausbreitungsrichtung wird als *longitudinale Modenfunktion* bezeichnet und wird hier durch eine Exponentialfunktion beschrieben, es ist aber auch möglich eine Sinus- oder Cosinus-Funktion zu verwenden. Dieser Separationsansatz ist exakt für einen unendlich langen Wellenleiter, in diesem Fall gibt es auch ein kontinuierliches Spektrum an erlaubten Frequenzen. Daher hängt im obigem Ansatz alles von der Frequenz ω ab, und mit p werden alle Moden bezüglich dieser Frequenz nummeriert. In einem endlich langen Wellenleiter sind aufgrund von Randbedingungen nur bestimmte Frequenzen erlaubt, dies wird im nächsten Unterkapitel genauer diskutiert. Die Funktion $u_p^x(x, z, \omega)$ beschreibt die Ortsabhängigkeit senkrecht zur Ausbreitungsrichtung und wird im Folgenden als *transversale Modenfunktion* bezeichnet. Wie in Gl. (2.5) gezeigt, muss diese Mode außerdem auch in Ausbreitungsrichtung polarisiert sein, damit die generalisierte Coulomb-Eichung erfüllt sein kann. Dies wird durch die Funktion $u_p^y(x, z, \omega)$ beschrieben, einsetzen in Gl. (2.4) ergibt

$$\epsilon(x, z, \omega) i k_p(\omega) u_p^y(y, z, \omega) = - \frac{\partial}{\partial x} (\epsilon(x, z, \omega) u_p^x(x, z, \omega)).$$

Für Wellenlängen in der Größenordnung von 100 nm und einer Wellenleiterbreite von mehreren Mikrometern gilt $|\frac{\partial}{\partial x} u_p^x| \ll k_p |u_p^x|$, daher ist im Normalfall die longitudinale Komponente viel kleiner als die transversale Komponente und wird im Folgenden nicht weiter diskutiert.

Ist die Mode in z -Richtung polarisiert, senkrecht zum Quantenfilm, wird von einer transversalmagnetischen (TM-) Mode gesprochen und der Ansatz für die Modenfunktion hat die Form

$$\mathbf{u}_p^{\text{TM}}(\mathbf{r}, \omega) = \left(\mathbf{e}_z u_p^z(x, z, \omega) + \mathbf{e}_y u_p^y(x, z, \omega) \right) e^{ik_p(\omega)y}.$$

Zur Bestimmung der transversalen Modenfunktion und der Wellenzahl $k_p(\omega)$ kann die Wellengleichung aus Gl. (2.1) verwendet werden. Falls die Stromdichte verschwindet und das skalare Potential zeitlich konstant

ist, lautet die Wellengleichung für das Vektorpotential

$$\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} - \Delta \mathbf{A} = 0. \quad (2.6)$$

Diese Gleichung soll von jeder Mode erfüllt werden. Für TE-Moden folgt

$$\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(x, z, \omega) u_p^x(x, z, \omega) - k_p^2(\omega) u_p^x(x, z, \omega) + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_p^x(x, z, \omega) = 0.$$

Wie zuvor schon erwähnt, wurde hierbei angenommen, dass die Modenkoeffizienten mit der Modenfrequenz oszillieren: $B \propto e^{-i\omega t}$. Mit der Vakuumwellenzahl $k_0(\omega) = \omega/c$ und einer effektiven dielektrischen Funktion $\epsilon_{\text{eff},p}(\omega) = k_p^2(\omega)/k_0^2(\omega)$ ergibt sich

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_p^x(x, z, \omega) + k_0^2(\omega) \epsilon(x, z, \omega) u_p^x(x, z, \omega) = k_0^2(\omega) \epsilon_{\text{eff},p}(\omega) u_p^x(x, z, \omega). \quad (2.7)$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung und die Lösung für eine gegebene dielektrische Funktion $\epsilon(x, z, \omega)$ liefert neben den transversalen Modenfunktionen $u_p^x(x, z)$ auch die dazugehörigen effektiven dielektrischen Funktionen $\epsilon_{\text{eff},p}(\omega)$. Die Wurzel der effektiven dielektrischen Funktion wird als *effektiver Brechungsindex* bezeichnet:

$$n_{\text{eff},p}(\omega) = \sqrt{\epsilon_{\text{eff},p}(\omega)}.$$

Dieser effektive Brechungsindex stellt einen Zusammenhang zwischen der Frequenz und dem Wellenvektor $k_p(\omega)$ innerhalb der Diode her:

$$\omega = \frac{c}{n_{\text{eff},p}(\omega)} k_p(\omega).$$

Falls der Brechungsindex nicht von der Polarisationsrichtung abhängt, werden TE-Moden und TM-Moden durch die gleiche Eigenwertgleichung beschrieben. Allerdings müssen an Grenzflächen zwischen verschiedenen Materialien unterschiedliche Grenzbedingungen erfüllt werden. Diese lauten [96]

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1^{\parallel} = \mathbf{E}_2^{\parallel} &\quad \Rightarrow \quad \mathbf{u}_{p,1}^{\parallel} = \mathbf{u}_{p,2}^{\parallel} \\ \epsilon_1 \mathbf{E}_1^{\perp} = \epsilon_2 \mathbf{E}_2^{\perp} &\quad \Rightarrow \quad \epsilon_1 \mathbf{u}_{p,1}^{\perp} = \epsilon_2 \mathbf{u}_{p,2}^{\perp}. \end{aligned}$$

Die Felder und dielektrischen Funktionen auf der einen Seite der Grenzfläche werden mit 1 bezeichnet, und mit 2 die Felder und dielektrischen Funktionen auf der anderen Seite. Die Anteile der Felder parallel zur Grenzfläche werden mit \parallel bezeichnet und die senkrechten Anteile mit \perp .

In Abbildungen 2.2 und 2.4 sind die Lösungen der TE-Eigenwertgleichung für zwei Beispiele gezeigt, einmal für eine grüne Laserdiode mit kleiner Stegbreite und einmal für eine grüne Laserdiode mit etwas größerer Stegbreite. Statt der Frequenz wurde hier zur besseren Veranschaulichung die Vakuum-Wellenlänge $\lambda = 2\pi c/\omega$ verwendet. Die genauen Parameter der Strukturen sind im Anhang in Kapitel 9.7 gegeben. Für die dielektrische Funktion der verschiedenen Nitride wird die Parametrisierung von Goldhahn et. al. [98] verwendet. Diese erlaubt es, die frequenzabhängige dielektrische Funktion für Materialien der Form $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ relativ genau zu bestimmen. Bei kleineren Laserdioden scheinen nur zwei laterale optische Moden für die Lasersimulation relevant zu sein, die Maxima der anderen beiden Moden liegen im Substrat. Bei der breiteren Laserdiode ist zu sehen, dass viel mehr laterale Moden eine Rolle spielen können. Die effektiven Brechungsindizes sind in Abbildungen 2.3 und 2.5 abgebildet und liegen im relevanten Wellenlängenbereich bei ungefähr 2.4, also ähnlich den Brechungsindizes der hier verwendeten Nitride.

2.4 Frequenzabstände der longitudinalen Moden

Die Lösung der Eigenwertgleichung aus dem vorherigen Kapitel ist für jede Frequenz ω möglich, daher bleibt noch die Frage, welche Frequenzen in einer Laserdiode erlaubt sind. Dies hängt zum Beispiel von der Länge der Laserdiode und den Spiegelreflektivitäten ab. Wird zum Beispiel eine stehende Welle angenommen, dass heißt die Modenfunktion verschwindet an den beiden Enden der Laserdiode, muss ein Vielfaches der

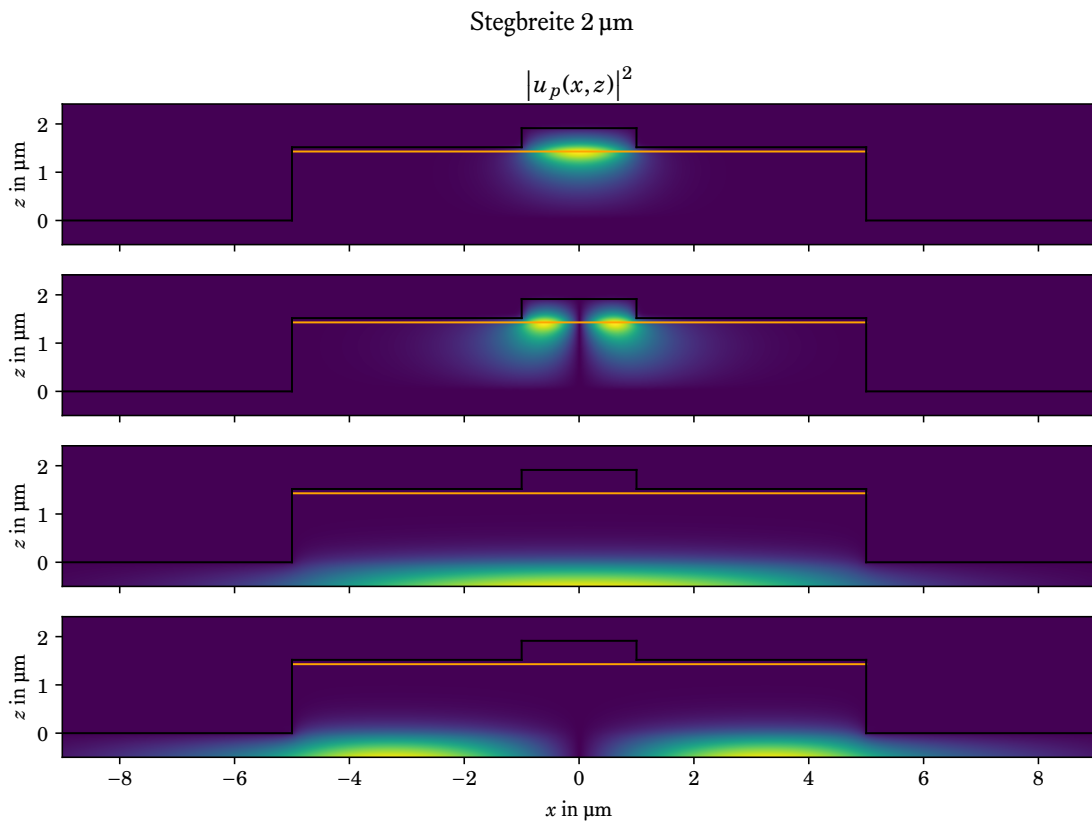


Abbildung 2.2: Lösung der Eigenwertgleichung der optischen Moden für eine Diode mit einer Stegbreite von 2 μm und einer Gesamtbreite von 10 μm . Die Struktur wird in Kapitel 9.7 im Anhang als Struktur A bezeichnet. Hier sind die Betragsquadrate der ersten vier Modenfunktionen für eine Vakuum-Wellenlänge von 527 nm gezeigt. Die orangene Linie in der Mitte der Diode zeigt die Position des Quantenfilms.

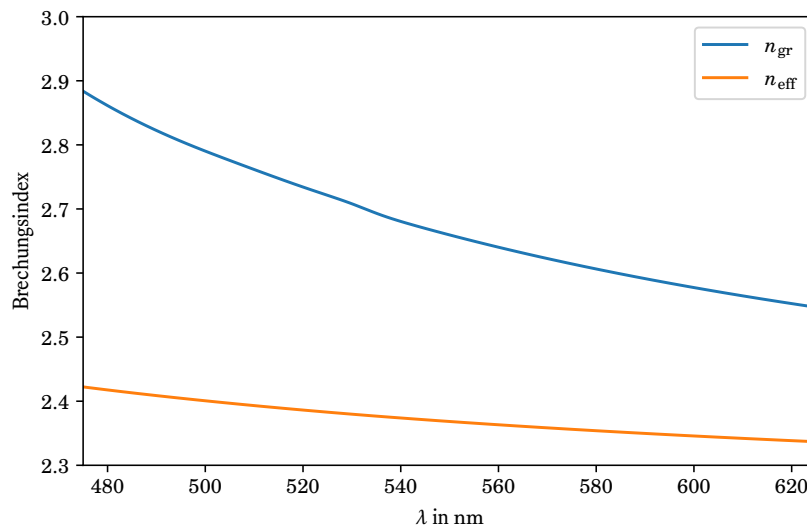


Abbildung 2.3: Für die Mode der niedrigsten Ordnung aus Abb. 2.2 sind hier der frequenzabhängige effektive Brechungsindex sowie der Gruppenbrechungsindex n_{gr} dargestellt. Zur Veranschaulichung wurde anstelle der Frequenz ω die Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ verwendet. Der Gruppenbrechungsindex wurde wie in Gl. (2.9) berechnet.

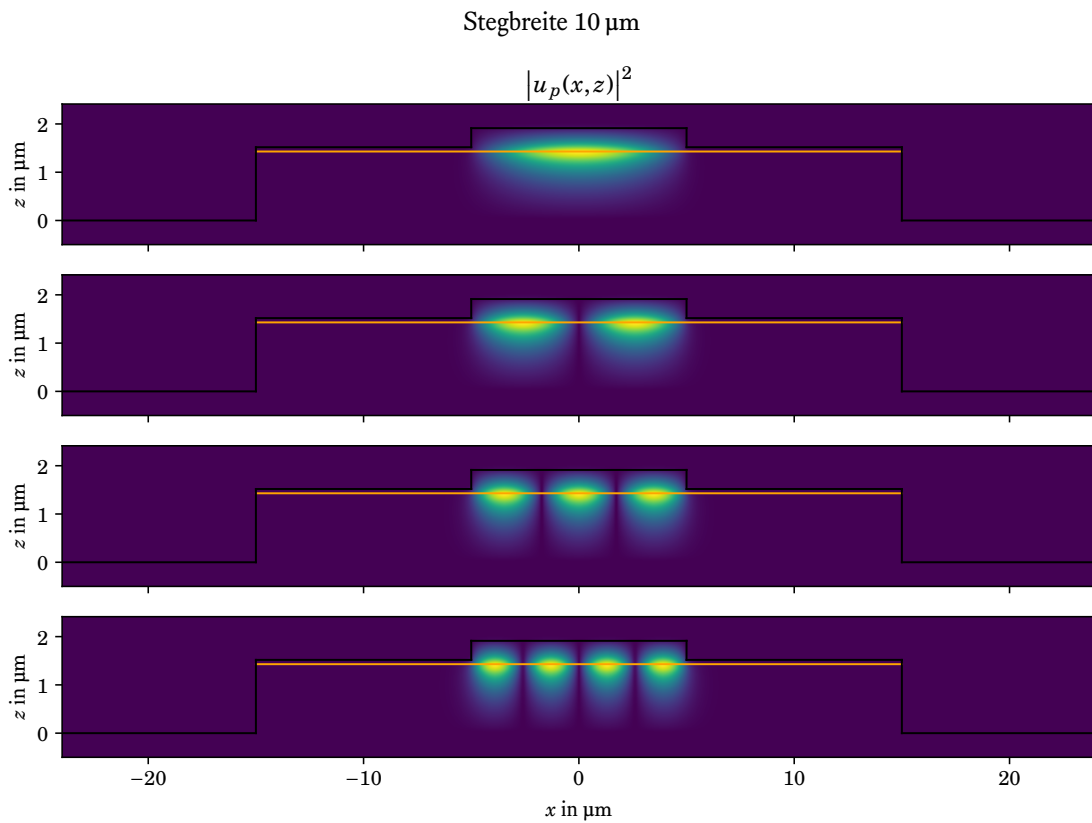


Abbildung 2.4: Lösung der Eigenwertgleichung der optischen Moden für eine Diode mit einer Stegbreite von 10 μm und einer Gesamtbreite von 30 μm . Die Struktur wird in Kapitel 9.7 im Anhang als Struktur C bezeichnet. Hier sind die Betragsquadrate der ersten vier Modenfunktionen für eine Vakuum-Wellenlänge von 527 nm gezeigt. Die orangene Linie in der Mitte der Diode zeigt die Position des Quantenfilms.

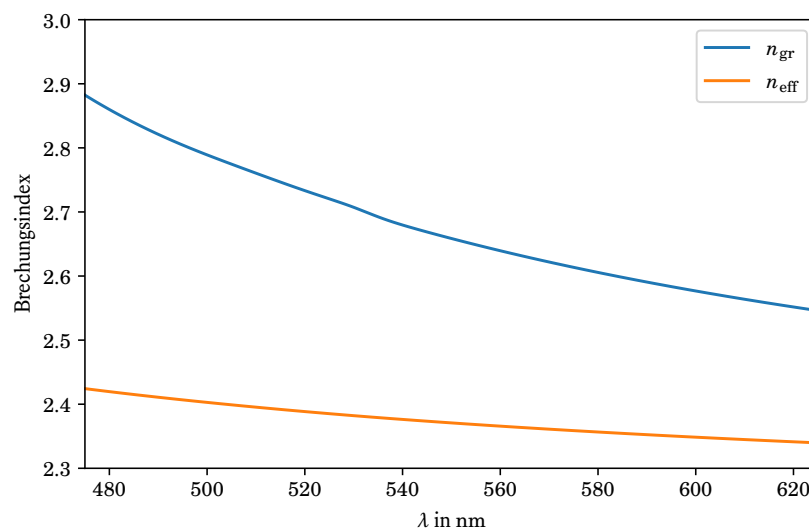


Abbildung 2.5: Für die Mode der niedrigsten Ordnung aus Abb. 2.4 sind hier der frequenzabhängige effektive Brechungsindex sowie der Gruppenbrechungsindex n_{gr} dargestellt. Zur Veranschaulichung wurde anstelle der Frequenz ω die Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ verwendet. Der Gruppenbrechungsindex wurde wie in Gl. (2.9) berechnet.

Wellenlänge der Mode im Medium gerade $2L$ ergeben, wobei L die Resonatorlänge ist. Für die Wellenzahl bedeutet dies

$$2L = n\lambda_p(\omega_n) = \frac{2\pi n}{k_p(\omega_n)} \quad \Rightarrow \quad k_p(\omega_n) = \frac{\pi}{L}n.$$

In der folgenden Betrachtung soll nur eine transversale Mode mit Index p behandelt werden, daher wird der Index p im folgenden weggelassen. Die Betrachtungen sind aber für jede transversale Mode gleich. Die Frequenzen der verschiedenen longitudinalen Moden werden mit n indiziert und die erlaubten Frequenzen lauten

$$\omega_n = \frac{c}{n_{\text{eff}}(\omega_n)}k(\omega_n) = n\frac{\pi c}{Ln_{\text{eff}}(\omega_n)}.$$

Da der effektive Brechungsindex auch von der Frequenz abhängt, muss hier dementsprechend eine nichtlineare Gleichung gelöst werden. Der Frequenzabstand zwischen zwei benachbarten Moden ist

$$\begin{aligned} \Delta\omega_n = \omega_{n+1} - \omega_n &= (n+1)\frac{\pi c}{Ln_{\text{eff}}(\omega_{n+1})} - n\frac{\pi c}{Ln_{\text{eff}}(\omega_n)} \\ &= n\frac{\pi c}{L}\left(\frac{1}{n_{\text{eff}}(\omega_{n+1})} - \frac{1}{n_{\text{eff}}(\omega_n)}\right) + \frac{\pi c}{Ln_{\text{eff}}(\omega_{n+1})}. \end{aligned}$$

Falls sich der effektive Brechungsindex nicht sehr stark ändert, liefert eine Taylor-Entwicklung

$$\frac{1}{n_{\text{eff}}(\omega_{n+1})} - \frac{1}{n_{\text{eff}}(\omega_n)} \approx -\Delta\omega_n \frac{\frac{\partial n_{\text{eff}}(\omega_n)}{\partial \omega_n}}{n_{\text{eff}}^2(\omega_n)}.$$

Der Frequenzabstand lautet

$$\Delta\omega_n \approx -n\frac{\pi c}{L}\Delta\omega_n \frac{\frac{\partial n_{\text{eff}}(\omega_n)}{\partial \omega_n}}{n_{\text{eff}}^2(\omega_n)} + \frac{\pi c}{Ln_{\text{eff}}(\omega_{n+1})} \quad \Delta\omega_n \ll \omega_n \quad -\omega_n \Delta\omega_n \frac{\frac{\partial n_{\text{eff}}(\omega_n)}{\partial \omega_n}}{n_{\text{eff}}(\omega_n)} + \frac{\pi c}{Ln_{\text{eff}}(\omega_n)}$$

$$\Rightarrow \Delta\omega_n = \frac{\pi c}{L} \frac{1}{n_{\text{eff}}(\omega_n) + \omega_n \frac{\partial n_{\text{eff}}(\omega_n)}{\partial \omega_n}} = \frac{\pi c}{Ln_{\text{gr}}(\omega_n)}. \quad (2.8)$$

Der Frequenzabstand wird dementsprechend durch den Gruppenbrechungsindex n_{gr} bestimmt, welcher durch

$$n_{\text{gr}}(\omega) = c \frac{\partial k}{\partial \omega} = \frac{\partial}{\partial \omega}(n_{\text{eff}}(\omega)) = n_{\text{eff}}(\omega) + \omega \frac{\partial n_{\text{eff}}(\omega)}{\partial \omega} \quad (2.9)$$

definiert ist. Wie zuvor schon erwähnt, funktioniert diese Formel für den Frequenzabstand nur, falls der effektive Brechungsindex schwach von der Frequenz abhängt. Außerdem muss die Resonatorlänge der Laserdiode groß genug sein, damit der Frequenzabstand klein genug ist. Dementsprechend müssten bei Laserdioden mit sehr kleinen Resonatorlängen gegebenenfalls höhere Ableitungen berücksichtigt werden. In diesem Fall muss aber auch die Separierbarkeit der Moden in transversale und longitudinale Anteile hinterfragt werden.

Der Frequenzabstand hängt außerdem mit der Zeit T zusammen, die ein Wellenpaket benötigt, um die Resonatorlänge zweimal zurückzulegen: $T = 2L/v_{\text{gr}} = 2Ln_{\text{gr}}/c = 2\pi/\Delta\omega$. Diese Zeit ist unabhängig von der genauen Form der Moden und es ist daher anzunehmen, dass die obige Gleichung für den Frequenzabstand auch gilt, wenn die Modenfunktionen nicht durch stehende Wellen beschrieben werden. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn sich die Reflektivitäten der Spiegel an den beiden Enden des Resonators stark von 1 unterscheiden. Zur Untersuchung dieser Probleme eignet sich die Traveling-Wave-Methode, welche in Kapitel 7 näher diskutiert wird.

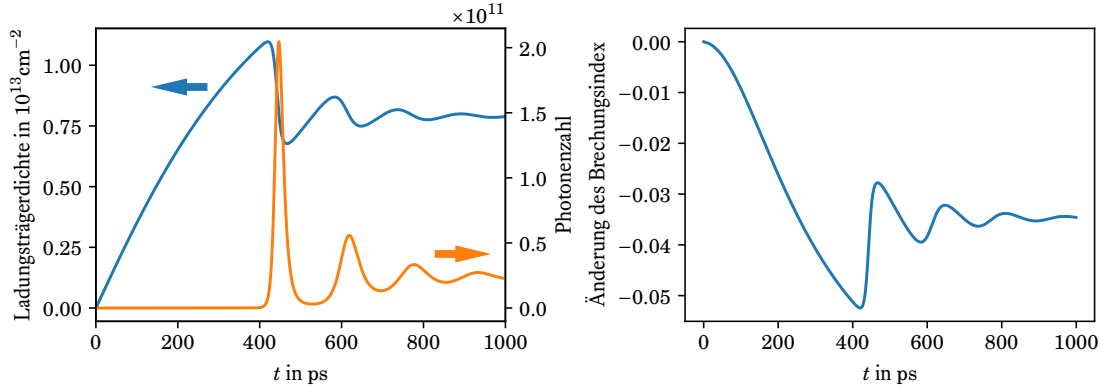


Abbildung 2.6: Beispiel für eine Laser-Simulation mit der Methode und den Parametern aus Kapitel 4.9 und einer Stromstärke von 100 mA. (Links) Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichte im Quantenfilm und der Zahl der Photonen in der Laserdiode. (Rechts) Zeitliche Änderung des Brechungsindex.

2.5 Effektive eindimensionale Gleichung

In den Lasersimulationen ändert sich die Ladungsträgerdichte in den Quantenfilmen und natürlich auch der entsprechende Brechungsindex, ein Beispiel dafür ist in Abb. 2.6 dargestellt. Hier ist zu sehen, wie vor allem beim Anschalt-Vorgang des Lasers sich die Ladungsträgerdichte stark ändert und damit auch der Brechungsindex. Daher müssten bei einer Lasersimulation die Modenfunktionen jedesmal neu berechnet werden, wenn sich die Ladungsträgerdichte ändert. Da dies natürlich sehr aufwendig ist, wird dieser Effekt im folgenden entweder nicht oder nur näherungsweise berücksichtigt. Eine Möglichkeit für eine solche Näherung ist die Lösung einer effektiven eindimensionalen Eigenwertgleichung [99]. Diese effektive Eigenwertgleichung folgt zum Beispiel aus der zweidimensionalen Eigenwertgleichung in Gl. (2.7) unter Vernachlässigung der z -Abhängigkeit:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{u}_p^x(x) + k_0^2 \epsilon_{1D}(x) \tilde{u}_p^x(x) = k_0^2 \epsilon_{\text{eff},p} \tilde{u}_p^x(x).$$

Die Funktion $\epsilon_{1D}(x) = \epsilon_0(x) + \delta\epsilon(x)$ bezeichnet hier eine effektive dielektrische Funktion, welche sich aus zwei Anteilen zusammensetzt. Der eine Anteil, $\epsilon_0(x)$, ist zeitunabhängig und hängt nur von der Struktur ab. Der andere Anteil, $\delta\epsilon(x)$, enthält die Änderungen $\delta\epsilon_{\text{QW}}(x, z)$ der dielektrischen Funktion in den Quantenfilmen. Sind diese Änderung klein, liefert die Störungstheorie

$$\delta\epsilon(x) = \int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2 \delta\epsilon_{\text{QW}}(x, z),$$

hier ausgewertet mit der Modenfunktion der niedrigsten Ordnung aus einer Referenzrechnung, bei der die zweidimensionale Eigenwertgleichung gelöst wurde. Die Änderung der dielektrischen Funktion ist nur im Quantenfilm ungleich 0, daher ergibt das Integral

$$\delta\epsilon(x) \approx \delta\epsilon_{\text{QW}}(x) \int_{\text{QW}} dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2 = \delta\epsilon_{\text{QW}}(x) \Gamma(x).$$

Der x -abhängige Confinement-Faktor $\Gamma(x)$ wird hierbei oft durch das Integral

$$\Gamma(x) \approx \int_{\text{QW}} dx dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2$$

angenähert. Bei der Referenzrechnung wird das Problem für eine bestimmte Referenzladungsträgerdichte $n_{\text{ref}}(x)$ gelöst, die Änderung der dielektrischen Funktion lautet

$$\delta\epsilon_{\text{QW}}(x) = \epsilon_{\text{QW}}(n(x)) - \epsilon_{\text{QW}}(n_{\text{ref}}(x))$$

Die Abhängigkeit der dielektrischen Funktion von der Ladungsträgerdichte $n(x)$ wird im nächsten Kapitel genauer diskutiert. Nun bleibt noch die Wahl des zeitunabhängigen Anteils $\epsilon_0(x)$. Eine erste Möglichkeit

	n_{eff}	n_{gr}
2D Moden-Solver	2.382	2.716
Mittelung mit Gauss-Funktion	2.384	2.750
Mittelung über gesamten Bereich	2.385	2.745
1D Eigenwertgleichung	2.702	3.453

Tabelle 2.1: Vergleich der Brechungsindizes mit dem Ergebnis des 2D-Moden-Solvers

ist die Mittelung der dielektrischen Funktion für jede x -Koordinate mit der 2D-Modenfunktion aus der Referenzrechnung in z -Richtung:

$$\epsilon_0(x) = \frac{\int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2 \epsilon(x, z)}{\int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2}.$$

In der numerischen Implementierung ist die Diskretisierung die 1D-Modenfunktion im allgemeinen Fall unabhängig von der Diskretisierung der 2D-Modenfunktion. Das obige Ergebnis wird daher mit einer Gauss-Funktion in x -Richtung gefaltet um eine glatte Funktion für jede mögliche x -Koordinate zu erhalten:

$$\epsilon_0(x) = \int dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_x^2}} \frac{\int dz |\mathbf{u}_0(x', z)|^2 \epsilon(x', z)}{\int dz |\mathbf{u}_0(x', z)|^2}.$$

Eine andere einfachere Möglichkeit ist die Mittelung über bestimmte Bereiche, zum Beispiel bis zur Stegbreite w_{Steg} :

$$\epsilon_{\text{Steg}} = \frac{\int_0^{w_{\text{Steg}}/2} dx \int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2 \epsilon(x, z)}{\int_0^{w_{\text{Steg}}/2} dx \int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2},$$

$$\epsilon_{\text{Rest}} = \frac{\int_{w_{\text{Steg}}/2}^{w_{\text{Diode}}/2} dx \int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2 \epsilon(x, z)}{\int_{w_{\text{Steg}}/2}^{w_{\text{Diode}}/2} dx \int dz |\mathbf{u}_0(x, z)|^2},$$

$$\epsilon_0(x) = \begin{cases} \epsilon_{\text{Steg}} & \text{für } |x| \leq \frac{w_{\text{Steg}}}{2} \\ \epsilon_{\text{Rest}} & \text{für } \frac{w_{\text{Steg}}}{2} < |x| \leq \frac{w_{\text{Diode}}}{2} \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Hierbei wurde angenommen, dass die Struktur-Laserdiode in x -Richtung eine Spiegel-Symmetrie aufweist. Die dritte Möglichkeit ist ein Lösung einer eindimensionalen Eigenwertgleichung in z -Richtung für jeden x -Wert:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} g(z) + k_0^2 \epsilon(x, z) g(z) = k_0^2 \epsilon_0(x) g(z). \quad (2.10)$$

In Abbildungen 2.7 bis 2.9 und Tabelle 2.1 werden die verschiedenen Möglichkeiten für das Beispiel aus dem vorherigen Kapitel verglichen. Die ersten beiden Methoden liefern eine gute Übereinstimmung mit dem effektiven Brechungsindex und dem Gruppenbrechungsindex der Referenzrechnung, während die letzte Methode ein stark abweichendes Ergebnis liefert. Dies liegt wohl daran, dass bei der letzteren Methode der effektive Brechungsindex vor allem durch der Quantenfilm bestimmt wird und damit viel zu hoch ausfällt, ein Beispiel für die Lösung für eine Lösung der Eigenwertgleichung in z -Richtung ist in Abb. 2.9 gezeigt. Die eindimensionalen Eigenfunktionen der verschiedenen Methoden sind in Abb. 2.8 dargestellt. Hier ist gut zu sehen, dass die Modenfunktionen in allen Fällen gut mit der Lösung der zweidimensionalen Eigenwertgleichung übereinstimmen.

Für die Kopplung der Quantenfilme mit den optischen Moden ist vor allem die Modenfunktion am Ort des Quantenfilms wichtig. Diese folgt durch Multiplikation der eindimensionalen Lösung mit einem Faktor:

$$u_p^x(x, z_{\text{QW}}) = C \tilde{u}_p^x(x),$$

wobei der Vorfaktor C entsprechend gewählt werden muss. In Abb. 2.8 wurde zum Vergleich der Vorfaktor so gewählt, dass die Funktionen bei $x = 0$ übereinstimmen. In den Rechnungen in den folgenden Kapiteln wird dieser Faktor aber so gewählt, dass gilt:

$$\int_{\text{QW}} dx dz \left| u_p^x(x, z) \right|^2 = C^2 d_{\text{QW}} \int_{\text{QW}} dx \left| \tilde{u}_p^x(x) \right|^2.$$

2.6 Hamilton-Operator

Um quantenmechanische Effekte wie spontane Emission zu berücksichtigen, müssen die Vektorfelder \mathbf{A} und \mathbf{E} durch Operatoren ersetzt werden. Dementsprechend werden aus den komplexen Koeffizienten B_p in Gleichungen (2.2) und (2.3) nun auch Operatoren, welche den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Photonen der jeweiligen Moden entsprechen. Die Operatoren der Vektorfelder lauten

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) &= \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p \epsilon_0}} \left[\hat{B}_p \mathbf{u}_p(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_p^*(\mathbf{r}) \hat{B}_p^\dagger \right], \\ \hat{\mathbf{E}}_{\text{opt}}(\mathbf{r}) &= \sum_p i \sqrt{\frac{\hbar \omega_p}{2\epsilon_0}} \left[\hat{B}_p \mathbf{u}_p(\mathbf{r}) - \mathbf{u}_p^*(\mathbf{r}) \hat{B}_p^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Der Hamilton-Operator für freie Photonen lautet [97]

$$\hat{H}_{\text{ph}}^0 = \sum_p \hbar \omega_p \left[\hat{B}_p^\dagger \hat{B}_p + \frac{1}{2} \right]. \quad (2.12)$$

und entspricht dem eines harmonischen Oszillators für jede Mode. Die Vorfaktoren in Gl. (2.11) wurden hier so gewählt, dass der Operator der Photonenzahl durch

$$\hat{S}_p = \hat{B}_p^\dagger \hat{B}_p$$

gegeben ist.

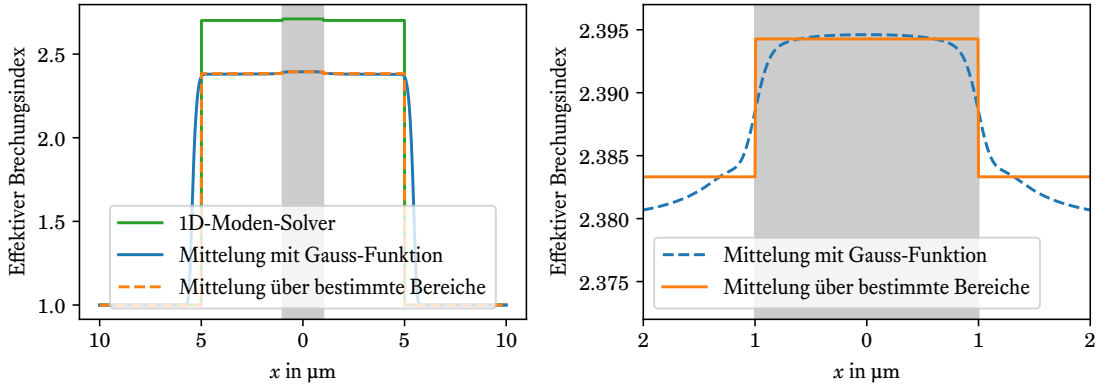


Abbildung 2.7: Vergleich der Methoden zur Bestimmung des effektiven Brechungsindex für die Diode aus Abb. 2.2. Hier ist die Ortsabhängigkeit des effektiven Brechungsindex dargestellt. Der graue Bereich zeigt die Position des Steps an.

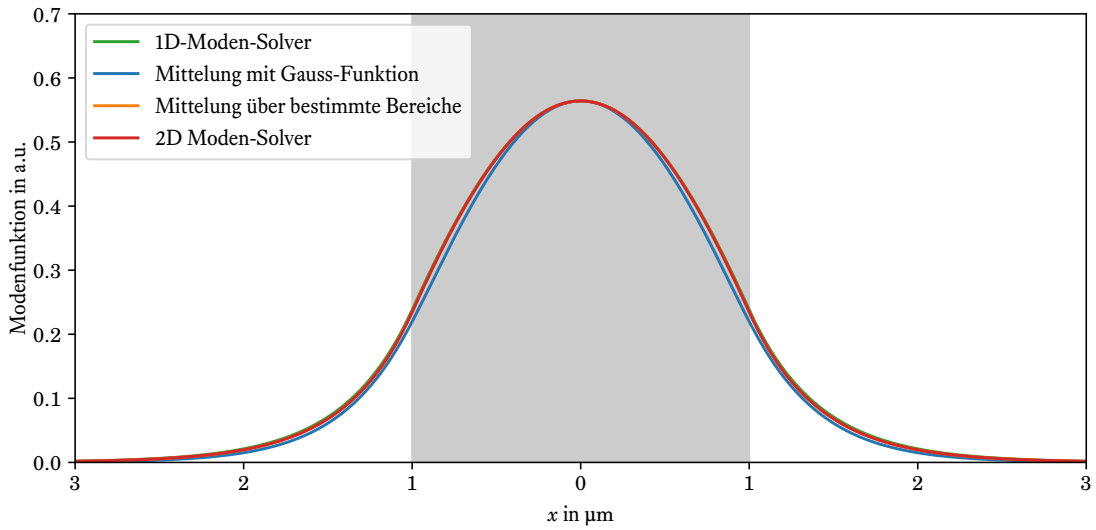


Abbildung 2.8: Vergleich der 1D-Modenfunktionen der verschiedenen Näherungen mit dem Ergebnis des 2D-Moden-Solvers

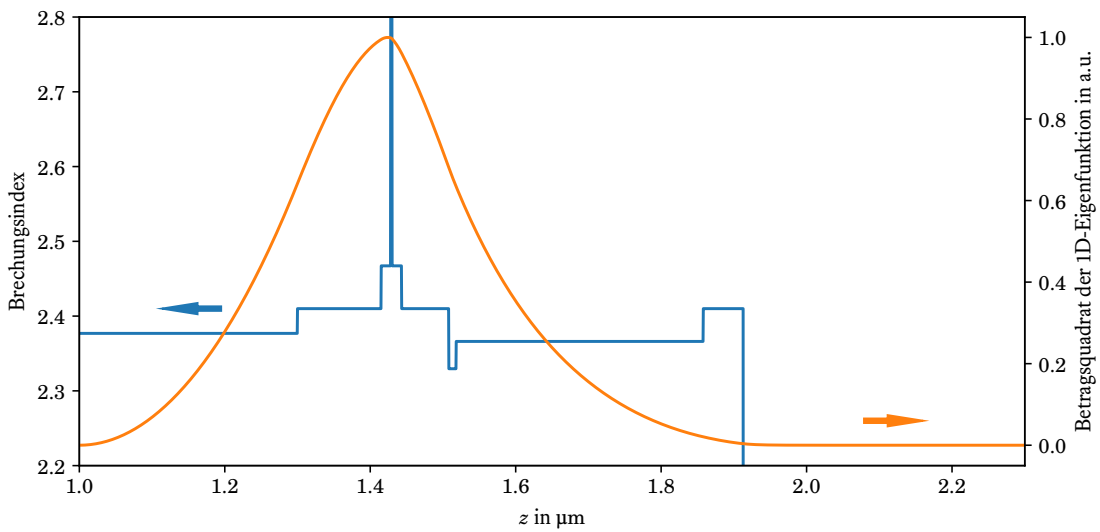


Abbildung 2.9: Beispiel der Lösung der Eigenwertgleichung in z-Richtung für $x = 0$, siehe Gl. (2.10)

Kapitel 3

Beschreibung der Quantenfilme

Bei einer Laserdiode werden die meisten Photonen durch stimulierte Emission der Ladungsträger in den Quantenfilmen erzeugt. Um die Dynamik des optischen Feldes richtig zu beschreiben, ist es daher wichtig, auch die Dynamik dieser Ladungsträger mit einzubeziehen. Dazu wird ein Hamilton-Operator benötigt, welcher auch die Wechselwirkung von Ladungsträgern und optischem Feld enthält. Dieser Hamilton-Operator wird in der zweiten Quantisierung aufgestellt, für eine detaillierte Beschreibung siehe zum Beispiel Ref. [97]. Eine wichtige Größe in der Dynamik der Ladungsträger sind die Besetzungsfunktionen, welche den Erwartungswert der Besetzung eines Zustandes angeben. Mithilfe des Hamilton-Operators und den Heisenberg-Bewegungsgleichungen kann die zeitliche Entwicklung dieser Besetzungsfunktionen und anderer Größen bestimmt werden.

Bei Halbleitern werden die entsprechenden Bewegungsgleichungen Halbleiter-Bloch-Gleichungen genannt, welche hier auch für den ortsabhängigen Fall kurz hergeleitet werden sollen, siehe hierzu auch Ref. [64]. Um die Halbleiter-Bloch-Gleichungen zu verwenden, werden die Bandstruktur in der Nähe der Bandlücke des Quantenfilms und entsprechende optische Matrixelemente benötigt. Eine Möglichkeit ist die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode, welche im Folgenden für Nitride auch kurz vorgestellt wird. Ein Vorteil der Halbleiter-Bloch-Gleichungen liegt auch darin, dass Vielteilcheneffekte wie Coulomb-Streuung berücksichtigt werden können. Diese Streueffekte können einen großen Einfluss auf die optischen Eigenschaften haben, deswegen werden im Anschluss kurz die Coulomb-Streuung und die Elektronen-Phonon-Streuung beschrieben. Eine weitere Schwierigkeit liegt in der Berücksichtigung der spontanen Emission, welche beim Anschalten der Laserdiode eine wichtige Rolle spielt. Eine genaue Beschreibung dieses Effekts benötigt eine aufwendige quantenoptische Beschreibung, daher wird am Ende dieses Kapitels eine mögliche Näherung hierfür diskutiert.

3.1 Hamilton-Operator

Der gesamte Hamilton-Operator des Systems kann zunächst als eine Summe von drei Termen geschrieben werden [97]:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{V} + \hat{H}_{\text{ph}}^0. \quad (3.1)$$

Der Term \hat{H}_e enthält die elektronischen Anteile ohne Coulomb-Wechselwirkung:

$$\hat{H}_e = \int d^3 \mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}))^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

hierbei bezeichnen $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ und $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ die Elektronen-Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die Elektronen koppeln über den Operator des Vektorpotentials $\hat{\mathbf{A}}$ mit dem optischen Feld. Der Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ hat im Ortsraum die übliche Form $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ und das gitterperiodische Potential $U(\mathbf{r})$ liefert die Bandstruktur.

Der mit \hat{V} bezeichnete Term enthält die Coulomb-Wechselwirkung:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_b} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}),$$

die Konstante ϵ_b enthält alle statischen Beiträge zur dielektrischen Funktion und sorgt für eine Verringerung der Coulomb-Wechselwirkung im Material. Die Abschirmung der freien Ladungsträger im Halbleiter ist stark frequenzabhängig und hier noch nicht enthalten.

Der dritte Term \hat{H}_{ph}^0 ist der freie Hamilton-Operator des elektromagnetischen Feldes aus Gl. (2.12). Für die Laserdynamik sind nur optische Übergänge zwischen Leitungsband und Valenzband relevant, dazu ist es zweckmäßig, das Quadrat in Gl. (3.2) auszuführen:

$$\begin{aligned}\hat{H}_e &= \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2 + e^2 \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) + e \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) + e \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2m_0} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) + \frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{2m_0} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})] \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}).\end{aligned}$$

Der $\hat{\mathbf{A}}^2$ -Term enthält den Impuls-Operator nicht und deswegen vor allem wichtig für Übergänge innerhalb eines Bandes. Im Folgenden wird dieser Term daher ignoriert. Des Weiteren gibt es noch einen Term der Form $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})] \propto \nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$. Dieser verschwindet in Coulomb-Eichung und ist in der generalisierten Coulomb-Eichung immer noch hinreichend klein. Daher lautet das Ergebnis:

$$\hat{H}_e \approx \underbrace{\int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r})}_{\hat{H}_e^0} + \underbrace{\int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r})}_{\hat{H}_{e\text{-ph}}}$$

Der elektronische Hamilton-Operator wurde nochmal aufgespalten in einen freien elektronischen Anteil \hat{H}_e^0 und einen Term $\hat{H}_{e\text{-ph}}$, welcher die Wechselwirkung der Elektronen mit dem optischen Feld beschreibt. Da nur die Zustände in der Nähe der Bandlücke berücksichtigt werden sollen, ist es zweckmäßig, die Feldoperatoren zunächst in einer geeigneten vollständigen Basis zu entwickeln:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha} \phi_{\alpha}(\mathbf{r}), \quad \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}).$$

Die Zustände ϕ_{α} sind orthonormal und die Operatoren $\hat{a}_{\alpha}^{\dagger}$ und \hat{a}_{α} sind die dazugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Als Basis werden die Eigenfunktionen des freien elektronischen Hamilton-Operators \hat{H}_e^0 benutzt, dieser hat die Form

$$\hat{H}_e^0 = \sum_{\lambda \mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} \hat{a}_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda \mathbf{k}},$$

hierbei bezeichnet λ den Bandindex und \mathbf{k} ist ein Wellenvektor aus der ersten Brillouin-Zone. Im Bulk-Material sind diese Eigenfunktionen die Blochwellen:

$$\phi_{\lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sqrt{\frac{1}{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}.$$

Dabei sind die $u_{\lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ die gitterperiodischen Blochfunktionen. Im Quantenfilm haben die Eigenfunktionen die Form

$$\phi_{\lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sqrt{\frac{1}{A}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \xi_{\lambda}(z). \quad (3.3)$$

Der Wellenvektor \mathbf{k} ist zweidimensional und in z -Richtung hängt die Wellenfunktion von der Einhüllenden $\xi_{\lambda}(z)$ ab.

In dieser Basis lautet der Elektron-Photon-Wechselwirkungsterm

$$\begin{aligned}\hat{H}_{e\text{-ph}} &= \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\lambda \lambda'} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \hat{a}_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda' \mathbf{k}'} \frac{1}{A} \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \xi_{\lambda}^*(z) \frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \xi_{\lambda'}(z) u_{\lambda \mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) [\hbar \mathbf{k}' + \hat{\mathbf{p}}] u_{\lambda' \mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &\approx \sum_{\lambda \lambda'} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \hat{a}_{\lambda \mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda' \mathbf{k}'} \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_{\parallel}} \xi_{\lambda}^*(Z) \frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{R}) \xi_{\lambda'}(Z) \int_{\Omega_{\text{EZ}}} d^3\mathbf{r} u_{\lambda \mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) [\hbar \mathbf{k}' + \hat{\mathbf{p}}] u_{\lambda' \mathbf{k}'}(\mathbf{r}).\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde das Integral über das ganze Volumen des Halbleiters aufgeteilt in Integrale über die Einheitszelle an jedem Gitterpunkt \mathbf{R} . Dabei wurde angenommen, dass das Feld und die Einhüllenden konstant über die Ausdehnung der Einheitszelle sind. Unter der Annahme, dass die Blochfunktionen nur schwach von \mathbf{k} abhängen und daher durch Blochfunktionen am Γ -Punkt ersetzt werden können, hat der Wechselwirkungsterm die einfache Form

$$\hat{H}_{\text{e-ph}} \approx \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} \frac{e\hat{\mathbf{p}}^{\lambda\lambda'}}{m_0},$$

dabei bezeichnen $\mathbf{p}_{\lambda\lambda'}$ die entsprechenden Impuls-Matrixelemente der Blochfunktionen

$$\mathbf{p}_{\lambda\lambda'} = \frac{-i\hbar}{\Omega_{\text{EZ}}} \int_{\Omega_{\text{EZ}}} d^3\mathbf{r} u_{\lambda 0}^*(\mathbf{r}) \nabla u_{\lambda' 0}(\mathbf{r}),$$

welche für $\lambda = \lambda'$ verschwinden [97]. Das optische Feld geht über den Term $\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}$ ein, was einer zweidimensionalen Fourier-Transformation über den Quantenfilm entspricht:

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'} = \frac{1}{A} \int d^2\mathbf{r}_{\parallel} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \int dz \xi_{\lambda}^*(z) \xi_{\lambda'}(z) \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{A} \int d^2\mathbf{r}_{\parallel} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \hat{\mathbf{A}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel})$$

Hierbei wird zunächst das Feld mit den Einhüllenden in z -Richtung integriert. Ist das Feld konstant über die Ausdehnung des Quantenfilms, ergibt diese Integration $\hat{\mathbf{A}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) = S_{\lambda\lambda'} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})$. Der Beitrag ist also proportional zum Überlapp

$$S_{\lambda\lambda'} = \int dz \xi_{\lambda}^*(z) \xi_{\lambda'}(z)$$

der Einhüllenden, was physikalisch sinnvoll erscheint. Um die Gleichungen zu vereinfachen, wird außerdem angenommen, dass sich auch die Polarisationsrichtung über die Ausdehnung des Quantenfilms nicht ändert: $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \hat{A}(\mathbf{r}) \mathbf{e}_p$. Die Impuls-Matrixelemente werden ersetzt durch das Skalarprodukt mit der Polarisationsrichtung multipliziert mit dem Überlapp:

$$p_{\lambda\lambda'} = S_{\lambda\lambda'} \mathbf{p}_{\lambda\lambda'} \cdot \mathbf{e}_p \quad (3.4)$$

Der Wechselwirkungsterm hat nun die Form

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{e-ph}} &\approx \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \frac{e p_{\lambda\lambda'}}{m_0} \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \frac{e p_{\lambda\lambda'}}{m_0} \cdot \frac{1}{A} \int d^2\mathbf{r}_{\parallel} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \hat{A}(\mathbf{r}_{\parallel}), \end{aligned} \quad (3.5)$$

hierbei ist $\hat{A}(\mathbf{r}_{\parallel}) = \hat{A}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})$.

Analog ergibt das Einsetzen der Basis in den Operator der Coulomb-Wechselwirkung

$$\hat{V} = \frac{1}{2A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\lambda\lambda'} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\mathbf{q}}.$$

Dabei wurde wie oben angenommen, dass die Einhüllenden konstant über die Ausdehnung der Einheitszelle sind. Die Matrixelemente $V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'}$ haben die folgende Form

$$V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_b q} \underbrace{\int dz' \int dz |\xi_{\lambda}(z)|^2 |\xi_{\lambda'}(z')|^2 e^{-|q(z-z')|}}_{F_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'}} \quad (3.6)$$

Sie bestehen also aus der Wechselwirkung in zwei Dimensionen $V_{\mathbf{q}}^{2D}$ und einem Formfaktor $F_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'}$, welcher immer zwischen 0 und 1 liegt.

3.2 Besetzungsfunktionen und Ladungsträgerdichte

Des Zustand eines quantenmechanischen Systems wird im Allgemeinen durch die Wellenfunktion oder durch die Dichtematrix beschrieben. Die Zeitentwicklung dieser Größen ist durch den Hamilton-Operator bestimmt, allerdings ist die Anzahl der Teilchen in einer Laserdiode viel zu hoch, um diese Größen direkt berechnen zu können. Allerdings ist bei der Simulation einer Laserdiode der genaue Zustand des Systems nicht von Interesse, sondern nur die Erwartungswerte bestimmter Operatoren. Beispiele hierfür wären die Anzahl der Ladungsträger im Quantenfilm oder die Anzahl der Photonen im Wellenleiter. In der zweiten Quantisierung wird der Erwartungswert eines Einteilchen-Operators folgendermaßen berechnet:

$$\hat{A} = \sum_{ij} A_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad \Rightarrow \quad A = \langle \hat{A} \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \rho_{ji}(t).$$

Ist also die *Einteilchen-Dichtematrix* $\rho_{ij}(t)$ bekannt, kann der Erwartungswert von jedem Einteilchen-Operator zu jedem Zeitpunkt bestimmt werden. Auf der Diagonalen der Einteilchendichtematrix stehen die *mittleren Besetzungen* der Zustände $f_i = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle$, welche für Fermionen immer zwischen 0 und 1 liegen. Im thermodynamischen Gleichgewicht werden die Besetzungen durch die *Fermi-Dirac-Verteilung* beschrieben:

$$f_i = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} \quad (3.7)$$

Hierbei ist $\beta = 1/(k_B T)$ die *inverse Temperatur* und μ ist das *chemische Potential*. Die Nichtdiagonalelemente der Einteilchen-Dichtematrix enthalten die *mikroskopischen Polarisationen* $\psi_{ij} = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$, welche zu Übergängen zwischen Zuständen i und j führen können. Für einen Quantenfilm hat die Einteilchen-Dichtematrix die Form

$$\rho_{\lambda\mathbf{k},\lambda'\mathbf{k}'} = \langle \hat{\rho}_{\lambda\mathbf{k},\lambda'\mathbf{k}'} \rangle = \langle \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} \rangle,$$

hierbei bezeichnet $\hat{\rho}_{\lambda\mathbf{k},\lambda'\mathbf{k}'}$ den dazugehörigen Operator. Matricelemente mit $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ beschreiben eine Ortsabhängigkeit der Besetzungen bzw. der mikroskopischen Polarisation. Dies wird durch eine Fourier-Transformation deutlich gemacht:

$$\rho_{\lambda\lambda'\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\parallel}} \rho_{\lambda\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\lambda'\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\parallel}} \langle \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(t) \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(t) \rangle.$$

Die Elemente mit $\lambda = \lambda'$ sind die ortsabhängigen Besetzungen und entsprechend die Elemente mit $\lambda \neq \lambda'$ die ortsabhängigen Polarisationen:

$$f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) = \langle \hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) \rangle = \rho_{\lambda\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\parallel}} \langle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(t) \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(t) \rangle,$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) = \langle \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) \rangle = \rho_{\lambda'\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}, t) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\parallel}} \langle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(t) \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(t) \rangle,$$

mit den dazugehörigen Operatoren $\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ und $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}$. Diese Ortsabhängigkeit ist normalerweise schwach, das heißt nur Beiträge mit kleinen \mathbf{q} spielen eine Rolle. Verschwinden alle Matricelemente mit $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$, hängen wie erwartet Besetzungen $f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}, t)$ und mikroskopische Polarisationen $\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}, t)$ nicht vom Ort ab.

In einer Laserdiode gibt es verschiedene Streu-Prozesse wie beispielsweise die Coulomb-Streuung und die Streuung von Elektronen mit Phononen, welche dafür sorgen, dass sich ein thermodynamische Gleichgewicht einstellt. Diese Streuprozesse wirken auf sehr kleinen Zeitskalen, zum Beispiel liegen typische Streuzeiten in einer Größenordnung von 100 fs [100, 101]. Die Dynamik von Laserdioden findet aber auf einer Nanosekunden-Skala statt. Deswegen ist anzunehmen, dass die Abweichung der Besetzungsfunktionen zu Fermi-Dirac-Verteilungen klein ist. Die Fermi-Dirac-Verteilung aus Gl. 3.7 hängt ab von der inversen Temperatur $\beta = 1/(k_B T)$ und dem chemischen Potential μ . Um die \mathbf{k} -abhängigen Besetzungsfunktionen zu bestimmen, ist auch eine Kenntnis der Bandstruktur nötig:

$$f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} = \frac{1}{e^{\beta_{\lambda}(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \mu_{\lambda})} + 1}.$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht sind die chemischen Potentiale und Temperaturen gleich, bei der Laserdynamik kann es aber vorkommen, dass sich nur ein Quasi-Gleichgewicht einstellt und sich die chemischen Potentiale und Temperaturen von Band zu Band unterscheiden. In dieser Arbeit wird für die Temperatur im Folgenden die *Gittertemperatur* verwendet, $\beta_\lambda = \beta = 1/(k_B T_{\text{Gitter}})$, welche als Parameter in die Simulation eingeht.

Da normalerweise mit der Ladungsträgerdichte statt dem chemischen Potential gearbeitet wird, muss noch eine Verbindung zwischen den beiden Größen hergestellt werden. Die Ladungsträgerdichte kann durch eine entsprechende Summe über alle \mathbf{k} -Werte berechnet werden:

$$n_\lambda = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \mu_\lambda)} + 1} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \mu_\lambda)} + 1} \quad (3.8)$$

mit einem Faktor 2 aufgrund der Spinsummation. Wird eine Dichte vorgegeben, muss dementsprechend eine nichtlineare Gleichung für das chemische Potential μ_λ gelöst werden. Außerdem kann das Integral auf der rechten Seite nur in einigen Spezialfällen analytisch gelöst werden, zum Beispiel für eine parabolische Bandstruktur in zwei Dimensionen [62].

Generell können im Halbleiter mehrere Leitungsbänder oberhalb der Bandlücke und mehrere Valenzbänder unterhalb der Bandlücke für optische Prozesse relevant sein. Da bei Nitriden die Energien des zweiten Leitungsbands am Γ -Punkt viel größer sind als die des ersten Leitungsbandes, wird im Folgenden nur ein Leitungsband mit $\lambda = c$ berücksichtigt. Daher kann für die Elektronen im Leitungsband Gl.(3.8) verwendet werden, um das chemische Potential zu bestimmen. Bei den Valenzbändern in Nitriden ist jedoch der Energieabstand zwischen den Bändern in der Nähe der Bandlücke klein und so sind zwei oder mehr Valenzbänder für die Laserdynamik relevant. Allerdings ist im Normalfall nur die Summe der Dichten aller Valenzbänder bekannt. Daher sind weitere Annahmen erforderlich, hier wird angenommen, dass alle Valenzbänder das gleiche chemische Potential besitzen. Die zu lösende nichtlineare Gleichung lautet

$$n_v = \sum_{\lambda \in v} n_\lambda = \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda \in v} \int d^2\mathbf{k} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \mu_v)} + 1}. \quad (3.9)$$

Die Besetzungen der Valenzbänder weichen normalerweise nur in der Nähe vom Γ -Punkt stark von 1 ab, daher ist es bequemer, im *Elektron-Loch-Bild* zu arbeiten. Hierbei werden die Besetzungen der Valenzbänder $f_{\mathbf{k}}^v$ durch die entsprechenden Loch-Besetzungen $1 - f_{-\mathbf{k}}^h$ ersetzt, und die Energien $\epsilon_{\mathbf{k}}^v$ entsprechend durch $-\epsilon_{-\mathbf{k}}^h$. Für die Elektronen im Leitungsband gibt es keine Änderungen, daher werden im Elektron-Loch-Bild die Leitungsband-Besetzungen $f_{\mathbf{k}}^c$ durch $f_{\mathbf{k}}^e$ ersetzt. Analog werden die Leitungsband-Energien anstelle von $\epsilon_{\mathbf{k}}^c$ mit $\epsilon_{\mathbf{k}}^e$ bezeichnet. Im Folgenden wird, wenn möglich, immer das Elektron-Loch-Bild verwendet, in diesem Fall werden alle Größen mit e und h indiziert. Manchmal ist es aber dennoch notwendig, mit dem Bild von Leitungs- und Valenzelektronen zu arbeiten, in diesem Fall werden zur Unterscheidung alle Größen die das Leitungsband betreffen mit c indiziert, und die Größen der Valenzbänder entsprechend mit v. Für das chemische Potential der Lochbänder $\mu_h = -\mu_v$ folgt aus Gl. (3.9) die Gleichung

$$n_h = \frac{2}{A} \sum_{\lambda \in v} \sum_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda \in h} \int d^2\mathbf{k} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \mu_h)} + 1},$$

wobei $\epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda$ nun die Energien der Löcher sind.

3.3 Halbleiter-Bloch-Gleichungen

Für die Simulation einer Laserdiode ist es nun wichtig zu wissen, wie sich die Elemente der Einteilchendichtematrix, wie beispielsweise die Besetzungsfunktionen, zeitlich entwickeln. Für den Quantenfilm muss diese Zeitabhängigkeit durch den Hamilton-Operator bestimmt sein, wie er in Kapitel 3.1 diskutiert wurde. Eine naheliegende Möglichkeit zur Herleitung von Bewegungsgleichungen ist die Heisenbergsche Bewegungsgleichung [62]:

$$\frac{d}{dt} \hat{A} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}].$$

Für Operatoren mit expliziter Zeitabhängigkeit im Schrödinger-Bild gibt es einen zusätzlichen Term. Weil jedoch alle Operatoren, die im Folgenden betrachtet werden, diese explizite Zeitabhängigkeit nicht besitzen,

wurde dieser zusätzliche Term hier nicht aufgeführt. Die resultierenden Bewegungsgleichungen für die Besetzungsfunktionen und mikroskopischen Polarisierungen in einem Halbleiter werden *Halbleiter-Bloch-Gleichungen* genannt und im Folgenden für den ortsabhängigen Fall hergeleitet. Im Heisenberg-Bild hängen alle Operatoren natürlich von der Zeit ab, zur Vereinfachung der Notation wird diese Zeitabhängigkeit aber nicht explizit angegeben.

Vor der Auswertung der Kommutatoren ist es zweckmäßig, zunächst den Anteil der Coulomb-Wechselwirkung umzuschreiben:

$$\hat{V} = \hat{V}_{\text{HF}} + \hat{H}_{\text{Streu}}$$

Hierbei ist \hat{V}_{HF} der Hartree-Fock-Anteil

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{HF}} = \frac{1}{2A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\lambda\lambda'} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'} & \left[\langle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + \langle \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \rangle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right. \\ & \left. - \langle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \rangle \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \langle \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right], \end{aligned}$$

bei dem die Elektronen nur über ein effektives Potential miteinander wechselwirken. Die Differenz \hat{H}_{Streu} zwischen dem tatsächlichen Wechselwirkungsoperator und dem Hartree-Fock-Term enthält Coulomb-Streuterme, welche versuchen, das System zurück in das thermodynamische Gleichgewicht zu treiben. Im Folgenden werden bei der Herleitung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen diese Streuterme zunächst vernachlässigt. Damit hat der Hamilton-Operator die Form:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{ph}}^0 + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} \mathcal{E}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\lambda \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\lambda\neq\lambda'} \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}$$

Dabei enthält $\mathcal{E}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\lambda$ die freien Energien und deren Renormierung durch den Hartree-Fock-Term. Im Folgenden wird nur der Austauschterm betrachtet, da zum Beispiel die freien Energien $\varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda$ den Hartree-Beitrag im Grundzustand schon enthalten sollten:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\lambda &= \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda} \rho_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + \underbrace{\frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}''\lambda'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} \rho_{\lambda'\mathbf{k}''+\mathbf{k}-\mathbf{k}',\lambda\mathbf{k}''}}_{\approx \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{q}=0}^{\lambda\lambda} \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}''} f_{\mathbf{k}''}^\lambda} \\ &\approx \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda} \rho_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda\mathbf{k}'+\mathbf{q}}. \end{aligned}$$

Der Term $\hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}$ enthält die Wechselwirkung mit dem optischen Feld:

$$\hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} = \frac{e p \lambda \lambda'}{m_0} \hat{A}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'} \rho_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda'\mathbf{k}'+\mathbf{q}}.$$

Für Fermionen gelten die Vertauschungsrelationen

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i = \delta_{ij}, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0.$$

Damit lautet die Heisenberg-Bewegungsgleichung eines Vernichtungsoperators:

$$\frac{d}{dt} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{E}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\lambda \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}'} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\lambda'} \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}$$

Ein Adjungieren ergibt die Bewegungsgleichung für die Erzeugungsoperatoren. Zusammen folgt für die Elemente der Einteilchendichtematrix die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda'\mathbf{k}',\lambda\mathbf{k}} &= \frac{d}{dt} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}''} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''}^{\lambda'} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}''} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}'',\mathbf{k}}^\lambda \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \right] \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}''\lambda''} \left[\hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''}^{\lambda'\lambda''} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda''\mathbf{k}''} - \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}'',\mathbf{k}}^{\lambda''\lambda} \hat{a}_{\lambda''\mathbf{k}''}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}', \lambda \mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}''} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''}^{\lambda'} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}'', \lambda \mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}}^{\lambda} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}', \lambda \mathbf{k}''} \right] \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'' \lambda''} \left[\hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''}^{\lambda' \lambda''} \hat{\rho}_{\lambda'' \mathbf{k}'', \lambda \mathbf{k}} - \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}}^{\lambda'' \lambda} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}', \lambda'' \mathbf{k}''} \right]. \end{aligned}$$

Daraus folgt die Bewegungsgleichung für die ortsabhängige Einteilchendichtematrix:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{\parallel}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}'}^{\lambda'} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}', \lambda \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda \mathbf{k}'} \right] \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q} \lambda''} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{\parallel}} \left[\hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}'}^{\lambda' \lambda''} \hat{\rho}_{\lambda'' \mathbf{k}', \lambda \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} - \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda'' \lambda} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda'' \mathbf{k}'} \right]. \end{aligned}$$

Aufgrund der Summen über \mathbf{k}' und \mathbf{q} ist es möglich die Koordinatentransformation

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} + \tilde{\mathbf{q}}, \quad \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k} + \frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2} - \frac{\mathbf{q}}{2}$$

durchzuführen. Dies führt auf

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) &= \\ &\quad -\frac{i}{\hbar} \sum_{\tilde{\mathbf{q}} \mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{q}})\mathbf{r}_{\parallel}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{q}}}{2}, \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda'} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}} \right] \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{\tilde{\mathbf{q}} \mathbf{q} \lambda''} e^{i(\mathbf{q}+\tilde{\mathbf{q}})\mathbf{r}_{\parallel}} \left[\hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda' \lambda''} \hat{\rho}_{\lambda'' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}} - \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda'' \lambda} \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda'' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}} \right]. \end{aligned}$$

Um die Terme auf der rechten Seite wieder durch die ortsabhängige Dichtematrix auszudrücken, muss zunächst eine Taylor-Entwicklung ausgeführt werden. Zum Beispiel wird bei dem ersten Beitrag für die Dichtematrix die folgende Entwicklung verwendet:

$$\hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \lambda \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}-\frac{\mathbf{q}}{2}} = \sum_{n=0} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\mathbf{q}}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \right)^n \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}+\mathbf{q}, \lambda \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}+\mathbf{q}} \Big|_{\mathbf{q}=0} = \sum_{n=0} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\mathbf{q}}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \right)^n \hat{\rho}_{\lambda' \mathbf{k}+\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}, \lambda \mathbf{k}-\frac{\tilde{\mathbf{q}}}{2}}$$

Die Terme mit \mathcal{E} oder \mathcal{U} werden genauso entwickelt. Die zusätzlichen \mathbf{q} - oder $\tilde{\mathbf{q}}$ -Faktoren sorgen bei dem jeweils anderen Term in jedem der vier Beiträge zu einer Ortsableitung. Dies führt insgesamt auf [64]

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{mn} \frac{(\nabla_{\mathbf{r}'_{\parallel}} \nabla_{\mathbf{k}})^n (\nabla_{\mathbf{r}_{\parallel}} \nabla_{\mathbf{k}'})^m}{(2i)^{n+m} n! m!} \\ &\quad \left[(-1)^m \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}'}(\mathbf{r}'_{\parallel}) - (-1)^n \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}'}(\mathbf{r}'_{\parallel}) \right. \\ &\quad \left. - (-1)^m \sum_{\lambda''} \hbar \hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda' \lambda''}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda'' \lambda \mathbf{k}'}(\mathbf{r}'_{\parallel}) + (-1)^n \sum_{\lambda''} \hbar \hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda'' \lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda'' \mathbf{k}'}(\mathbf{r}'_{\parallel}) \right] \Big|_{\mathbf{r}_{\parallel}=\mathbf{r}'_{\parallel}, \mathbf{k}=\mathbf{k}'} \quad (3.10) \end{aligned}$$

Hierbei wurden die ortsabhängigen Energien definiert als

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{\parallel}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda} \rho_{\lambda \lambda \mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}_{\parallel}), \quad (3.11)$$

und die ortsabhängigen Rabi-Frequenzen lauten

$$\hbar \hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda \lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) = -\sum_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{\parallel}} \hat{\mathcal{U}}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\lambda \lambda'} = -\frac{e p \lambda \lambda'}{m_0} \hat{A}(\mathbf{r}_{\parallel}) + \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda'} \rho_{\lambda \lambda' \mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}_{\parallel}). \quad (3.12)$$

In nullter Ordnung in der Ortsabhängigkeit $m = n = 0$ ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) &= -\frac{i}{\hbar} \left[\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) \right] \\ &\quad + i \sum_{\lambda''} \left[\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda' \lambda''}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda'' \lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) - \hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda'' \lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda'' \mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) \right]. \end{aligned}$$

Daraus ergeben sich die Bewegungsgleichungen für die Besetzungen und die mikroskopischen Polarisierungen, der Übersicht halber wurden die Ortsabhängigkeiten nicht mit angegeben:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'} &= i\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda'}) - \frac{i}{\hbar}(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda})\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \left.\frac{d}{dt}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}\right|_{\text{Streu}}, \\ \frac{d}{dt}\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= 2\sum_{\lambda'}\text{Im}\left\{\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}\left(\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}\right)^*\right\} + \left.\frac{d}{dt}\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\right|_{\text{Streu}}.\end{aligned}\quad (3.13)$$

Die Streuterme in Gl. (3.13) enthalten alles, was über die Hartree-Fock-Näherung und die nullte Ordnung in der Ortsabhängigkeit hinausgeht. Diese Bewegungsgleichungen werden auch *Halbleiter-Bloch-Gleichungen* genannt.

Wie im letzten Unterkapitel schon diskutiert wurde, sind bei der Laserdynamik für Nitride mehrere Valenzbänder beteiligt, allerdings nur ein Leitungsband. Die optischen Übergänge zwischen Valenzbändern sind bei der Laser-Simulation auch nicht weiter von Interesse, daher sind nur die Polarisierungen $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{c\lambda}$ zwischen dem Leitungsband und den verschiedenen Valenzbändern relevant. Zur Vereinfachung der Notation werden daher die folgenden Abkürzungen verwendet:

$$\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{c\lambda}, \quad \hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda c}, \quad p_{\lambda} = p_{\lambda c} = p_{c\lambda}^*.\quad (3.14)$$

Damit nehmen die Halbleiter-Bloch-Gleichungen im Elektron-Loch-Bild die folgende Form an:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= i\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(1 - \hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \hat{f}_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar}(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda})\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \left.\frac{d}{dt}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\right|_{\text{Streu}}, \\ \frac{d}{dt}\hat{f}_{\mathbf{k}}^e &= 2\sum_{\lambda\in\text{h}}\text{Im}\left\{\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\left(\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\right)^*\right\} + \left.\frac{d}{dt}\hat{f}_{\mathbf{k}}^e\right|_{\text{Streu}}, \\ \frac{d}{dt}\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= 2\text{Im}\left\{\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\left(\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\right)^*\right\} + \left.\frac{d}{dt}\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda}\right|_{\text{Streu}},\end{aligned}$$

dabei werden die verschiedenen Lochbänder mit λ und das einzelne Leitungsband mit e indiziert.

Es fehlen noch Bewegungsgleichungen für das optische Feld, bzw. für die Modenkoeffizienten \hat{B}_p . Diese können auch mit den Heisenberg-Bewegungsgleichungen hergeleitet werden. Mit dem Hamilton-Operator aus Gl. (2.12) und (3.5) lautet die Bewegungsgleichung für den Photonen-Vernichtungsoperator

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{B}_p &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{B}_p, \hat{H}] \\ &= -i\omega_p\hat{B}_p - \frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda\lambda'}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}[\hat{B}_p, \hat{A}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}] \frac{ep_{\lambda\lambda'}}{m_0} \\ &= -i\omega_p\hat{B}_p - i\sqrt{\frac{1}{2\omega_p\epsilon_0\hbar}}\frac{1}{A}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\lambda\lambda'}\frac{ep_{\lambda\lambda'}}{m_0}\int d^2\mathbf{r}_{\parallel}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel})u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \\ &= -i\omega_p\hat{B}_p + \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}}\int d^2\mathbf{r}_{\parallel}u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})\hat{P}(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega_p)\end{aligned}\quad (3.15)$$

Hierbei wurde der Operator der makroskopischen Polarisation \hat{P} des Quantenfilms definiert als

$$\hat{P}(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega) = -\sum_{\lambda\lambda'}\frac{iep_{\lambda\lambda'}}{\omega m_0}\frac{1}{A}\sum_{\mathbf{k}}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) = \sum_{\lambda\lambda'}d_{\lambda\lambda'}(\omega)\frac{1}{A}\sum_{\mathbf{k}}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}),$$

mit dem Dipolmoment $d_{\lambda\lambda'}(\omega) = -iep_{\lambda\lambda'}/\omega m_0$. Für ein Leitungsband und mit den Abkürzungen aus Gl. (3.14) hat die Polarisation die Form

$$\hat{P}(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega) = \sum_{\lambda}d_{\lambda}(\omega)\frac{1}{A}\sum_{\mathbf{k}}\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}) - \sum_{\lambda}d_{\lambda}^*(\omega)\frac{1}{A}\sum_{\mathbf{k}}\left(\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel})\right)^{\dagger}.$$

Bisher wurden die Bewegungsgleichung nur für die Operatoren aufgestellt. Wird davon der Erwartungswert gebildet, führt das auf

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\psi_{\mathbf{k}}^\lambda &= i\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda - f_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^\lambda) \psi_{\mathbf{k}}^\lambda + \left. \frac{d}{dt}\psi_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}}, \\
\frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^e &= 2 \sum_{\lambda} \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^\lambda (\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda)^* \right\} + \left. \frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^e \right|_{\text{Streu}}, \\
\frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^\lambda &= 2 \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^\lambda (\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda)^* \right\} + \left. \frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}}, \\
\frac{d}{dt}B_p &= -i\omega_p B_p + \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}} \int d^2\mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega_p).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Hierbei wurde die Näherung $\langle \hat{B}_p \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \approx \langle \hat{B}_p \rangle \langle \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle$ verwendet, welche für klassisches Licht exakt ist. Dabei werden dementsprechend Quanteneffekte wie spontane Emission vernachlässigt, welche separat beschrieben werden, siehe Kapitel 3.10. In der klassischen Näherung lautet die Bewegungsgleichung für die Photonenzahl

$$\frac{d}{dt}S_p = \frac{d}{dt} \langle \hat{B}_p^\dagger \hat{B}_p \rangle \approx \frac{d}{dt} B_p^* B_p = \frac{d}{dt} |B_p|^2 = \text{Re} \left\{ B_p^* \sqrt{\frac{2\omega_p}{\hbar\epsilon_0}} \int d^2\mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega_p) \right\}.$$

Die Bewegungsgleichung für die Phase φ_p von B_p lautet dementsprechend

$$\frac{d}{dt}\varphi_p = \frac{1}{S_p} \text{Im} \left\{ B_p^* \frac{d}{dt} B_p \right\} = -\omega_p + \frac{1}{S_p} \text{Im} \left\{ B_p^* \sqrt{\frac{2\omega_p}{\hbar\epsilon_0}} \int d^2\mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega_p) \right\}.$$

Die Bewegungsgleichungen können noch weiter vereinfacht werden, indem die Zeitabhängigkeit bestimmter Größen ausgenutzt wird. Zum Beispiel gilt näherungsweise für die Modenkoeffizienten und die mikroskopischen Polarisierungen

$$\psi_{\mathbf{k}}^\lambda \propto e^{-\frac{i}{\hbar}t(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda)}, \quad B_p \propto e^{-i\omega_p t}.$$

Eingesetzt in die Bewegungsgleichung der Besetzungsfunktionen ergeben sich zwei Terme mit den Zeitabhängigkeiten

$$\text{Im} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}t(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda + \hbar\omega_p)} \right) \text{ und } \text{Im} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}t(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \hbar\omega_p)} \right).$$

Die Größen $\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda$ und $\hbar\omega_p$ entsprechen beide näherungsweise der Bandlücke, daher ist die Frequenz des ersten Terms viel größer als die Frequenz des zweiten Terms. Mit der Bandlücke E_G liegt die Periodendauer des ersten Terms liegt bei näherungsweise $4\pi\hbar/E_G$, also in einer Größenordnung von 1 fs. Da sich aber zum Beispiel die Beträge der Modenkoeffizienten und der mikroskopischen Polarisierungen nur auf wesentlich größeren Zeitskalen ändern, ist der erste Term nach einer zeitlichen Mittelung über eine Zeitspanne von zum Beispiel 10 fs oder mehr vernachlässigbar. Daher ist es eine gute Näherung, nur den zweiten Term in der Dynamik zu berücksichtigen. Diese Näherung kann in ähnlicher Weise auch in den anderen Bewegungsgleichungen durchgeführt werden, dies wird auch als "Rotating Wave Approximation" (RWA) [62, 97] bezeichnet und führt auf eine Vereinfachung der makroskopischen Polarisation und der Rabi-Frequenzen aus Gl. (3.12):

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega) &\approx -\frac{iep\lambda}{\omega m_0} \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}_{\parallel}) \\
\hbar\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda &= -\frac{ep\lambda^*}{m_0} \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p\epsilon_0}} \left[B_p u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) + B_p^* u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right] + \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{c\lambda} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\lambda \\
&\approx -\frac{ep\lambda^*}{m_0} \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p\epsilon_0}} B_p u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) + \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{c\lambda} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\lambda.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Hierbei wurde eine zweifache Entartung der Bänder aufgrund von Spin angenommen. In ähnlicher Schreibweise lauten die Hartree-Fock-Energien aus Gl. (3.11)

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^\lambda = \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda} f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\lambda. \tag{3.18}$$

3.4 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie

Zur Simulation der Dynamik einer Laserdiode mithilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen werden verschiedene Größen wie die Ein-Teilchen-Energien, die Coulomb-Formfaktoren und der Impuls-Matrixelemente benötigt. Eine Möglichkeit zur Bestimmung dieser Größen stellt die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode dar, welche im Folgenden für Wurtzit-Kristalle kurz vorgestellt wird. In der Herleitung von Gl. (3.4) wurde angenommen dass zu jedem Band nur eine gitterperiodische Funktion $\mathbf{u}_\lambda(\mathbf{r})$ und damit eine Einhüllende ξ_λ gehört. Allerdings ist es bei Halbleitern so, dass die Quantenfilm-Wellenfunktion eines Valenzbandes eine Linearkombination der der Blochfunktionen mehrerer Valenzbänder des Bulk-Materials ist [97]. Daher wird für jede relevante Blochfunktion eine eigene Einhüllende benötigt. Das heißt die Basis in Gl. (3.3) muss folgendermaßen modifiziert werden:

$$\phi_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{A}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\alpha} u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \xi_{\alpha\lambda}(z).$$

Hier nummeriert λ die zweidimensionalen Bänder des Quantenfilms und mit α werden die Bänder des Bulk-Materials indiziert. Die Impuls-Matrixelemente in Gl. (3.4) müssen folgendermaßen berechnet werden:

$$p_{\lambda\lambda'} = \int dz \sum_{\alpha\beta} \xi_{\alpha\lambda}^*(z) \xi_{\beta\lambda'}(z) \mathbf{e}_p \cdot \mathbf{p}_{\alpha\beta} \quad (3.19)$$

Gilt $\xi_{\alpha\lambda}(z) = \delta_{\alpha\lambda} \xi_\lambda(z)$ folgt wieder Gl. (3.4). Eine Möglichkeit dafür stellt die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie dar. Bei der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie wird von einem Hamilton-Operator für die entsprechende Kristallstruktur ausgegangen. Die meisten III-V-Halbleiter kristallisieren in einer Zinkblende-Struktur [95], welche eine kubische Elementarzelle besitzt. Die natürliche Kristallstruktur der Nitride ist hingegen die hexagonale Wurtzit-Struktur [102]. Diese weist keine Inversionssymmetrie auf, daher muss der Effekt der Piezoelektrizität berücksichtigt werden. Für Halbleiter mit einer Wurtzit-Kristallstruktur ist eine Möglichkeit für den Hamilton-Operator $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie ist der Chuang-Chang-Hamiltonian [103, 104]. Dieser besitzt die Form

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} F & -H^* & -K^* & 0 & 0 & 0 \\ -H & \lambda & H^* & \Delta & 0 & 0 \\ -K & H & G & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & G & -H^* & -K^* \\ 0 & 0 & \Delta & -H & \lambda & H^* \\ 0 & 0 & 0 & -K & H & F \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

besitzt und nur für die Valenzbänder gilt. Die Matrixelemente lauten

$$\begin{aligned} F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta, & K &= \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x + ik_y)^2 + D_5 \epsilon_+, \\ G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta, & H &= \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 k_z (k_x + ik_y) + D_6 \epsilon_{z+}, \\ \lambda &= E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2)] + \lambda_\epsilon, & \Delta &= \sqrt{2} \Delta_3, \\ \lambda_\epsilon &= D_1 \epsilon_{zz} + D_2 (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), & \Delta_1 &= \sqrt{2} \Delta_{cr}, \\ \theta &= \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_3 k_z^2 + A_4 (k_x^2 + k_y^2)] + \theta_\epsilon, & \epsilon_{\pm} &= \epsilon_{xx} \pm 2i\epsilon_{xy} - \epsilon_{yy}, \\ \theta_\epsilon &= D_3 \epsilon_{zz} + D_4 (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), & \epsilon_{z\pm} &= \epsilon_{zx} \pm i\epsilon_{yz}. \end{aligned}$$

Hierbei sind k_x , k_y und k_z die entsprechenden Komponenten des dreidimensionalen Wellenvektors, ϵ_{ij} die Komponenten des Dehnungstensor und der Rest sind Materialparameter. Für die Parameter gilt in der kubischen Näherung

$$\begin{aligned} A_1 - A_2 &= -A_3 = 2A_4, & A_3 + 4A_5 &= \sqrt{2}A_6, & \Delta_2 = \Delta_3 &= \frac{1}{3} \Delta_{so}, \\ D_1 - D_2 &= -D_3 = 2D_4, & D_3 + 4D_5 &= \sqrt{2}D_6. \end{aligned}$$

Für eine detaillierte Diskussion der Parameter siehe Ref. [103], so wird zum Beispiel die energetische Aufspaltung der Valenzbänder durch die Δ -Parameter dargestellt. So beschreibt der Parameter Δ_{so} den Einfluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung und Δ_{cr} die Aufspaltung aufgrund des Kristallfeldes.

Für einen Quantenfilm wird k_z durch die Ableitung $-i \frac{\partial}{\partial z}$ ersetzt und die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

gelöst [105]. Im Folgenden wird nun ein Wurtzit-Kristall betrachtet, der in z -Richtung gewachsen wurde. Die nichtverschwindenden Komponenten des Dehnungstensors im Quantenfilm lauten

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a}, \quad \epsilon_{zz} = -\frac{2C_{13}}{C_{33}}\epsilon_{xx},$$

hierbei sind C_{ij} die entsprechenden Komponenten des Elastizitätstensors, a_0 ist die Gitterkonstante des Substrates und a die des Quantenfilms. Die Materialparameter sind im Anhang in Kapitel 9.4 gelistet [39] und können mittels Interpolation für jedes Material der Form $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ bestimmt werden. Da die Bandlücke des Quantenfilm-Materials kleiner ist als die des umliegenden Materials, bleibt noch die Frage nach der Angleichung der Bandkanten für Elektronen und Löcher. Ist E_G^0 die Bandlücke des Substrates und E_G die Bandlücke des Quantenfilm-Materials, werden die Energien am Γ -Punkt folgendermaßen modifiziert:

$$\begin{aligned} E_c &= E_c^0 - (E_G^0 - E_G)\eta, \\ E_v &= E_v^0 + (E_G^0 - E_G)(1 - \eta), \end{aligned}$$

sodass $E_c - E_v = E_G$. Die Größe η ist ein Parameter wird zu $\frac{2}{3}$ gewählt [105]. Da der Hamilton-Operator aus Gl. 3.20 nur für die energetisch-höchsten Valenzbänder gilt, wird noch ein entsprechender Hamiltonian für die Leitungsbänder benötigt. Wird nur das erste Leitungsband berücksichtigt, lautet der Hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{H}^e &= E_c + \Delta_1 + \Delta_2 + P_{ce} + \frac{\hbar^2}{2m_e^z}k_z^2 + \frac{\hbar^2}{2m_e^p}(k_x^2 + k_y^2), \\ P_{ce} &= a_{cz}\epsilon_{zz} + a_{ct}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Die Materialparameter m_e^z und m_e^p sind die effektiven Massen des Leitungsbands in z -Richtung bzw. in Richtungen senkrecht dazu. Die Parameter a_{cz} und a_{ct} bestimmen die Verschiebung der Bandkante aufgrund einer Dehnung des Materials.

Mit den hier gemachten Annahmen hängt die Bandstruktur nur vom Betrag des zweidimensionalen Wellenvektors \mathbf{k} ab und jedes Band ist zweifach entartet.

Im Vergleich zu vielen anderen Kristall-Strukturen wie beispielsweise die Zinkblende-Struktur, muss bei Wurtzit-Kristallen zusätzlich der Effekt der Piezoelektrizität berücksichtigt werden [69]. Aufgrund der Dehnung des Materials innerhalb des Quantenfilms, entsteht dort eine Polarisation, welche durch die entsprechenden Piezo-Konstanten bestimmt wird [102]:

$$P(z) = P_{sp} + 2d_{13} \left(C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}}{C_{33}} \right) \epsilon_{xx},$$

dabei gehen neben den Komponenten des Elastizitätstensors auch zwei weitere Materialparameter P_{sp} d_{13} ein. Die Polarisation innerhalb des Quantenfilm unterscheidet sich von der des umliegenden Materials, dadurch entstehen Ladungen an den Flächen zwischen den Materialien:

$$\rho(z) = \frac{\partial}{\partial z} P(z).$$

Eine Lösung der Poisson-Gleichung [96]

$$\frac{\partial}{\partial z} \epsilon_r(z) \frac{\partial}{\partial z} \phi(z) = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_0}$$

liefert ein elektrostatisches Potential, welches die Bandkanten modifiziert:

$$\begin{aligned} E'_c(z) &= E_c - e\phi(z) \\ E'_v(z) &= E_v - e\phi(z) \end{aligned}$$

Die Ladungsträger im Quantenfilm richten sich entsprechend aus und schwächen so das Feld im Quantenfilm ab. Um diesen Effekt zu berücksichtigen, wird eine Annahme für die Verteilungsfunktion der Ladungsträger

benötigt. Hier wird eine Fermi-Dirac-Verteilung verwendet, wobei die Temperatur bzw. die inverse Temperatur β und die Ladungsträgerdichte n_0 vorgegeben werden, siehe auch Kapitel 3.2. Das chemische Potential muss so gewählt werden, das gilt:

$$n_e = n_0 = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \mu_e)} + 1} = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{e,\text{FD}},$$

$$n_h = n_0 = \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \mu_h)} + 1} = \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}.$$

Hier wurde die zweifache Entartung aufgrund des Spins durch den Faktor 2 schon berücksichtigt. In der Poisson-Gleichung muss noch die zusätzliche Ladungsdichte $\rho_{\text{QW}}(z)$ berücksichtigt werden, für die gilt:

$$\rho_{\text{QW}}(z) = \rho_e(z) + \rho_h(z), \quad \rho_e(z) = -\frac{2e}{A} \sum_{\mathbf{k}} |\xi_{\mathbf{k}}^e(z)|^2 f_{\mathbf{k}}^{e,\text{FD}}, \quad \rho_h(z) = \frac{2e}{A} \sum_{\lambda\alpha\mathbf{k}} |\xi_{\lambda\alpha\mathbf{k}}^h(z)|^2 f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}.$$

Dabei sind $\xi_{\mathbf{k}}^e$ und $\xi_{\lambda\alpha\mathbf{k}}^h$ Eigenfunktionen der Hamilton-Operatoren aus Gl. (3.20) und (3.21), und $\varepsilon_{\mathbf{k}}^e$ bzw. $\varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda$ entsprechen den dazugehörigen Eigenwerten. Allerdings hängt der Hamilton-Operator vom elektrostatischen Potential ab, daher muss das gesamte Problem selbstkonsistent gelöst werden.

Zu diskutieren sind noch die Randbedingungen, in der Schrödingergleichung wird dazu einfach $\xi(z=0) = \xi(z=L_Z) = 0$ angenommen, L_Z ist hierbei die Länge der Simulationszelle. Für die Poisson-Gleichung ist dies schwieriger, da hier aufgrund der verschiedenen Ladungen sich das elektrostatische Potential bei $z=L_Z$ von dem Wert bei $z=0$ unterscheidet. Daher werden die Randbedingungen $\frac{\partial\phi(z=0)}{\partial z} = \frac{\partial\phi(z=L_Z)}{\partial z} = 0$ verwendet, sodass das Ergebnis unabhängig von der Länge der Simulationszelle ist. An dieser Stelle ist es auch möglich ein externes elektrisches Feld zu berücksichtigen, dann muss die Null in den Randbedingungen durch die elektrische Feldstärke ersetzt werden.

Nun müssen noch die Impuls-Matrixelemente bestimmt werden, dazu wird Gl. (3.19) verwendet. In der Basis aus Gl. (3.20) koppeln die Komponenten 3 und 6 mit dem elektromagnetischen Feld in z -Richtung. Dies ist bei TM-Moden der Fall, wo die Polarisation größtenteils senkrecht zum Quantenfilm ist. Die anderen Komponenten sind wichtig für die Kopplung mit den TE-Moden, wo die Polarisation dementsprechend parallel zum Quantenfilm ist. Das Ergebnis lautet

$$S_{\lambda\alpha} = \int dz (\xi_{\mathbf{k}}^e(z))^* \xi_{\lambda\alpha\mathbf{k}}^h(z),$$

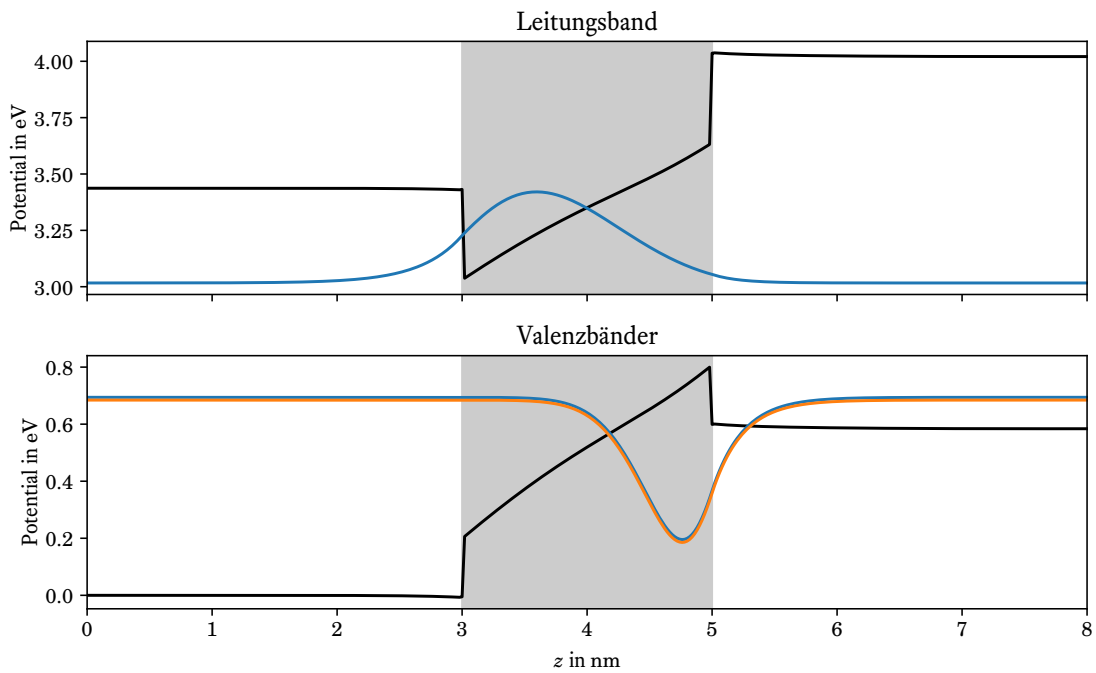
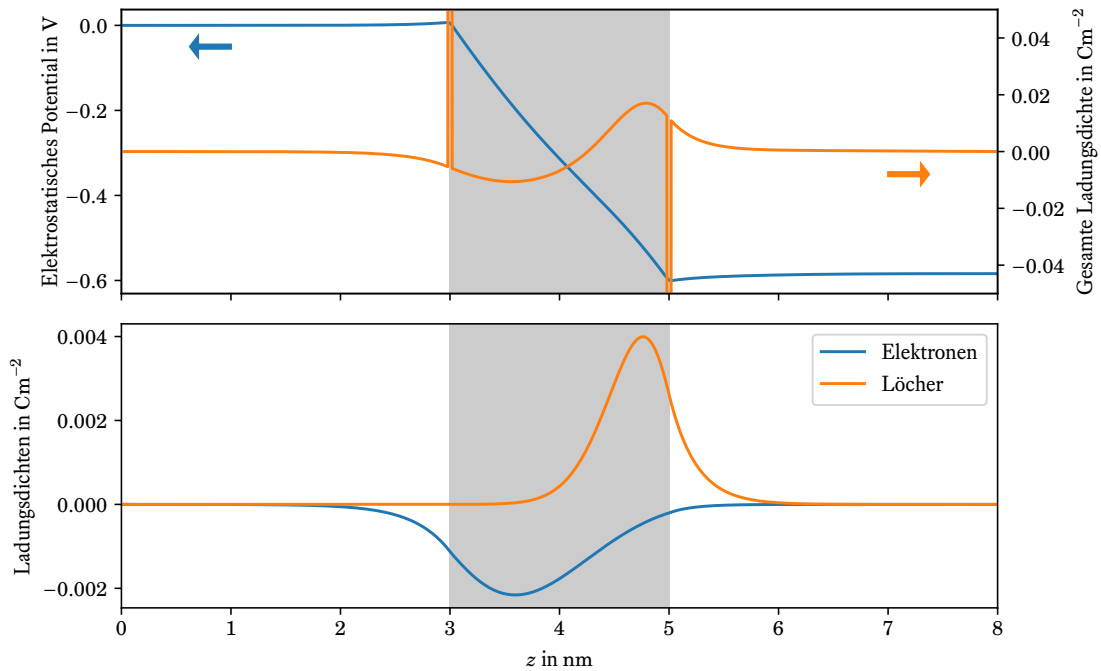
$$|p_{\lambda}^{\text{TM}}|^2 = |p_z|^2 [|S_{\lambda 3}|^2 + |S_{\lambda 6}|^2],$$

$$|p_{\lambda}^{\text{TE}}|^2 = \frac{|p_x|^2}{2} [|S_{\lambda 1}|^2 + |S_{\lambda 2}|^2 + |S_{\lambda 4}|^2 + |S_{\lambda 5}|^2].$$

Die Materialparameter p_x und p_z werden meistens in der Form $E_{p_x} = \frac{2|p_x|^2}{m_0}$ gegeben, und haben die Einheit einer Energie.

Ein Beispiel ist in Abb. 3.1 für einen InGaN-Quantenfilm gezeigt, die Parameter hierzu sind in Tabelle 9.12 im Anhang dargestellt. Der Einfluss des Piezo-Effektes auf das elektrostatische Potential ist dabei leicht zu sehen. Mit den hier gewählten Randbedingungen bildet sich ein elektrisches Feld im Quantenfilm aus, welches aber außerhalb des Quantenfilms verschwindet. Aufgrund dieses Feldes haben die Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher ihre Maxima auf verschiedenen Seiten des Quantenfilms. Eine entsprechende Lösung der Schrödingergleichung für jeden Wert von \mathbf{k} liefert die zweidimensionale Bandstruktur, in diesem Fall hängen die Energien aber nur vom Betrag von \mathbf{k} ab. In Abb. 3.1b) sind außerdem die Ladungsdichten dargestellt. In der gesamten Ladungsdichten sind die Piezo-Ladungen an den Oberflächen anhand zweier scharfe Maxima gut erkennbar und die Ortsabhängigkeiten der Ladungsträger-Beiträge zeigen das gleiche Verhalten wie die dazugehörigen Wellenfunktionen.

Die Bandstruktur ist in Abb. 3.2 gezeigt. Die höchsten Lochbänder treten hier immer in Paaren auf, das obere Band ist immer das Schwer-Loch-Band und das untere Band ist das Leicht-Loch-Band. Während das Schwer-Loch-Band eine größere effektive Masse in der besitzt und noch vergleichsweise parabolisch ist, hat das Leicht-Loch-Band einen Knick in der Nähe von 0.5 nm^{-1} . Gezeigt ist außerdem das optische Matrixelement der einzelnen Bänderpaare für TE-Moden. Hierbei ist das optische Matrixelement für die ersten beiden Bänder am größten. Aufgrund der ungeraden Loch-Wellenfunktion ist bei den nächsten beiden Bändern ist das optische Matrixelement im Vergleich sehr klein. Bei den nächsten beiden Bändern liegt wieder eine gerade Wellenfunktion vor und das Matrixelement ist wieder größer. Aufgrund der wesentlich kleineren

(a) Potential und Betragsquadrate der ersten Wellenfunktionen bei $|\mathbf{k}| = 0$ 

(b) (Oben) Elektrostatistisches Potential und gesamte Ladungsdichte (Unten) Beiträge der Elektronen und Löcher im Quantenfilm zur gesamten Ladungsdichte

Abbildung 3.1: Selbstkonsistente Lösung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Schrödingergleichung für einen InGaN-Quantenfilm welcher in GaN eingebettet wurde. Der Indium-Anteil im Quantenfilm beträgt hierbei 0.22 und für die gesamte Ladungsträgerdichte im Quantenfilm wurde 10^{13}cm^{-2} angenommen. Die grauen Bereiche stellen hierbei den Quantenfilm dar.

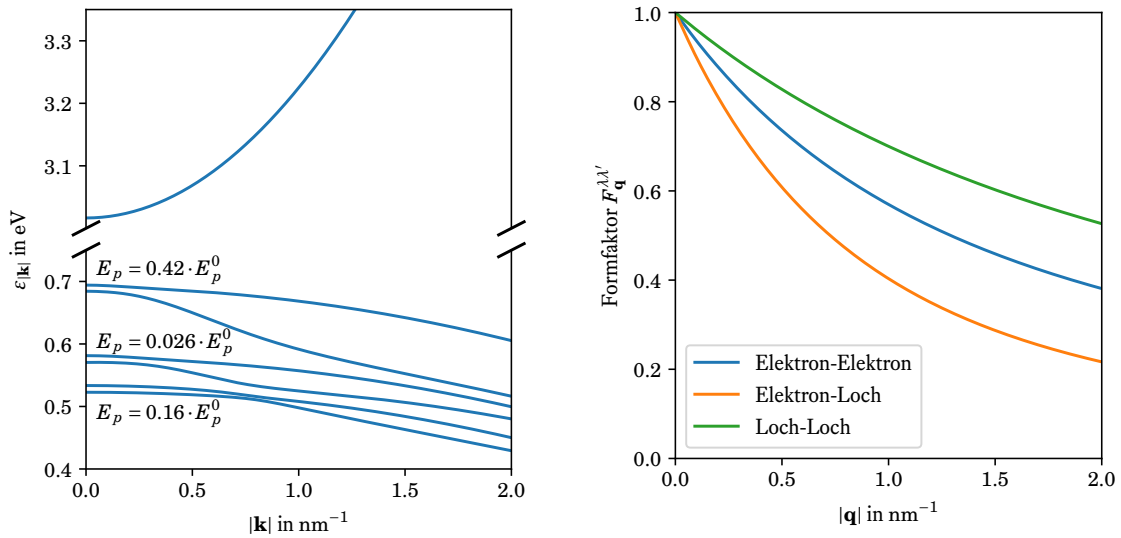


Abbildung 3.2: (Links) Bandstruktur für den InGaN-Quantenfilm aus Abb. 3.1. Gezeigt sind hier neben dem untersten Leitungsband die ersten 6 Valenzbänder. Für jedes Valenzbandpaar sind außerdem optischen Matrixelemente für TE-Moden dargestellt. (Rechts) Coulomb-Formfaktor für den InGaN-Quantenfilm aus Abb. 3.1 mit den Wellenfunktionen bei $|\mathbf{k}| = 0$. Für die Löcher wird hier das Verhalten für das energetisch-höchste Valenzband gezeigt.

Energie sind diese Bänder aber nicht für die Laserdynamik relevant. Die Lösung der Schrödingergleichung liefert auch die Wellenfunktionen, welche verwendet werden können, um zum Beispiel die Coulomb-Formfaktoren aus Gl. (3.6) zu berechnen. Diese sind in Abb. 3.2 gezeigt. Aufgrund der größeren Ausdehnung der Elektronen-Wellenfunktionen ist hier die Wechselwirkung nicht so stark wie bei den Löchern. Auf Grund des vergleichbar kleinen Überlapps ist die Wechselwirkung zwischen einem Elektron und einem Loch am schwächsten ausgeprägt.

3.5 Näherung der effektiven Massen

In den folgenden Kapiteln wird öfter die Näherung der effektiven Massen verwendet, um die Laserdynamik an einem möglichst einfachen Beispiel zu diskutieren. Die Einteilchen-Energien lauten hierbei

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \varepsilon_0^{\lambda} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\lambda}}.$$

Für jedes Band werden die Energie bei $k = 0$ und die jeweiligen effektiven Massen m_{λ} als Parameter benötigt. Wichtig sind auch die optischen Matrixelemente, welche die Wechselwirkung mit dem optischen Feld bestimmen. Während diese bei der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode mithilfe der Wellenfunktionen berechnet werden können, sind bei der Näherung der effektiven Massen die Wellenfunktionen nicht bekannt. Die optischen Matrixelemente haben die Form

$$|p_{\lambda}|^2 = S^2 |p_0|^2,$$

wobei S die Größe des Überlapps der Wellenfunktionen angibt und p_0 das Matrixelement im Bulk-Material bezeichnet. Da die Wellenfunktionen hier nicht bekannt sind, geht der Überlapp S als weiterer Parameter in die Simulationen ein.

3.6 Beschreibung der Streuterme

In der Herleitung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen wurden alle Beiträge, die über die Hartree-Fock-Näherung hinausgehen, nicht berücksichtigt. Diese daraus resultierenden Beiträge in den Bewegungsgleichungen

spielen aber in der Dynamik der Ladungsträger eine wichtige Rolle, so sorgen zum Beispiel dafür, dass sich nach größerer Zeit ein thermodynamisches Gleichgewicht einstellt. In diesem Unterkapitel sollen zunächst ein paar allgemeine Eigenschaften der Streuterme diskutiert werden, während in den nächsten zwei Unterkapiteln die Streuterme für Elektron-Elektron-Streuung und Elektron-Phonon-Streuung explizit behandelt werden.

In Gl. (3.16) wurden alle Streuterme zunächst in den beiden Termen

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}}, \quad \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}}$$

beinhaltet. Eine wichtige Eigenschaft dieser Streuterme ist, dass sie die Ladungsträgerdichte nicht verändern:

$$\left. \frac{d}{dt} n_{\lambda} \right|_{\text{Streu}} = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}} = 0. \quad (3.22)$$

Die Streuterme sind außerdem verantwortlich für die Wiederherstellung des thermodynamischen Gleichgewichts, bei dem die Verteilungsfunktionen durch Fermi-Dirac-Verteilungen gegeben sind. Im Gleichgewicht müssen daher die Streuterme verschwinden:

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} \right|_{\text{Streu}} = \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}} \left(\left\{ f_{\mathbf{k}}^{\lambda} = f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} \right\} \right) = 0. \quad (3.23)$$

In der Nähe vom Gleichgewicht kann eine Taylor-Entwicklung durchgeführt werden

$$\left. \frac{d}{dt} \left(f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} + \delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right) \right|_{\text{Streu}} = \left. \frac{d}{dt} \delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}} \approx - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} \delta f_{\mathbf{k}'}^{\lambda}, \quad (3.24)$$

solange die Abweichungen vom Gleichgewicht $\delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ nicht allzu groß sind, wie das bei den Laserdioden, die hier betrachtet werden, eigentlich immer der Fall ist. Die Streumatrix $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}$ kann natürlich von der Ladungsträgerdichte und der Temperatur abhängen. Eine mögliche Näherung ist die Nutzung einer Streuzeit, die Streumatrix hat die einfache Form

$$J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{\tau_s}, \quad (3.25)$$

mit einer Streuzeit τ_s , welche hier als Parameter eingeht. Wird Gl. (3.24) für die gesamte Besetzungsfunktion formuliert, erhalten wir

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}} \approx - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} \left(f_{\mathbf{k}'}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}} \right),$$

Hierbei besitzt die Fermi-Dirac-Verteilung $f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}}$ die selbe Ladungsträgerdichte wie die Besetzungsfunktion $f_{\mathbf{k}}^{\lambda}$. Bei der Coulomb-Streuung wird nur Energie zwischen Elektronen übertragen, das heißt die Gesamtenergie der Elektronen ändert sich nicht. Die Temperatur der Fermi-Dirac-Verteilung muss so gewählt werden, dass dies der Fall ist. Bei der Streuung der Ladungsträger mit Phononen hingegen findet ein Energieaustausch statt und führt dazu, dass sich die Temperatur der Elektronen der Temperatur des Kristallgitters anpasst. Daher kann hier die Temperatur der Fermi-Dirac-Verteilung einfach auf die Gittertemperatur gesetzt werden.

Die Streumatrix besitzt ein paar wichtige Eigenschaften, zum Beispiel muss wegen Gl. (3.22) gelten

$$\left. \frac{d}{dt} n_{\lambda} \right|_{\text{Streu}} = 0 = - \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} \left(f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}} \right).$$

Für die Streuzeit-Näherung ergibt das

$$- \frac{2}{A} \frac{1}{\tau_s} \sum_{\mathbf{k}} \left(f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} \right) = 0.$$

Dies ist hier immer erfüllt, da $f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}}$ und $f_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ die gleiche Ladungsträgerdichte liefern. Eine weitere wichtige Eigenschaft der Streumatrix folgt durch Ableiten von Gl. (3.23) nach der Dichte:

$$\frac{\partial}{\partial n_{\lambda}} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} \right|_{\text{Streu}} = 0 = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\lambda}} \frac{\partial}{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}}} \left(\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}} \right|_{\text{Streu}} \right) = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\lambda}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} = - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\lambda}}. \quad (3.26)$$

Daher muss im Gleichgewicht jede Streumatrix den Eigenvektor $\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\lambda}}$ mit Eigenwert 0 besitzen. Für die Streuzeit-Näherung ergibt die linke Seite

$$-\frac{1}{\tau_s} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\lambda}}$$

und kann deswegen die obige Gleichung nicht erfüllen.

Im thermodynamischen Gleichgewicht verschwindet die mikroskopische Polarisation, daher muss der Streuterm in der Bewegungsgleichung entsprechend einen Abbau dieser Polarisation bewirken. Für kleine Polarisationen kann daher dieser Streuterm wie folgt geschrieben werden:

$$\left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}} = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}}{\hbar} \psi_{\mathbf{k}'}^{\lambda}, \quad (3.27)$$

mit einer Dephasierungsmatrix $\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}$. Eine einfache Näherung für die Dephasierungsmatrix ist das Nutzen einer Dephasierungskonstanten:

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \gamma.$$

In diesem Fall fällt die Polarisation exponentiell ab.

3.7 Coulomb-Streuung

Ein Beispiel für einen Streu-Prozess ist die Elektron-Elektron-Streuung, bei der zwei Elektronen mithilfe der Coulomb-Wechselwirkung gestreut werden. Bei der Herleitung der dazugehörigen Streuterme müssen Terme in den Heisenberg-Bewegungsgleichungen berücksichtigt werden, die über die Hartree-Fock-Näherung hinausgehen. Dazu werden zum Beispiel die Bewegungsgleichungen von Zweiteilchenoperatoren betrachtet und die rechte Seite durch eine Cluster-Entwicklung entsprechend angenähert. Diese Bewegungsgleichungen werden wieder näherungsweise gelöst und die Lösung in die Einteilchenbewegungsgleichungen eingesetzt. Dies wird zum Beispiel in Ref. [67] beschrieben. Alternativ kann auch die Keldysh-Theorie verwendet werden, um die Streuterme herzuleiten. Diese Herleitung ist lang und daher soll nur das Ergebnis angegeben werden. Für die Besetzungsfunktionen lautet der Streuterm

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Coulomb}} = \frac{4\pi}{A^2 \hbar} \sum_{\lambda' \mathbf{q} \mathbf{k}'} |W_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda'}(\omega_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\lambda})|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda'} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\lambda'})$$

$$\left[(1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}) f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda'}) f_{\mathbf{k}'}^{\lambda'} - f_{\mathbf{k}}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda}) f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda'} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda'}) \right].$$

Der erste Term in eckigen Klammern beschreibt hierbei einen Streuprozess, bei dem ein Teilchen in den Zustand hineingestreut wird, und der zweite Term einen Streuprozess, bei dem ein Teilchen aus dem Zustand herausgestreut wird. Hierbei findet immer ein Impuls- und Energieaustausch mit einem anderem Teilchen in Band λ' mit Wellenvektor \mathbf{k}' statt. Die Delta-Funktion gewährleistet die Energieerhaltung, außerdem werden die Streuprozesse mit den entsprechenden Besetzungsfunktionen gewichtet, um zum Beispiel das Pauli-Prinzip nicht zu verletzen. Des Weiteren spielt hier auch das abgeschirmte Coulomb-Matrixelement $|W_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda'}(\omega_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\lambda})|^2$ eine große Rolle, welches am Impulsübertrag \mathbf{q} und am Energieübertrag

$$\omega_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\lambda} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\hbar}$$

ausgewertet wird. Zusätzlich werden noch die Beiträge zu den Bewegungsgleichungen der Nichtdiagonalelemente der Dichtematrix benötigt. Hier werden nur Terme erster Ordnung in $\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ berücksichtigt, das Ergebnis lautet

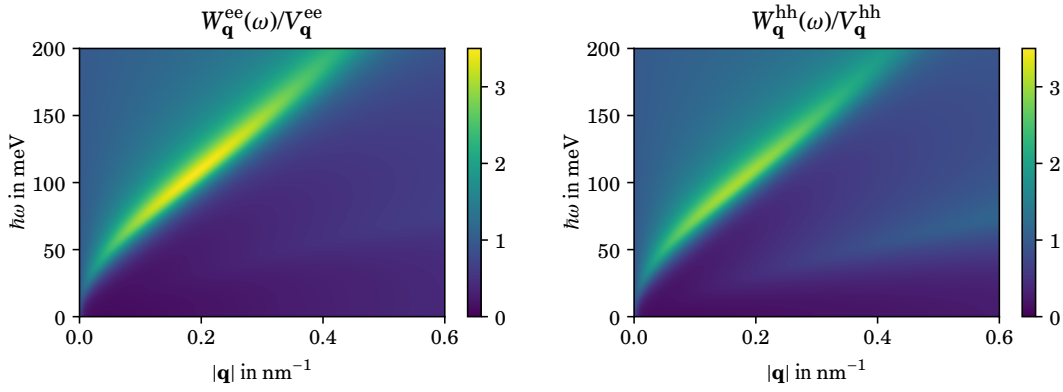


Abbildung 3.3: Dynamische Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur aus Abb. 3.2 einer Ladungsträgerdichte von 10^{13} cm^{-2} und einer Verbreiterung δ in Gl. (3.28) von 5 meV. (Links) Elektron-Elektron-Wechselwirkung (Rechts) Loch-Loch-Wechselwirkung für das energetisch-höchste Valenzband.

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Coulomb}} &= \frac{2}{A^2 \hbar} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \sum_{\lambda', \lambda'' \in \{e, \lambda\}} |W_{\mathbf{q}}^{\lambda' \lambda''}(\omega_{\mathbf{k}' \mathbf{q}})|^2 \left[\right. \\ &g \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda''} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\lambda''} \right) \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} \left[(1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda'}) (1 - f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda''}) f_{\mathbf{k}'}^{\lambda''} + f_{\mathbf{k}}^{\lambda'} f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda''} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda''}) \right] \\ &\left. - g \left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}^{\lambda''} + \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda''} \right) \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \left[f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'} (1 - f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda''}) f_{\mathbf{k}'}^{\lambda''} + (1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda'}) f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\lambda''} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda''}) \right] \right]. \end{aligned}$$

Die Funktion $g(x)$ ist hierbei definiert als

$$g(x) = \frac{i}{x + i\delta},$$

dabei ist δ in der Simulation ein Parameter, welcher in der Simulation möglichst klein gewählt wird.

Nun wird noch eine Formel für die abgeschirmten Coulomb-Matrixelemente benötigt. Diese können auch mit der Vielteilchen-Keldysh-Theorie [106] diskutiert werden, für eine Herleitung siehe Kapitel 9.2 im Anhang. Das Ergebnis für diese Matrixelemente ist das folgende Gleichungssystem, welches für jedes ω und \mathbf{q} gelöst werden muss:

$$W_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda'}(\omega) = V_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda'} + \sum_{\lambda''} V_{\mathbf{q}}^{\lambda \lambda''} P_{\mathbf{q}}^{\lambda''}(\omega) W_{\mathbf{q}}^{\lambda'' \lambda'}(\omega)$$

Dabei bezeichnet $P_{\mathbf{q}}^{\lambda}(\omega)$ die Polarisation, welche mithilfe der Lindhard-Formel berechnet wird:

$$P_{\mathbf{q}}^{\lambda}(\omega) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} + i\delta}, \quad (3.28)$$

die Größe δ ist in der Simulation ein Parameter und wird dabei möglichst klein gewählt. Um den Einfluss der Abschirmung an einem Beispiel zu diskutieren, ist in Abb. 3.3 das Verhältnis von abgeschirmter und nicht-abgeschirmter Wechselwirkung für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung mit der Bandstruktur aus Abb. 3.2 bei einer bestimmten Ladungsträgerdichte gezeigt. Hier ist gut die Plasmon-Dispersion zu erkennen, welche in zwei Dimensionen größtenteils linear verläuft und im Ursprung beginnt.

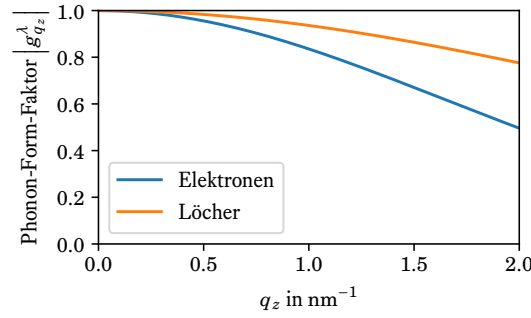


Abbildung 3.4: Phonon-Formfaktoren für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Bandstruktur aus Abb. 3.2

3.8 Phonon-Streuung

Um Phononen und deren Wechselwirkung mit den Elektronen zu berücksichtigen, müssen zum Hamilton-Operator in Gl. (3.1) noch zwei weitere Terme hinzugefügt werden [97]:

$$\hat{H}_{\text{Phonon}} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\hat{D}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) - \int d^3 \mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\sum_n \nabla U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \Delta \hat{\mathbf{R}}_n \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}),$$

Hier wird die Rechnung zunächst nur für longitudinale akustische Phononen durchgeführt, da transversale Phononen nur sehr schwach mit den Elektronen koppeln. Der erste Term ist der Beitrag der Phononen zur Gesamtenergie, welcher die gleiche Form hat wie der Beitrag der Photonen, und $\omega_{\mathbf{q}}$ ist die Frequenz eines Phonons mit Wellenvektor \mathbf{q} . Der zweite Beitrag beschreibt die Kopplung von Phononen mit den Elektronen über kleine Änderungen des gitterperiodischen Potentials. ∇U bezeichnet hierbei die Ableitung des gitterperiodischen Potentials nach der Position der Atomkerne und $\Delta \hat{\mathbf{R}}_n$ ist der Operator welcher die Abweichung der Atomkerne von der Gleichgewichtsposition angibt. Dieser lautet im einfachsten Fall

$$\Delta \hat{\mathbf{R}}_n = \sum_{\mathbf{p}} i \sqrt{\hbar} 2NM \omega_{\mathbf{p}} \left(\hat{D}_{\mathbf{p}} \mathbf{e}_{\mathbf{p}} - \hat{D}_{-\mathbf{p}}^\dagger \mathbf{e}_{-\mathbf{p}} \right),$$

hierbei ist M die Masse der Atomkerne, N ist die Anzahl und $\mathbf{e}_{\mathbf{p}}$ gibt die Richtung der Auslenkung an. Einsetzen der Wellenfunktionen aus Gl. (3.3) ergibt den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{Phonon}} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\hat{D}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\lambda \mathbf{k} \mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^\lambda \left[\hat{D}_{\mathbf{q}} + \hat{D}_{-\mathbf{q}}^\dagger \right] \hat{a}_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda \mathbf{k} - \mathbf{q} \parallel},$$

mit den Matrixelementen [97]

$$G_{\mathbf{q}}^\lambda = |\mathbf{q}| F^\lambda g_{q_z}^\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{q}}}} = F^\lambda g_{q_z}^\lambda \sqrt{\frac{\hbar |\mathbf{q}|}{2V\rho c_{\text{LA}}}} = G_{\mathbf{q}}^{\text{3D}} g_{q_z}^\lambda,$$

Hier bezeichnet ρ die Dichte des Materials und es wurde eine lineare Dispersion für die longitudinalen Phononen angenommen: $\omega_{\mathbf{q}} = c_{\text{LA}} |\mathbf{q}|$, c_{LA} ist hier die entsprechende Schallgeschwindigkeit. Die Deformationskonstanten F^λ können mithilfe der Bloch-Funktionen und der Ableitung des gitterperiodischen Potentials berechnet werden, in Simulationen werden sie oft als Parameter angegeben. $G_{\mathbf{q}}^{\text{3D}}$ sind hier die Matrixelemente im Bulk-Material, der Unterschied zu den Quantenfilm-Matrixelementen ist im Phonon-Formfaktor $g_{q_z}^\lambda$ enthalten:

$$g_{q_z}^\lambda = \int dz |\xi_\lambda(z)|^2 e^{iq_z z}.$$

Für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur aus Abb. 3.2 sind diese Formfaktoren für Elektronen und Löcher in Abb. 3.4 gezeigt. Hier ist die Kopplung für die Löcher stärker, da die Wellenfunktionen weniger ausgedehnt sind.

Neben den akustischen Phononen spielen auch optische Phononen eine Rolle. Für diese Phononen ist die Dispersion näherungsweise konstant: $\omega_{\mathbf{q}} \approx \omega_{\text{LO}}$ und die Matrixelemente lauten [62]

$$G_{\mathbf{q}}^\lambda = G_{\mathbf{q}}^{\text{3D}} g_{q_z}^\lambda = g_{q_z}^\lambda \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{\omega \rightarrow 0}} \right) V_{\mathbf{q}}^{\text{3D}}} = g_{q_z}^\lambda \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{\omega \rightarrow 0}} \right) \frac{e^2}{V \epsilon_0 q^2}}. \quad (3.29)$$

Das Endergebnis für den gesamten Hamilton-Operator lautet dementsprechend unter Berücksichtigung von beiden Phonontypen

$$\hat{H}_{\text{Phonon}} = \sum_{\alpha\mathbf{q}} \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}} \left(\hat{D}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger \hat{D}_{\alpha\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\alpha\lambda\mathbf{k}\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^{\alpha\lambda} \left[\hat{D}_{\alpha\mathbf{q}} + \hat{D}_{\alpha(-\mathbf{q})}^\dagger \right] \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}-\mathbf{q}\parallel},$$

dabei werden die verschiedenen Phononbänder mit α nummeriert. Die Herleitung der entsprechenden Streuterme erfolgt ähnlich wie bei der Coulomb-Wechselwirkung. Auch soll nur das Ergebnis angegeben werden. Zum Beispiel lautet der Phononen-Streuterm für die mikroskopische Polarisation [62]

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Phonon}} = & \sum_{\substack{\alpha\mathbf{k}'q_z \\ \mathbf{q}\parallel=\mathbf{k}'-\mathbf{k}}} \frac{|G_{\mathbf{q}}^{\alpha\lambda}|^2}{\hbar} \left[\right. \\ & g(\Delta E_e^-) \psi_{\mathbf{k}'}^\lambda \left[(n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1)(1 - f_{\mathbf{k}}^e) + n_{\mathbf{q}}^\alpha f_{\mathbf{k}}^e \right] + g(\Delta E_e^+) \psi_{\mathbf{k}'}^\lambda \left[n_{\mathbf{q}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^e) + (n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1) f_{\mathbf{k}}^e \right] \\ & - g(-\Delta E_e^+) \psi_{\mathbf{k}}^\lambda \left[(n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1)(1 - f_{\mathbf{k}'}^e) + n_{\mathbf{q}}^\alpha f_{\mathbf{k}'}^e \right] - g(-\Delta E_e^-) \psi_{\mathbf{k}}^\lambda \left[n_{\mathbf{q}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}'}^e) + (n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1) f_{\mathbf{k}'}^e \right] \\ & + g(\Delta E_\lambda^-) \psi_{\mathbf{k}'}^\lambda \left[(n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1)(1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) + n_{\mathbf{q}}^\alpha f_{\mathbf{k}}^\lambda \right] + g(\Delta E_\lambda^+) \psi_{\mathbf{k}'}^\lambda \left[n_{\mathbf{q}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) + (n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1) f_{\mathbf{k}}^\lambda \right] \\ & \left. - g(-\Delta E_\lambda^+) \psi_{\mathbf{k}}^\lambda \left[(n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1)(1 - f_{\mathbf{k}'}^\lambda) + n_{\mathbf{q}}^\alpha f_{\mathbf{k}'}^\lambda \right] - g(-\Delta E_\lambda^-) \psi_{\mathbf{k}}^\lambda \left[n_{\mathbf{q}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}'}^\lambda) + (n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1) f_{\mathbf{k}'}^\lambda \right] \right], \end{aligned}$$

mit der Funktion

$$g(x) = \frac{i}{x + i\delta}, \quad \text{und der Energie-Differenz} \quad \Delta E_\lambda^\pm = \varepsilon_{\mathbf{k}'}^\lambda - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda \pm \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}.$$

Die Dynamik der Phononenbesetzungsfunktionen $n_{\mathbf{q}}^\alpha$ wird an dieser Stelle nicht weiter betrachtet und es wird eine Bose-Einstein-Verteilung angenommen:

$$n_{\mathbf{q}}^\alpha = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}} - 1}.$$

Die inverse Temperatur β der Verteilung wird durch die Gittertemperatur bestimmt: $\beta = 1/(k_B T_{\text{Gitter}})$. Der entsprechende Streuterm für die Besetzungsfunktion lautet [62]

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Phonon}} = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\substack{\alpha\mathbf{k}'q_z \\ \mathbf{q}\parallel=\mathbf{k}'-\mathbf{k}}} |G_{\mathbf{q}}^{\alpha\lambda}|^2 \left[\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}^\lambda - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}) \left[f_{\mathbf{k}'}^\lambda (n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1)(1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) - (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) n_{\mathbf{q}}^\alpha f_{\mathbf{k}}^\lambda \right] \right. \\ & \left. + \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}^\lambda - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda + \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}) \left[f_{\mathbf{k}'}^\lambda n_{\mathbf{q}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) - (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) (n_{\mathbf{q}}^\alpha + 1) f_{\mathbf{k}}^\lambda \right] \right]. \end{aligned}$$

Hier beschreiben die zwei Terme mit positiven Vorzeichen in den eckigen Klammern einen Streu-Prozess in den betrachteten Zustand hinein, einmal durch Absorption und einmal durch Emission eines Phonons. Die anderen beiden Terme beschreiben dementsprechend eine Streuung aus dem betrachteten Zustand heraus.

Nun bleibt noch die Frage nach der Wahl der Parameter für die Dispersion der Phononen und deren Wechselwirkung mit den Elektronen. Dabei wird die Dichtefunktional-Störungstheorie (DFPT) verwendet. Die Berechnung der Phonon-Eigenschaften für GaN erfolgt dabei zunächst mit dem QUANTUM ESPRESSO Paket [107–109] auf einem groben \mathbf{q} -Gitter und wird anschließend mit dem EPW-Code [110, 111] mithilfe von Wannier-Interpolation auf einem feineren Gitter untersucht. Verwendet wird das PBE-Funktional [112, 113] und die SG15-Pseudopotentiale [114], die Cutoff-Energie der ebenen Wellen liegt bei 2.15 keV. Die resultierende Phonon-Bandstruktur und die Matrixelemente sind in Abb. 3.5 dargestellt. Die Wechselwirkung zwischen Phononen und Elektronen ist für das höchste transversal-optische Phononen-Band besonders stark und kann durch Gl. 3.29 beschrieben werden. Ein Fit liefert hier für das höchste Valenzband in x -Richtung die Konstante $\tilde{\varepsilon}_h = (1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_{\omega=0})^{-1} \approx 28.88$. Ein Fit in z -Richtung liefert einen sehr ähnlichen Wert, daher wird hier im Folgenden auch der Wert für die x -Richtung verwendet. Für das niedrigste Leitungsband erhalten folgt einen kleineren Wert von $\tilde{\varepsilon}_e \approx 14.45$. Benötigt wird außerdem die Frequenz des Phononen-Bandes für $q \rightarrow 0$, dafür wird auch der Wert in x -Richtung von $\hbar\omega_{\text{LO}} \approx 91 \text{ meV}$ verwendet.

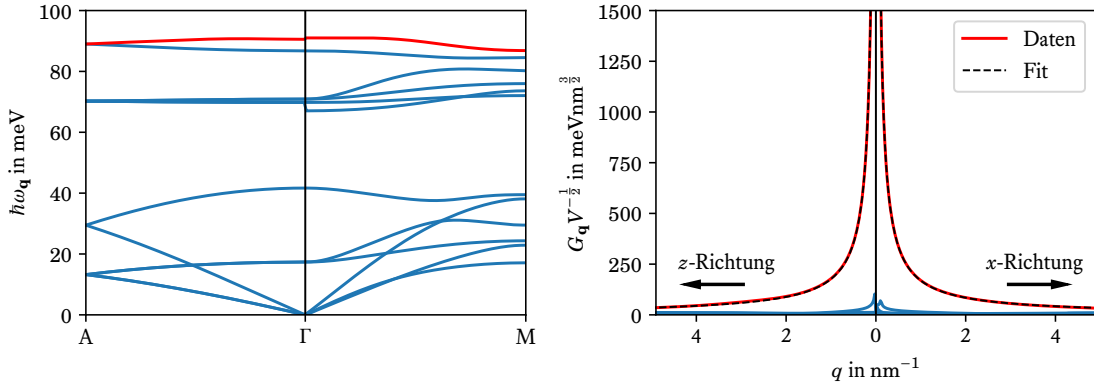


Abbildung 3.5: (Links) Phonon-Bandstruktur für GaN berechnet mit der DFPT-Methode und dem QUANTUM ESPRESSO Programmpaket [107–109] (Rechts) Elektron-Phonon-Matrixelemente abhängig vom Phononen-Impuls \mathbf{q} für das höchste Valenzband bei $\mathbf{k} = 0$. Die rote Linie entspricht hier in beiden Fällen dem höchsten transversal-optischen Phononenband. Die anderen 11 blauen Linien stellen alle anderen Phononenbänder dar. Im rechten Bild zeigt die gestrichelte Linie einen Fit mit dem Matrixelement aus Gl. (3.29).

3.9 Suszeptibilität

Eine wichtige Größe in der Laserdynamik ist die optische Suszeptibilität, welche die Antwort des Systems auf ein kleines externes elektrisches Feld \mathbf{E} beschreibt. Dieses Feld erzeugt eine Polarisation \mathbf{P} . Ist das Feld genügend klein, ist die Polarisation proportional zu dem externen Feld:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \int d^3 \mathbf{r}' \int dt' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'). \quad (3.30)$$

Hierbei ist die Suszeptibilität χ im Allgemeinen ein Tensor zweiter Stufe. Für ein ortsunabhängiges Feld in einem isotropen Bulk-Material ergibt eine Fourier-Transformation in der Zeit

$$\mathbf{P}(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}(\omega).$$

Die Suszeptibilität $\chi(\omega)$ hängt über die Gleichung

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \chi(\omega)$$

mit der dielektrischen Funktion $\epsilon_r(\omega)$ des Materials zusammen. Diese dielektrische Funktion kann wiederum verwendet werden um den frequenzabhängigen Brechungsindex $n(\omega)$ und die Absorption $\alpha(\omega)$ zu bestimmen [62]:

$$n(\omega) = \sqrt{\epsilon_r(\omega)}, \quad \alpha(\omega) = \frac{\omega}{\text{Re } n(\omega) c} \text{Im } \epsilon_r(\omega),$$

dabei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. Für die Laserdynamik spielt die optische Verstärkung $g(\omega)$ eine große Rolle, diese entspricht der negativen Absorption:

$$g(\omega) = -\alpha(\omega).$$

Die Lichtgeschwindigkeit im Material wird durch den Realteil des Brechungsindex bestimmt. Für viele Halbleiter ist der Imaginärteil der Suszeptibilität wesentlich kleiner als der Realteil [62], in diesem Fall lautet der Realteil des Brechungsindex

$$\text{Re } n(\omega) \approx \sqrt{\text{Re } \epsilon_r(\omega)}.$$

Dementsprechend ist der Realteil der optischen Suszeptibilität ausschlaggebend für den Realteil des Brechungsindex und die Absorption bzw. die optische Verstärkung wird in erster Linie durch den Imaginärteil

der Suszeptibilität bestimmt. In dem restlichen Kapitel soll die Suszeptibilität eines Quantenfilms mithilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen berechnet werden.

Für einen Quantenfilm muss die Ausdehnung in z -Richtung berücksichtigt werden. Dementsprechend werden zunächst neben einer Fourier-Transformation in der Zeit auch Fourier-Transformationen in x - und y -Richtung von Gl. (3.30) durchgeführt:

$$\mathbf{P}_{\mathbf{q}}(z, \omega) = \epsilon_0 \int dz' \chi_{\mathbf{q}}(z, z', \omega) \mathbf{E}_{\mathbf{q}}(z', \omega). \quad (3.31)$$

Bisher wurde statt dem elektrischen Feld immer das Vektorpotential \mathbf{A} benutzt. Wenn die Zeitabhängigkeit des externen Feldes nur durch eine Frequenz ω bestimmt wird, gilt

$$\hat{\mathbf{A}}(t) \sim e^{-i\omega t} \Rightarrow \hat{\mathbf{E}}(t) = -\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{A}}(t) = i\omega \hat{\mathbf{A}}(t)$$

Wird nun ein Dipolmatrixelement $\mathbf{d}_{\lambda} = -\frac{ie}{m_0\omega} \mathbf{p}_{\lambda}$ eingeführt, hat die Rabi-Frequenz aus Gl. (3.12) die einfache Form

$$\hbar\Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda} = d_{\lambda}^* E(z_{\text{QW}}) + \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{e\lambda} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda}. \quad (3.32)$$

Wird angenommen, dass sich das elektrische Feld über die Ausdehnung des Quantenfilms nicht ändert, lässt sich Gl. (3.31) noch weiter vereinfachen. Außerdem wird angenommen, dass sich die Polarisation in der Richtung der elektrischen Feldes ausrichtet. Für $\mathbf{q} = 0$ ergibt sich

$$P(\omega) = \int dz P(z, \omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) E(z_{\text{QW}}, \omega).$$

Die Polarisation des Quantenfilm ist in Gl. (3.17) und entspricht einer Summe über die mikroskopischen Polarisationen $\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda}$. Zur Berechnung der Polarisation muss daher zunächst die Bewegungsgleichung der mikroskopischen Polarisation in Gl. (3.16) gelöst werden. Eine Fourier-Transformation dieser Bewegungsgleichung führt auf

$$i \left[-\hbar\omega + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right] \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} = i\hbar\Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}) + \hbar \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streuer}},$$

hierbei wurde angenommen, dass das optische Feld nicht von \mathbf{r}_{\parallel} abhängt. Außerdem wurde ausgenutzt, dass die Besetzungsfunktionen nicht von der Zeit abhängen, da die Änderung der Besetzungsfunktionen schon quadratisch im externen Feld ist und nur die lineare Antwort des Systems berücksichtigt werden soll. Mit einem Streuterm wie in Gl. (3.27) kann die Gleichung umgeschrieben werden zu

$$\sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(\omega) \psi_{\mathbf{k}'}^{\lambda} = -d_{\lambda}^* E(z_{\text{QW}}, \omega) (1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}),$$

hierbei bezeichnet $\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(\omega)$ die Matrix

$$\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(\omega) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(\hbar\omega - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right) + i\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} + \frac{1}{A} (1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}) V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{e\lambda}. \quad (3.33)$$

Die Lösung dieses linearen Gleichungssystems liefert die mikroskopische Polarisation:

$$\begin{aligned} d_{\lambda} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= -|d_{\lambda}|^2 E(z_{\text{QW}}, \omega) \sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^e - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda}) \\ &= E(z_{\text{QW}}, \omega) |d_{\lambda}|^2 \chi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\omega), \end{aligned}$$

hierbei beschreibt $\chi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\omega)$ den Anteil der Suszeptibilität, der zum Wellenvektor \mathbf{k} gehört:

$$\chi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\omega) = -\sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^e - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda}). \quad (3.34)$$

Der Ausdruck für die mikroskopische Polarisation kann benutzt werden, um die makroskopische Polarisation P zu berechnen:

$$P(\omega) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\lambda} d_{\lambda} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\omega) = \epsilon_0 E(z_{\text{QW}}, \omega) \frac{1}{\epsilon_0} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \chi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\omega) |d_{\lambda}|^2,$$

mit einem zusätzlichen Faktor 2 aufgrund der Spin-Entartung. Damit ergibt sich für die Suszeptibilität:

$$\begin{aligned}
 \chi(\omega) &= \frac{1}{\epsilon_0} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \chi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\omega) |d_{\lambda}|^2 \\
 &= -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} |d_{\lambda}|^2 \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^e - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \\
 &= -\frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} \frac{e^2 |p_{\lambda}|^2}{\epsilon_0 \omega^2 m_0^2} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^e - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}). \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

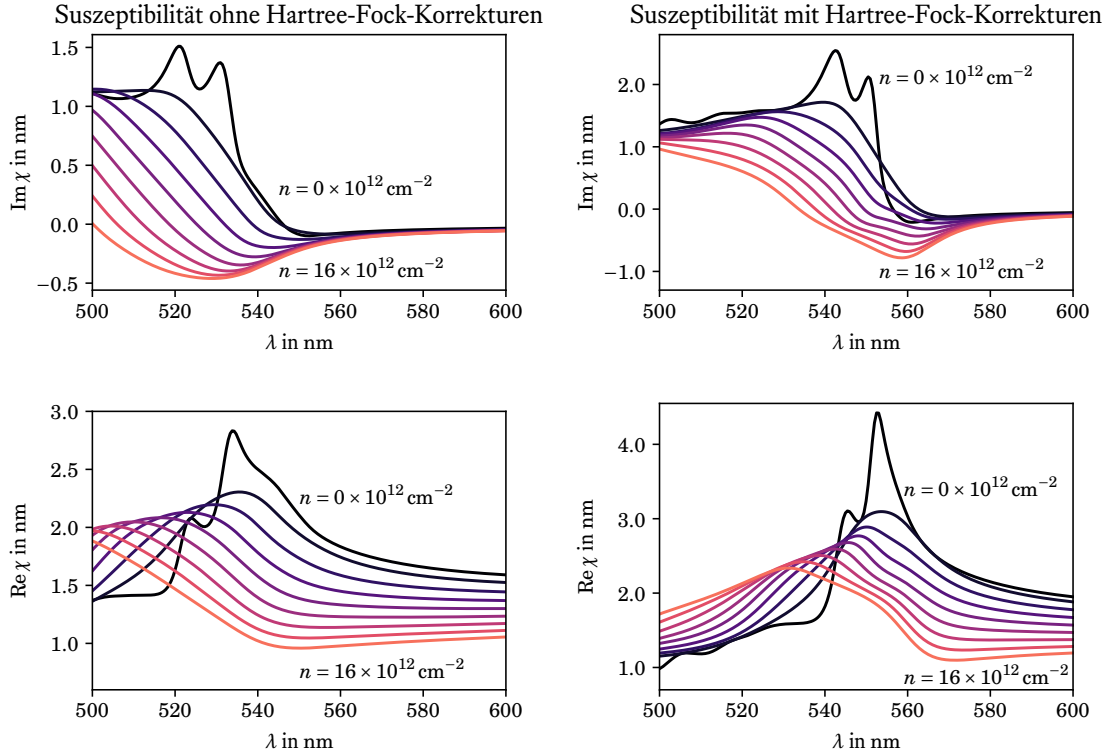


Abbildung 3.6: Realteil und Imaginärteil der elektrischen Suszeptibilität für verschiedene Ladungsträgerdichten. Hierbei wurde die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur aus Abb. 3.2, Coulomb-Streuung mit dynamischer Abschirmung und Streuung mit optischen Phononen berücksichtigt, siehe auch Tabelle 9.12 im Anhang. Auf der linken Seite wurde die Suszeptibilität ohne die Hartree-Fock-Korrekturen in Gl. (3.18) und Gl. (3.32) berechnet, während sie auf der rechten Seite berücksichtigt wurden.

Die Suszeptibilität für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur aus Abb. 3.2 ist mit und ohne Hartree-Fock-Korrekturen in Abb. 3.6 gezeigt. Diese Hartree-Fock-Korrekturen beziehen sich dabei auf die Renormierungen der Energien in Gl. (3.18) und der Rabi-Frequenz in Gl. (3.32). Für die Dephasierung wurde die Coulomb-Streuung mit dynamischer Abschirmung sowie die Streuung von Elektronen mit optischen Phononen berücksichtigt. Alle Parameter sind auch in Tabelle 9.12 im Anhang aufgeführt. Wie erwartet ist der Imaginärteil für kleine Ladungsträgerdichten immer positiv, das heißt, es liegt nur Absorption vor. Außerdem verschwindet der Imaginärteil für Wellenlängen oberhalb der Bandlücke. Für größere Ladungsträgerdichten wird der Imaginärteil immer kleiner und ab einer bestimmten Ladungsträgerdichte sogar negativ in einem bestimmten Wellenlängenbereich. Hier liegt negative Absorption vor, also Gain. Dies ist für die Laserdynamik entscheidend, da optische Moden innerhalb dieses Wellenlängenbereichs verstärkt werden. Der Realteil der Suszeptibilität hängt mit dem Brechungsindex zusammen und wird für größere Ladungsträgerdichten immer kleiner, von sehr kleinen Wellenlängen abgesehen. Für sehr kleine Ladungsträgerdichten wird die Dephasierung sehr klein, daher sind hier jeweils zwei Maxima beobachtbar, welche mit den zwei energetisch-höchsten Valenzbändern identifiziert werden können. Unter Berücksichtigung der Hartree-Fock-Korrekturen verkleinert sich die

Bandlücke und dementsprechend verschiebt sich das Maximum der optischen Verstärkung zu größeren Wellenlängen. Außerdem ändert sich das Verhalten der Suszeptibilität in der Nähe der Gain-Maxima beziehungsweise Gain-Minima aufgrund von exzitonischen Effekten, welche in Hartree-Fock-Näherung schon teilweise enthalten sind.

3.10 Spontane Emission

Bislang wurde angenommen, dass das optische Feld klassisch ist und daher die Modenkoeffizienten in Gl. (2.11) komplexe Zahlen sind. Dabei werden allerdings Quanteneffekte wie die spontane Emission vernachlässigt. Die spontane Emission ist allerdings beim Anschalten der Laserdiode wichtig, wenn angenommen wird, dass sich am Anfang noch keine Photonen in der Laserdiode befinden. In diesem Kapitel soll daher eine Möglichkeit vorgestellt werden, die spontane Emission zumindest näherungsweise in den Bewegungsgleichungen zu berücksichtigen.

Mit Gl. (3.15) folgt für die Bewegungsgleichung für den Operator der Photonenbesetzungszahl in einer Mode lautet:

$$\frac{d}{dt} \hat{S}_p = \frac{d}{dt} \hat{B}_p^\dagger \hat{B}_p = \sqrt{\frac{2\omega_p}{\epsilon_0 \hbar}} \int d^2 \mathbf{r}_\parallel \operatorname{Re} \left\{ u_p^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) \hat{B}_p^\dagger \hat{P}(\mathbf{r}_\parallel, \omega_p) \right\}.$$

Um den Anteil der stimulierten Emission von dem Anteil der spontanen Emission zu trennen, wird die Gleichung nach dem Bilden des Erwartungswertes umgeschrieben zu

$$\frac{d}{dt} S_p = \sqrt{\frac{2\omega_p}{\epsilon_0 \hbar}} \int d^2 \mathbf{r}_\parallel \frac{1}{A} \sum_{\lambda\lambda' \mathbf{k}} \operatorname{Re} \left\{ d_{\lambda\lambda'}(\omega_p) u_p^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) B_p^* \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) + d_{\lambda\lambda'}(\omega_p) u_p^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \right\}.$$

Der erste Term enthält die stimulierte Emission und der zweite Term die spontane Emission. Dabei beschreibt $\pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}$ die Korrelationen von mikroskopischer Polarisation und Photonenerzeuger [97]:

$$\pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) = \left\langle \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \hat{B}_p^\dagger \right\rangle - \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) B_p^*.$$

Aus Gl. (3.12), (3.13) und (3.15) folgt die Bewegungsgleichung für diesen Term:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) = & -\frac{i}{\hbar} \left(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \hbar\omega_p \right) \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}}{\hbar} \pi_{\mathbf{k}',p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \\ & - \frac{ie p_{\lambda'\lambda}}{\hbar m_0} \left(\left\langle \hat{B}_p^\dagger \hat{A}(\mathbf{r}_\parallel) \left(\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_\parallel) - \hat{f}_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \right) \right\rangle - B_p^* \tilde{A}(\mathbf{r}_\parallel) \left(f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_\parallel) - f_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \right) \right) \\ & \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}} \int d^2 \tilde{\mathbf{r}}_\parallel u_p(\tilde{\mathbf{r}}_\parallel, z_{\text{QW}}) \left(\left\langle \hat{P}^\dagger(\tilde{\mathbf{r}}_\parallel) \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \right\rangle - P^*(\tilde{\mathbf{r}}_\parallel) \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \right), \end{aligned}$$

die Matrix $\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}$ enthält neben der Dephasierungsmatrix auch den Hartree-Fock-Anteil der Rabi-Frequenz:

$$\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} = \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} - \frac{i}{\hbar A} \left(f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^{\lambda'} \right) V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{\lambda'\lambda}.$$

Falls kein Feld vorhanden ist ($\tilde{A} = 0$), verschwindet der Term in der zweiten Zeile und nur der Term in der dritten Zeile kann diese Korrelationen erzeugen. Hier taucht der Term

$$\left\langle \hat{P}^\dagger(\tilde{\mathbf{r}}_\parallel) \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel) \right\rangle - P^*(\tilde{\mathbf{r}}_\parallel) \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel)$$

unter einem Ortsintegral auf, für den eine geeignete Näherung gefunden werden muss. Dieser Term beinhaltet Korrelationen der mikroskopischen Polarisation an verschiedenen Orten, welche vernachlässigt werden. Dazu wird der Quantenfilm zunächst in kleinere Quantenfilme aufgeteilt, welche mit i indiziert werden und in denen jeweils die mikroskopische Polarisation konstant ist. Die einzelnen Quantenfilme besitzen die Flächen A_i und Mittelpunkte \mathbf{r}_\parallel^i . Die Polarisation \hat{P} hat die Form

$$\hat{P}(\omega, \mathbf{r}_\parallel^i) = \frac{1}{A_i} \sum_{\mathbf{k}\lambda\lambda'} d_{\lambda\lambda'}(\omega) \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_\parallel^i)$$

und die Bewegungsgleichung für $\pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i)$ lautet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) = & -\frac{i}{\hbar} \left(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \hbar\omega_p \right) \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}}{\hbar} \pi_{\mathbf{k}',p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \\ & + \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}} \sum_j A_j u_p(\mathbf{r}_{\parallel}^j, z_{\text{QW}}) \left(\langle \hat{P}^\dagger(\mathbf{r}_{\parallel}^j) \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \rangle - P^*(\mathbf{r}_{\parallel}^j) \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \right). \end{aligned}$$

Werden die Korrelationen der mikroskopischen Polarisation an verschiedenen Orten vernachlässigt, folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \approx & -\frac{i}{\hbar} \left(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \hbar\omega_p \right) \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}}{\hbar} \pi_{\mathbf{k}',p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \\ & + \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}} u_p(\mathbf{r}_{\parallel}^i, z_{\text{QW}}) \sum_{\mathbf{k}'\lambda''\lambda'''} d_{\lambda''\lambda'''}^*(\omega_p) \left(\langle (\hat{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\lambda''\lambda'''}(\mathbf{r}_{\parallel}^i))^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \rangle - (\psi_{\mathbf{k}'}^{\lambda''\lambda'''}(\mathbf{r}_{\parallel}^i))^* \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \right). \end{aligned}$$

Unter Benutzung der Hartree-Fock-Näherung ergibt der Korrelationsterm

$$\begin{aligned} & \langle (\hat{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\lambda''\lambda'''}(\mathbf{r}_{\parallel}^i))^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \rangle - (\psi_{\mathbf{k}'}^{\lambda''\lambda'''}(\mathbf{r}_{\parallel}^i))^* \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) \\ & = \langle \hat{a}_{\lambda''\lambda'''}^\dagger \hat{a}_{\lambda''\lambda'''} \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle - \langle \hat{a}_{\lambda''\lambda'''}^\dagger \hat{a}_{\lambda''\lambda'''} \rangle \langle \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle \\ & = \delta_{\lambda\lambda''} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \hat{a}_{\lambda''\lambda'''}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle - \langle \hat{a}_{\lambda''\lambda'''}^\dagger \hat{a}_{\lambda''\lambda'''} \rangle \langle \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle - \langle \hat{a}_{\lambda''\lambda'''}^\dagger \hat{a}_{\lambda''\lambda'''} \rangle \langle \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle \\ & \approx \delta_{\lambda\lambda''} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda'\lambda'''} \left[\langle \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle - \langle \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle \langle \hat{a}_{\lambda\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\lambda\lambda'} \rangle \right] \\ & = \delta_{\lambda\lambda''} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda'\lambda'''} f_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}^i) (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}^i)). \end{aligned}$$

Wird dieses Ergebnis in die Bewegungsgleichungen eingesetzt und wird wieder zurück zu ortsabhängigen Größen übergegangen, resultiert

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) \approx & -\frac{i}{\hbar} \left(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \hbar\omega_p \right) \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'}}{\hbar} \pi_{\mathbf{k}',p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) \\ & + \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}} u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) d_{\lambda\lambda'}^*(\omega_p) f_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel})). \end{aligned}$$

Näherungsweise lautet die Lösung der Gleichung

$$\sqrt{\frac{2\omega_p}{\hbar\epsilon_0}} d_{\lambda\lambda'}(\omega_p) \pi_{\mathbf{k},p}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) \approx -i u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \chi_{\text{SE}}^{\lambda\lambda'\mathbf{k}}(\omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}), \quad (3.36)$$

wobei $\chi_{\text{SE}}^{\lambda\lambda'\mathbf{k}}$ hierbei die folgende Gleichung erfüllt:

$$\sum_{\mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\hbar\omega - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda'} + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right) + i \tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda'} \right] \chi_{\text{SE}}^{\lambda\lambda'\mathbf{k}}(\omega, \mathbf{r}_{\parallel}) = -\frac{|p_{\lambda\lambda'}|^2 e^2}{\epsilon_0 m_0^2 \omega} f_{\mathbf{k}}^{\lambda'}(\mathbf{r}_{\parallel}) (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel})).$$

Eingesetzt in die Bewegungsgleichung für die Photonenzahl ergibt sich

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{SE}} = \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}),$$

hierbei ist χ_{SE} das Photolumineszenz-Spektrum und entspricht der Summe

$$\chi_{\text{SE}}(\omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}) = \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}\lambda\lambda'} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\lambda'\mathbf{k}}(\omega, \mathbf{r}_{\parallel}).$$

Dominant sind Beiträge für die λ' ein Leitungsband und λ ein Valenzband indiziert. Wird wie bisher angenommen, dass nur ein Leitungsband für die optischen Prozesse relevant ist, dann lautet die Gleichung für das Photolumineszenz-Spektrum im Elektron-Loch-Bild:

$$\chi_{\text{SE}}(\omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega, \mathbf{r}_{\parallel}),$$

dabei wurde die zweifache Entartung aufgrund des Elektronen-Spins mit dem zusätzlichen Faktor 2 berücksichtigt. Das lineare Gleichungssystem für die Summanden lautet im Elektron-Loch-Bild:

$$\sum_{\mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (\hbar\omega - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^\lambda) + i\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda \right] \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}'}(\omega, \mathbf{r}_{\parallel}) = -\frac{|p_\lambda|^2 e^2}{\epsilon_0 m_0^2 \omega} f_{\mathbf{k}}^e(\mathbf{r}_{\parallel}) f_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}_{\parallel}).$$

Nun wird noch eine Näherung für die Ladungsträger-Verluste durch spontane Emission benötigt. Der entsprechende Anteil zu den Bewegungsgleichungen der Besetzungsfunktionen lässt sich analog zu der Gleichung für die Photonenzahlen herleiten. Das Ergebnis lautet

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}_{\parallel}) \right|_{\text{SE}} = -\text{Im} \left\{ \frac{ep_\lambda}{m_0} \sum_p \sqrt{\frac{2}{\hbar\omega_p \epsilon_0}} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \pi_{\mathbf{k},p}^\lambda(\mathbf{r}_{\parallel}) \right\}.$$

Wird nun wieder das Ergebnis aus Gl. (3.36) verwendet, ergibt sich

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}_{\parallel}) \right|_{\text{SE}} = -\sum_p |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}).$$

Zur Berechnung der Ladungsträger-Verluste muss dementsprechend über alle Moden summiert werden, auch Moden, die für den Laser-Betrieb keine Rolle spielen. Da die Verluste nur näherungsweise behandelt werden sollen, wird nun die Summe für einen unendlich ausgedehnten Quantenfilm ausgeführt, welcher in ein Material mit sehr ähnlicher Dielektrizitätskonstante eingebettet wurde. Eine mögliche Basis für die optischen Moden wären ebene Wellen:

$$\mathbf{u}_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_{\alpha\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

Hierbei wurde mit der Summe α auch berücksichtigt, dass es für jeden Wellenvektor \mathbf{q} zwei mögliche Polarisierungen gibt, welche beide behandelt werden müssen. In diesem Fall wird eine Polarisationsrichtung so gewählt, dass sie parallel zum Quantenfilm ist ($\alpha = 1$). Die andere Polarisationsrichtung ist dementsprechend senkrecht dazu ($\alpha = 2$). Der Verlustterm lautet

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{SE}} = -\frac{1}{V} \sum_{\alpha\mathbf{q}} \text{Im} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega_{\mathbf{q}}) |\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\mathbf{q}}|^2 = -\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int d^3\mathbf{q} \text{Im} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega_{\mathbf{q}}) |\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\mathbf{q}}|^2.$$

Der Faktor $|\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\mathbf{q}}|^2$ beschreibt hier den Einfluss der Polarisationsrichtung. Bisher war dieser Faktor immer gleich 1, da nur TE-Moden betrachtet wurden. Die Frequenzen lauten

$$\omega_{\mathbf{q}} = \frac{c}{n_{\text{QW}}} |\mathbf{q}|,$$

hierbei ist n_{QW} der Brechungsindex des Materials in der Nähe des Quantenfilms. Dieser entspricht näherungsweise dem effektiven Brechungsindex des Moden-Solvers aus Kapitel 2, daher wird im Folgenden der effektive Brechungsindex für n_{QW} verwendet um keinen zusätzlichen Parameter einzuführen. Ein Übergang zu Kugelkoordinaten ergibt

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{SE}} &= -\frac{1}{8\pi^3} \int_0^\infty dq q^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega_{\mathbf{q}}) \int d^2\Omega \sum_{\alpha} |\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\theta}|^2 \\ &= -\frac{n_{\text{QW}}^3}{c^3 8\pi^3} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega) \int d^2\Omega \sum_{\alpha} |\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\theta}|^2. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Übrig bleiben hier ein Integral über alle Frequenzen und ein Winkelintegral, welche beide separat betrachtet werden können. Es wird nun angenommen, dass die Richtung des Impuls-Matrixelements \mathbf{e}_p in der xy -Ebene liegt, sodass die z -Komponente der Polarisationsrichtung nicht beiträgt, wie es zum Beispiel für die zwei energetisch-höchsten Valenzbänder in der Wurtzit-Struktur der Fall ist. Dementsprechend wird $|\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\theta}|^2 = 1$ für $\alpha = 1$ angenommen, und $|\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\theta}|^2 = \cos^2\theta$ für $\alpha = 2$. Hierbei ist θ der Winkel zwischen \mathbf{q} und der z -Achse und die Polarisierung für $\alpha = 2$ ist dementsprechend senkrecht dazu. Das Ergebnis lautet

$$\int d^2\Omega \sum_{\alpha} |\mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_{\alpha\theta}|^2 = 2\pi \int_{-\pi}^{\pi} d\theta (1 + \cos^2\theta) \sin\theta = 4\pi \left(1 + \frac{1}{3}\right).$$

Nun muss noch das Frequenzintegral in Gl. (3.37) betrachtet werden, welches numerisch für \mathbf{k} -Vektor ausgewertet werden kann. Da die Verluste aber nur näherungsweise betrachtet werden sollen, wird eine einfache Näherung für das spontane Emissionsspektrum benutzt:

$$\begin{aligned}\chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega) &\approx -\frac{|p_\lambda^2|e^2}{\epsilon_0 m_0^2 \omega} \frac{f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda}{\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^e - \epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda + i\gamma} \\ \Rightarrow \text{Im} \chi_{\text{SE}}^{\lambda\mathbf{k}}(\omega) &\stackrel{\gamma \rightarrow 0}{\approx} \frac{\pi |p_\lambda^2| e^2}{\epsilon_0 m_0^2 \omega} \delta(\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^e - \epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda) f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda\end{aligned}$$

Hierbei wurde eine einfache Dephasierungskonstante für den Dephasierungsterm verwendet und der Grenzwert für $\gamma \rightarrow 0$ betrachtet. Das Frequenz-Integral kann ausgeführt werden und das Endergebnis lautet

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{SE}} \approx -\frac{2n_{\text{QW}}^3 |p_\lambda|^2 e^2}{3\pi c^3 \epsilon_0 m_0^2 \hbar^2} (\epsilon_{\mathbf{k}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda) f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda.$$

Der Verlustterm für die Besetzungsfunktion der Elektronen ist die Summe über alle Lochbänder:

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^e \right|_{\text{SE}} \approx -\sum_\lambda \frac{2n_{\text{QW}}^3 |p_\lambda|^2 e^2}{3\pi c^3 \epsilon_0 m_0^2 \hbar^2} (\epsilon_{\mathbf{k}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda) f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda.$$

Im Folgenden wird der Vorfaktor zu $B_{\mathbf{k}}^\lambda$ zusammengefasst:

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{SE}} = -B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda, \quad B_{\mathbf{k}}^\lambda = \frac{2n_{\text{QW}}^3 |p_\lambda|^2 e^2}{3\pi c^3 \epsilon_0 m_0^2 \hbar^2} (\epsilon_{\mathbf{k}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda). \quad (3.38)$$

Ähnliche Verlustterme sind auch in der Literatur zu finden, zum Beispiel in Ref. [64]. Die Verluste der Ladungsträgerdichten lauten dementsprechend

$$\left. \frac{d}{dt} n_e \right|_{\text{SE}} = \left. \frac{d}{dt} n_h \right|_{\text{SE}} = -\frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda,$$

dabei wurde die Entartung aufgrund des Elektronen-Spins wieder über einen zusätzlichen Faktor 2 berücksichtigt. In Ratengleichungsmodellen wird oft angenommen, dass die Verluste bezüglich der spontanen Emission quadratisch in der Ladungsträgerdichte sind [115]:

$$\left. \frac{d}{dt} n_{e,h} \right|_{\text{SE}} = -B n_e n_h, \quad (3.39)$$

mit einem wählbaren Parameter B . Mit der in diesem Kapitel vorgestellten Methode wird allerdings kein weiterer Parameter benötigt und es ist möglich die Abhängigkeit der Verluste von der Ladungsträgerdichte genauer zu bestimmen.

Als Beispiel sind in Abb. 3.7 die Spektren der spontanen Emission für verschiedene Ladungsträgerdichten gezeigt. Diese Spektren haben ein Maximum bei Wellenlängen leicht unterhalb der Bandlücke und wie erwartet nimmt die spontane Emission für größere Ladungsträgerdichten zu. Unter Berücksichtigung der Hartree-Fock-Beiträge verschiebt sich das Maximum zu größeren Wellenlängen, da die Bandlücke verkleinert wird. Außerdem scheint sich das Spektrum aus zwei verbreiterten Maxima zusammensetzen. Diese beiden Maxima sind auf exzitonische Effekte zurückzuführen, welche bei der Hartree-Fock-Näherung schon berücksichtigt werden. Ein Maximum gehört hier zum Schwerloch-Exziton, das andere zum Leichtloch-Exziton.

Außerdem sind in Abb. 3.8 die Verluste durch spontane Emission abhängig von der Ladungsträgerdichte gezeigt. Hier spielt es keine Rolle, ob die zusätzlichen Hartree-Fock-Terme berücksichtigt wurden. Diese Verluste nehmen für kleine Ladungsträgerdichten wie in Gl. (3.39) quadratisch zu, für größere Ladungsträgerdichten hingegen sind die Verluste proportional zu $n^{3/2}$. Dies liegt vermutlich an der Form der Elektron-Besetzungsfunktion, welche bei höheren Dichten stark von einer Boltzmann-Verteilung abweicht. Bei den Loch-Besetzungsfunktionen sind aufgrund der höheren effektiven Massen stärkere Abweichungen erst bei noch größeren Ladungsträgerdichten zu erwarten.

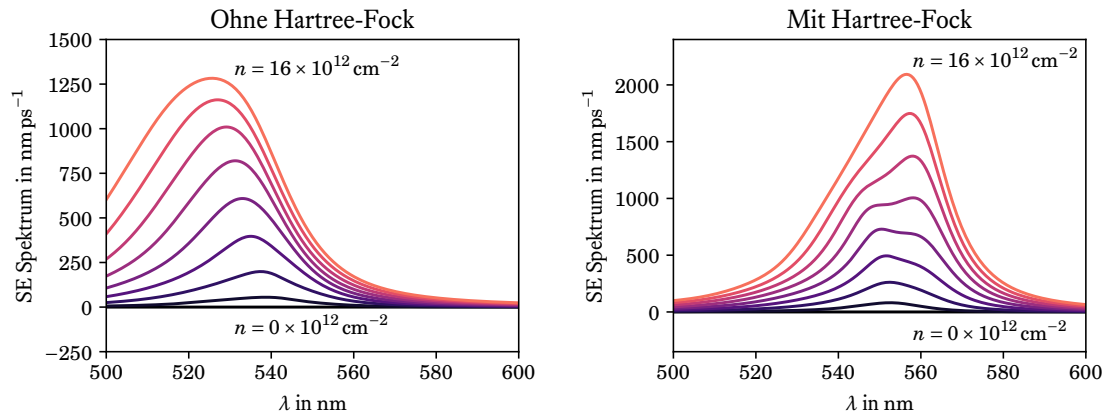


Abbildung 3.7: Spektren der spontanen Emission für verschiedene Ladungsträgerdichten, mit und ohne Berücksichtigung der Hartree-Fock-Beiträge. Hierbei wurde die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur aus Abb. 3.2, Coulomb-Streuung mit dynamischer Abschirmung und Streuung mit optischen Phononen berücksichtigt, siehe auch Tabelle 9.12 im Anhang.

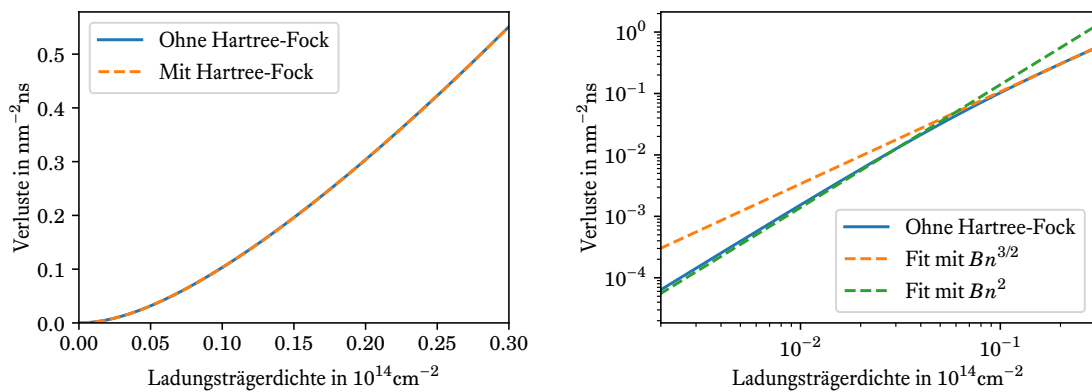


Abbildung 3.8: (Links) Ladungsträgerverluste durch spontane Emission für verschiedene Ladungsträgerdichten, mit und ohne Berücksichtigung der Hartree-Fock Beiträge. (Rechts) Vergleich mit zwei verschiedenen Fit-Funktionen mit unterschiedlichen Potenzen.

Kapitel 4

Modendynamik mit einfachem Pumpterm

In den Betrachtungen der vorherigen Kapitel wurde bisher nur die Kopplung der Elektronen und Löcher mit dem elektromagnetischen Feld betrachtet. Zur Beschreibung einer Laserdiode ist es allerdings notwendig zu wissen, wie die Ladungsträger von den Kontakten in den Quantenfilm gelangen. Außerdem müssen Ladungsträgerdichteverluste, die nicht mit dem elektromagnetischen Feld zusammenhängen, berücksichtigt werden. In diesem Kapitel werden zunächst diese zusätzlichen Terme diskutiert und das gesamte System von Bewegungsgleichungen angegeben. Numerisch ist die Lösung immer noch aufwendig, daher werden anhand eines möglichst einfachen Beispiels verschiedene Näherungen miteinander verglichen. Für dieses einfache Beispiel soll außerdem das Verhalten der Modendynamik untersucht werden.

4.1 Zusätzliche Terme in den Bewegungsgleichungen

Bei einer Laserdiode werden die Quantenfilme elektrisch gepumpt. Hierbei bewegen sich die Ladungsträger durch die Diode zu den Quantenfilmen, wo sie durch Elektronen-Phononen-Streuung in die einzelnen Quantenfilm-Niveaus gelangen. Ein einfaches Modell dafür hat die Form [116]

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} \right|_{\text{Pump}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{j}{e} (1 - f_{\mathbf{k}}) \frac{f_{\mathbf{k}}^{\text{Pump}}}{n_{\text{Pump}}}.$$

In diesem Term spielen die Stromdichte j und die Injektions-Effizienz η_{inj}^0 eine Rolle. Diese Effizienz wird benötigt, da es auch Ladungsträgerverluste in anderen Teilen der Laserdiode gibt und nur ein bestimmter Anteil davon in den Quantenfilm gelangen. Es ist möglich, dass diese Effizienz auch von der Stromdichte abhängt, dies wird in diesem Kapitel jedoch vernachlässigt. Da hier die Besetzungsfunktionen betrachtet werden und nicht die Ladungsträgerdichten selber, ist es notwendig die Elektronen und Löcher auf die verschiedenen Wellenvektoren \mathbf{k} aufzuteilen. Hierzu wird eine Fermiverteilung $f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}$ benutzt, welche hierbei die Fermi-Dirac-Verteilung der Bulk-Ladungsträger in der Nähe der Quantenfilme darstellen soll. Sie hängt ab von einer Temperatur und einer Dichte n_{Pump} . Außerdem muss gewährleistet werden, dass die Besetzungen nie größer als eins werden, dies wird durch den zusätzlichen Pauli-Faktor $(1 - f_{\mathbf{k}})$ gewährleistet.

Da die Wellenvektoren im Quantenfilm \mathbf{k} zweidimensional sind und die Wellenvektoren im Bulk-Material \mathbf{k}_{3D} dreidimensional, wird die Gleichung oben entsprechend modifiziert, sodass über die Komponente senkrecht zum Quantenfilm summiert wird:

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} \right|_{\text{Pump}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{j}{e} \frac{1}{L_z} \sum_{k_{\perp}} (1 - f_{\mathbf{k}}) \frac{f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}{n_{\text{Pump}}} = \eta_{\mathbf{k}} \frac{j}{e} (1 - f_{\mathbf{k}}).$$

Die Länge L_z ist hierbei beliebig und bildet zusammen mit der Summe ein Integral über k_{\perp} . Die Bulk-Besetzungsfunktion wurde mit anderen Faktoren zu $\eta_{\mathbf{k}}$ zusammengefasst. Eine Summation über alle Wellenvektoren ergibt die entsprechende Änderung der Ladungsträgerdichten:

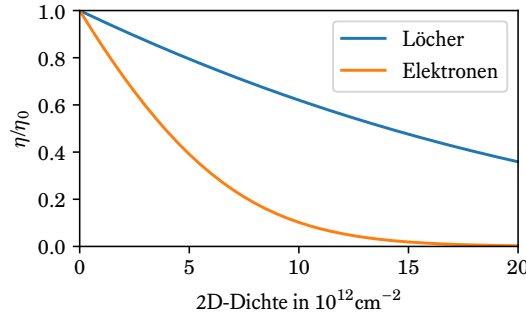


Abbildung 4.1: Die Abhängigkeit der Injektions-Effizienz η von der Ladungsträgerdichte in den Quantenfilmen aus Gl. (4.2) mit den Parametern aus Tab. (9.10).

$$\left. \frac{d}{dt} n \right|_{\text{Pump}} = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} \right|_{\text{Pump}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{j}{e} \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{3D}} (1 - f_{\mathbf{k}}) \frac{f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}{n_{\text{Pump}}} = \eta_{\text{inj}} \frac{j}{e}. \quad (4.1)$$

Hierbei wurden die Faktoren mit den Besetzungsfaktoren in einer neuen Effizienz η_{inj} zusammengefasst

$$\eta_{\text{inj}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{3D}} (1 - f_{\mathbf{k}}) \frac{f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}{n_{\text{Pump}}} \quad (4.2)$$

Befinden sich keine Ladungsträger im Quantenfilm, $f_{\mathbf{k}} = 0$ für alle \mathbf{k} , entspricht η_{inj} gerade η_{inj}^0 . Ein Beispiel für die Abhängigkeit der Effizienz von der Ladungsträgerdichte ist in Abb. 4.1 gezeigt. Hier wurden effektive Massen für die Bandstruktur des Quantenfilms und des Bulk-Materials angenommen, mit den Parametern aus Tabelle 9.10 im Anhang. Da die Masse der Löcher größer ist, ist die Effizienz dort größer, da hier die Besetzungen mehr verteilt sind als bei Elektronen. Dies führt zu unterschiedlichen Elektronen- und Lochdichten im Quantenfilm, daher wird in diesem Kapitel die Effizienz für Elektronen und Löcher festlegen, sodass die Effizienz nicht mehr von der Dichte abhängt. Deshalb soll gelten

$$\left. \frac{d}{dt} n \right|_{\text{Pump}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{j}{e}.$$

Die Faktoren $\eta_{\mathbf{k}}$ müssen demnach folgendermaßen modifiziert werden:

$$\eta_{\mathbf{k}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{\frac{1}{L} \sum_{k_{\perp}} \frac{f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}{n_{\text{Pump}}}}{\frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{3D}} (1 - f_{\mathbf{k}}) \frac{f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}{n_{\text{Pump}}}} = \eta_{\text{inj}}^0 \frac{\frac{1}{L} \sum_{k_{\perp}} f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}{\frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{3D}} (1 - f_{\mathbf{k}}) f_{\mathbf{k}_{3D}}^{\text{Pump}}}. \quad (4.3)$$

Bei den nichtstrahlenden Verlusten der Ladungsträger werden normalerweise zwei Effekte berücksichtigt: Shockley-Read-Hall-Rekombination [117] (SRH) und Auger-Rekombinationen. In diesem und dem nächsten Kapitel wird zunächst nur die SRH-Rekombination behandelt, hierbei rekombinieren Ladungsträger unter Benutzung von Fehlstellen und Elektronen-Phonon-Streuung. Dazu wird ein Term der Form [64]

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} \right|_{\text{SRH}} = -\frac{f_{\mathbf{k}}}{\tau_{\text{nr}}}$$

verwendet, hierbei ist die Rekombinationszeit τ_{nr} ein zu bestimmender Parameter.

4.2 Photonenverluste und Leistung

Bisher wurden nur die Verluste der Ladungsträger diskutiert, allerdings sind die Verluste von Photonen auch sehr wichtig für die Laserdynamik. Zum einen werden Photonen innerhalb der Laserdiode absorbiert, zum

anderen verlassen die Photonen die Laserdioden an den teilweise durchlässigen Spiegeln auf den beiden Seiten des Resonators. Die Spiegel-Verluste auf der einen Seite entsprechen auch dem Output des Lasers. Die Verluste innerhalb der Diode werden auch als intrinsische Verluste bezeichnet und durch eine konstante Absorption α_{int} beschrieben. Die Spiegelverluste können mithilfe der Round-Trip-Bedingung beschrieben werden [116]:

$$1 = e^{L(g-\alpha_{\text{int}})} R_2 e^{L(g-\alpha_{\text{int}})} R_1 = R_1 R_2 e^{2L(g-\alpha_{\text{int}})},$$

welche ausdrückt, dass sich die Intensität im “continuous wave” (CW) Betrieb bei einem Umlauf nicht ändert. Hierbei ist g der Gain innerhalb der Diode, R_1 und R_2 sind Reflektivitäten der beiden Spiegel und L ist die Länge der Laserdiode bzw. des Resonators. Schreiben wir

$$R_1 R_2 = e^{-2L\alpha_{\text{Spiegel}}} \Rightarrow \alpha_{\text{Spiegel}} = -\frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2),$$

dann lautet die Round-Trip-Bedingung

$$1 = e^{2L(g-\alpha_{\text{int}}-\alpha_{\text{Spiegel}})} = e^{2L(g-\alpha)},$$

mit den gesamten Verlusten α . Um die zeitliche Änderung der Photonenzahl durch die Verluste zu erhalten, muss diese Absorption mit der Gruppengeschwindigkeit multipliziert werden:

$$\left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{Verluste}} = -v_{\text{gr}} \alpha S_p = -\frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}},$$

mit der Lebensdauer der Photonen τ_{photon}

$$\tau_{\text{photon}} = \frac{1}{v_{\text{gr}} \alpha} = \frac{n_{\text{gr}}}{c \alpha}. \quad (4.4)$$

In der Simulation werden die Bewegungsgleichungen der Photonenzahlen numerisch gelöst, die Photonenzahlen sind dementsprechend zu jedem Zeitpunkt bekannt. Eine wichtige Größe bei einem Laser ist allerdings auch die Ausgangsleistung, also die Energie der Photonen, welche die Laserdiode in einem bestimmten Zeitintervall durch einen der beiden Spiegel verlassen. Wird angenommen, dass R_2 die Reflektivität dieses Spiegel ist, dann sind die Verluste nur für diesen Spiegel

$$\left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{Spiegel}} = -\frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_2} v_{\text{gr}} S_p.$$

Jedes Photon hat eine Energie von $\hbar\omega_p$, daher lautet die gesamte Leistung P des Lasers

$$P = -\sum_p \hbar\omega_p \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{Spiegel}} = \sum_p \frac{\hbar\omega_p c}{2L n_{\text{gr}}} \ln \frac{1}{R_2} S_p$$

und kann zu jedem Zeitpunkt aus den Photonenzahlen berechnet werden.

4.3 Zusammenstellen der Bewegungsgleichungen

Um das endgültige System von Bewegungsgleichungen zu erhalten, werden alle Terme aus den vorherigen Kapiteln zusammengeführt. Das Ergebnis lautet:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= i\Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}}, \\
\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^e &= 2 \sum_{\lambda} \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} (\Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda})^* \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^e (1 - f_{\mathbf{k}}^e) - \sum_{\lambda} B_{\mathbf{k}}^{\lambda} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \frac{f_{\mathbf{k}}^e}{\tau_{\text{nr}}} + \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^e \right|_{\text{Streu}}, \\
\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= 2 \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} (\Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda})^* \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}) - B_{\mathbf{k}}^{\lambda} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\tau_{\text{nr}}} + \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}}, \\
\frac{d}{dt} B_p &= -i\omega_p B_p + \sqrt{\frac{\omega_p}{2\hbar\epsilon_0}} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega_p) - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}}, \\
\frac{d}{dt} S_p &= \text{Re} \left\{ B_p^* \sqrt{\frac{2\omega_p}{\hbar\epsilon_0}} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega_p) \right\} - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} \\
&\quad + \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}), \\
P(\mathbf{r}_{\parallel}, \omega) &= - \sum_{\lambda} \frac{ie p_{\lambda}}{\omega m_0} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{r}_{\parallel}), \\
\hbar \Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda} &= - \frac{ep_{\lambda}^*}{m_0} \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p \epsilon_0}} B_p u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) + \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{c\lambda} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda}, \tag{4.5}
\end{aligned}$$

mit den Hartree-Fock-Energien

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda} f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda}.$$

In der klassischen Betrachtung des elektromagnetischen Feldes sind die Modenkoeffizienten komplexe Zahlen und es gibt keine spontane Emission. Soll die spontane Emission dennoch berücksichtigt werden, muss in der Bewegungsgleichung der Modenkoeffizienten ein Term hinzugefügt werden, welcher mit dem entsprechenden Term in den Bewegungsgleichungen der Photonenzahlen übereinstimmt. Eine Möglichkeit ist

$$\left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}} = \frac{1}{2} \frac{B_p}{S_p} \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{SE}} \Rightarrow \left. \frac{d}{dt} B_p^* B_p \right|_{\text{SE}} = \frac{1}{2} \left(\frac{B_p^* B_p}{S_p} + \frac{B_p B_p^*}{S_p} \right) \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{SE}} = \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{SE}}. \tag{4.6}$$

Dies ist natürlich eine grobe Näherung und um die spontane Emission genau zu beschreiben ist eine quantenoptische Betrachtung notwendig. In Abb. 4.2 ist das System von Bewegungsgleichungen schematisch dargestellt. Dabei regen die Besetzungsfunktionen zusammen mit den Modenkoeffizienten die mikroskopischen Polarisationen an, diese bewirken zusammen mit dem Feld wiederum eine Änderung der Besetzungsfunktionen bzw. der Modenkoeffizienten, was den Prozess der stimulierten Emission darstellt. Mit der Näherung für die spontane Emission werden die Modenkoeffizienten bzw. die Photonenzahlen direkt durch die Besetzungsfunktionen angeregt.

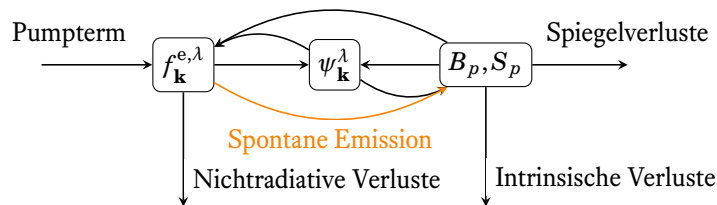


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Bewegungsgleichungen (4.5).

4.4 Vereinfachungen in diesem Kapitel

In diesem Kapitel soll im Folgenden zunächst die Wechselwirkung der verschiedenen longitudinalen Moden an einem möglichst einfachen Beispiel diskutiert werden. Dementsprechend sollen nur die unbedingt notwendigen Terme in den Bewegungsgleichungen benutzt werden. Daher werden die Hartree-Fock-Korrekturen im

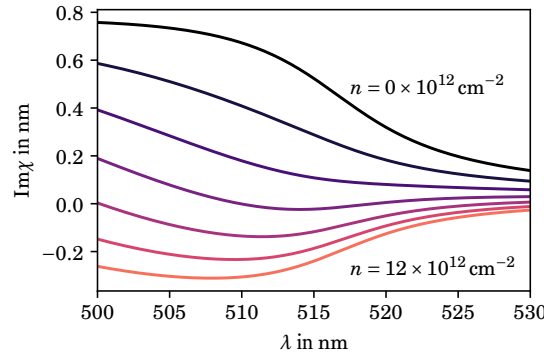


Abbildung 4.3: Imaginärteil der Suszeptibilität mit den Parametern aus Tabelle 9.10 im Anhang für verschiedene Ladungsträgerdichten. Aufgrund der konstanten Dephasierungskonstante ist bei höheren Ladungsträgerdichten der Imaginärteil für Energien unterhalb der Bandlücke leicht positiv.

Folgenden nicht weiter berücksichtigt, außerdem werden die Streuterme möglichst einfach gehalten. Zur Beschreibung der Dephasierung wird eine einfache Dephasierungskonstante γ verwendet:

$$\left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}} \right|_{\text{Streu}} = -\frac{\gamma}{\hbar} \psi_{\mathbf{k}}.$$

Außerdem wird zur Beschreibung der Streuung eine einfache Streuzeit τ_s eingesetzt:

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}} \right|_{\text{Streu}} = -\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^{\text{FD}}}{\tau_s}.$$

Hierbei wird zunächst nur die Elektronen-Phononen-Streuung berücksichtigt, daher ist $f_{\mathbf{k}}^{\text{FD}}$ die Fermi-Dirac-Verteilung mit derselben Dichte wie $f_{\mathbf{k}}$ und der Gittertemperatur. Des Weiteren ist es ausreichend, nur ein Leitungsband und ein Valenzband in der Dynamik zu berücksichtigen, daher kann der Index λ nur einen Wert annehmen. Der Index λ wird dementsprechend wenn möglich weggelassen und alle Größen, welche die Löcher betreffen, werden mit h indiziert. Für die Bandstruktur wird die Näherung der effektive Massen verwendet, die genauen Parameter werden in der Tabelle 9.10 im Anhang beschrieben. Der Imaginärteil der Suszeptibilität, welcher die optische Verstärkung bestimmt, ist für diese Parameter in Abb. 4.3 gezeigt.

Da in diesem Kapitel nur die longitudinalen Effekte diskutiert werden sollen, werden für die x -Abhängigkeiten der verschiedenen Größen bestimmte Annahmen getroffen. Dazu wird angenommen, dass die Besetzungsfunktionen nur unterhalb des Stegs von Null verschieden sind und in x -Richtung gemittelt werden:

$$\bar{f}_{\mathbf{k}}(y) = \frac{1}{w} \int_{-w/2}^{w/2} dx f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}),$$

w ist hierbei die Stegbreite und mit $\bar{f}_{\mathbf{k}}$ werden die *gemittelten Besetzungsfunktionen* bezeichnet. Außerdem wird angenommen, dass die Modenfunktionen folgermaßen in einen longitudinalen und einen transversalen Anteil aufteilen lassen:

$$u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) = t(x)g_p(y).$$

Dies führt zu dem folgenden Ansatz für die mikroskopischen Polarisationen:

$$\sqrt{\frac{2e^2}{m_0^2 \hbar \epsilon_0}} p_h \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{\parallel}) = t(x) \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}(y).$$

Die Vorfaktoren wurden hierbei so gewählt, dass die daraus entstehenden Bewegungsgleichungen möglichst einfach gehalten werden. Diese haben die Form

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} &\approx -i \sum_p \frac{e^2 |p_h|^2}{m_0^2 \epsilon_0 \hbar \sqrt{\omega_p}} B_p g_p(y) (1 - \tilde{f}_{\mathbf{k}}^h - \tilde{f}_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\mathbf{k}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^h) \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} - \frac{\gamma}{\hbar} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}, \\
\frac{d}{dt} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\alpha &\approx -\frac{I_t}{w} \sum_p \frac{1}{\sqrt{\omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p^* g_p^*(y) \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\alpha (1 - \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\alpha) - B_{\mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^e \tilde{f}_{\mathbf{k}}^h - \frac{\tilde{f}_{\mathbf{k}}^\alpha}{\tau_{\text{nr}}} - \frac{\tilde{f}_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^{\alpha, \text{FD}}}{\tau_s}, \\
\frac{d}{dt} B_p &= -i \omega_p B_p - \frac{i I_t}{2 \sqrt{\omega_p}} \int dy g_p^*(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}}, \\
\frac{d}{dt} S_p &= \frac{I_t}{\sqrt{\omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p^* \int dy g_p^*(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} \right\} - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p).
\end{aligned}$$

Dabei wurden verschiedene Näherungen benutzt, beispielsweise wurde der Term $-B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^h$, welcher die Verluste durch spontane Emission beschreibt, durch den gemittelten Term $-B_{\mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^e \tilde{f}_{\mathbf{k}}^h$ ersetzt. Dies ist nur eine gute Näherung wenn Abweichungen von den gemittelten Besetzungsfunktionen klein genug sind. Der Vorfaktor I_t bestimmt hierbei die Wechselwirkung von Quantenfilm und Feld:

$$I_t = \int_{-w/2}^{w/2} dx |t(x)|^2. \quad (4.7)$$

Es ist möglich, den Faktor I_t näherungsweise durch den Confinement-Faktor Γ ausdrücken:

$$\begin{aligned}
I_t &= \int_{-w/2}^{w/2} dx |t(x)|^2 = \int_{\text{QW}} d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |\mathbf{u}_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \approx \frac{1}{d_{\text{QW}}} \int_{\text{QW}} d^3 \mathbf{r} |\mathbf{u}_p(\mathbf{r})|^2 \\
&= \frac{1}{d_{\text{QW}}} \frac{\int_{\text{QW}} d^3 \mathbf{r} |\mathbf{u}_p(\mathbf{r})|^2}{\int d^3 \mathbf{r} |\mathbf{u}_p(\mathbf{r})|^2 \epsilon(\mathbf{r})} \approx \frac{1}{d_{\text{QW}} n_{\text{eff}}^2} \frac{\int_{\text{QW}} d^3 \mathbf{r} |\mathbf{u}_p(\mathbf{r})|^2}{\int d^3 \mathbf{r} |\mathbf{u}_p(\mathbf{r})|^2} = \frac{\Gamma}{d_{\text{QW}} n_{\text{eff}}^2}.
\end{aligned}$$

Als letzten Schritt werden die Polarisierungen noch zusätzlich mit I_t skaliert und das Ergebnis zur besseren Übersicht wieder mit $\psi_{\mathbf{k}}$ bezeichnet. Genauso werden die gemittelten Besetzungen $\tilde{f}_{\mathbf{k}}$ in $f_{\mathbf{k}}$ umbenannt, das resultierende Gleichungssystem lautet

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}} &\approx -i \sum_p C_h I_t \frac{1}{\hbar \sqrt{\omega_p}} B_p g_p(y) (1 - f_{\mathbf{k}}^h - f_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\mathbf{k}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^h) \psi_{\mathbf{k}} - \frac{\gamma}{\hbar} \psi_{\mathbf{k}}, \\
\frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\alpha &\approx -\frac{1}{w} \sum_p \frac{1}{\sqrt{\omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p^* g_p^*(y) \psi_{\mathbf{k}} \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^\alpha) - B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^h - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha}{\tau_{\text{nr}}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^{\alpha, \text{FD}}}{\tau_s}, \\
\frac{d}{dt} B_p &= -i \omega_p B_p - \frac{i}{2 \sqrt{\omega_p}} \int dy g_p^*(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(y) - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}}, \\
\frac{d}{dt} S_p &= \frac{1}{\sqrt{\omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p^* \int dy g_p^*(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(y) \right\} - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p). \quad (4.8)
\end{aligned}$$

Einige Konstanten wurden hierbei in der Kopplungskonstanten C_h zusammengefasst:

$$C_h = \frac{|p_h|^2 e^2}{m_0^2 \epsilon_0}.$$

4.5 Adiabatische Eliminierung der mikroskopischen Polarisation

Ein Problem in der numerischen Lösung der Bewegungsgleichungen ist die mikroskopische Polarisation $\psi_{\mathbf{k}}$. Deren Komponenten oszillieren näherungsweise mit der dazugehörigen Übergangsenergie bei \mathbf{k} :

$$\psi_{\mathbf{k}} \propto e^{-\frac{i}{\hbar} t (\epsilon_{\mathbf{k}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^h)}$$

Die Periode diese Oszillationen liegt hierbei in der Größenordnung von Femtosekunden, was die direkte numerische Lösung erschwert, da die Prozesse, die hier von Interesse sind, eher auf einer Nanosekunden-Zeitskala ablaufen. Eine erste Möglichkeit, um diese Oszillation zu reduzieren, ist folgende Transformation: die

Energie E_0 wird hierbei in der Nähe der Bandlücke gewählt. Die einzelnen Komponenten oszillieren aber weiterhin mit der Frequenz $\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h - E_0$, welche immer noch hinreichend groß sein kann. Da sich in der Laserdiode die Felder und Quantenfilm-Dichten auf einer Nanosekunden-Skala ändern, kann es hilfreich sein, die Bewegungsgleichung für die mikroskopische Polarisation näherungsweise zu lösen, sodass nur noch die Bewegungsgleichungen für die Quantenfilm-Besetzungsfunktionen und Photonenzahlen gelöst werden müssen. Dazu wird die Bewegungsgleichung für die Polarisation aus Gl. (4.8) folgendermaßen umgeschrieben:

$$\frac{d}{dt} e^{i\frac{\hbar}{\hbar}t(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h + i\gamma)} \psi_{\mathbf{k}} \approx -e^{-i\frac{\hbar}{\hbar}t(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h + i\gamma)} i \sum_p C_h I_t \frac{1}{\hbar\sqrt{\omega_p}} B_p g_p(y) (1 - f_{\mathbf{k}}^h - f_{\mathbf{k}}^e)$$

Unter der Annahme, dass die Änderungen der Ladungsträgerdichten und Photonenzahlen auf der Zeitskala der Dephasierungszeit $\tau = \frac{\hbar}{\gamma}$ klein sind, liefert eine Integration über die Zeit:

$$\psi_{\mathbf{k}} \approx \sum_p \frac{C_h I_t}{\sqrt{\omega_p}} g_p(y) B_p \frac{1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^h}{\hbar\omega_p + i\gamma - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h} = -\sum_p \frac{C_h I_t}{\sqrt{\omega_p}} g_p(y) B_p \chi_{\mathbf{k}}(\omega_p).$$

Wird im Folgenden von einer *adiabatischen Eliminierung* der Polarisation gesprochen, ist damit die Verwendung der obigen Formel gemeint. Die Größe $\chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ ist dabei der Beitrag zur Suszeptibilität, der zum Wellenvektor \mathbf{k} gehört, siehe auch Gl. (3.34):

$$\chi_{\mathbf{k}}(\omega) = -\frac{1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^h}{\hbar\omega + i\gamma - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h}. \quad (4.9)$$

Ein Einsetzen dieser Polarisation in die Bewegungsgleichungen liefert

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\alpha &= \frac{C_h I_t}{\omega} \sum_{pq} \frac{1}{\sqrt{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_{\mathbf{k}}(\omega_p) g_p(y) g_q^*(y) \right\} \\ &\quad + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^\alpha) - B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^h - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha}{\tau_{nr}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^{\alpha, \text{FD}}}{\tau_s}, \\ \frac{d}{dt} B_p &= +\frac{i}{2} C_h I_t \sum_q B_q \frac{1}{\sqrt{\omega_p \omega_q}} \int_0^L dy g_p^*(y) g_q(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}(\omega_q) \\ &\quad - i\omega_p B_p - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}}, \\ \frac{d}{dt} S_p &= -C_h I_t \sum_q \text{Im} \left\{ B_p^* B_q \frac{1}{\sqrt{\omega_p \omega_q}} \int_0^L dy g_p^*(y) g_q(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}(\omega_q) \right\} \\ &\quad - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p). \end{aligned}$$

Im Folgenden soll der Einfluss dieser Näherung auf die Laserdynamik für verschiedene Parameter diskutiert werden. Dazu wird zunächst nur eine longitudinale Mode betrachtet. In der obigen Gleichung spielt nur In diesem Fall spielt in den obigen Gleichungen nur das Betragsquadrat $|g_p(y)|^2$ eine Rolle. Dementsprechend wird hier der möglichst einfache Fall $g_p(y) = \frac{1}{\sqrt{L}}$ gewählt, sodass die Normalisierungsbedingung

$$\int_0^L dy |g_p(y)|^2 = 1$$

erfüllt wird. Mit diese Modenfunktion hängen die mikroskopische Polarisation und die Besetzungsfunktionen nicht mehr von y ab und die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\alpha &= \frac{C_h I_t S}{\omega} \frac{1}{L\omega} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega) + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^\alpha) - B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^h - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha}{\tau_{nr}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^{\alpha, \text{FD}}}{\tau_s}, \\ \frac{d}{dt} S &= -\frac{C_h I_t S}{\omega} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}(\omega) - \frac{S}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega), \end{aligned}$$

dabei ist S die Photonenzahl in der einzigen Mode. Wird die Näherung der adiabatischen Elimination nicht verwendet, lautet das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\psi_{\mathbf{k}} &= -iC_h I_t \frac{1}{\hbar\sqrt{\omega}} B \left(1 - f_{\mathbf{k}}^h - f_{\mathbf{k}}^e\right) - \frac{i}{\hbar} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h\right) \psi_{\mathbf{k}} - \frac{\gamma}{\hbar} \psi_{\mathbf{k}}, \\ \frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^\alpha &= -\frac{1}{\omega L} \frac{1}{\sqrt{\omega}} \text{Im} \{B^* \psi_{\mathbf{k}}\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\alpha (1 - f_{\mathbf{k}}^\alpha) - B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^h - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha}{\tau_{nr}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^{\alpha,FD}}{\tau_s}, \\ \frac{d}{dt}B &= -i\omega B - \frac{i}{2} \frac{1}{\sqrt{\omega}} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(y) - \frac{1}{2} \frac{B}{\tau_{\text{photon}}} + \frac{d}{dt}B \Big|_{SE}, \\ \frac{d}{dt}S &= \frac{1}{\sqrt{\omega}} \text{Im} \left\{ B^* \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(y) \right\} - \frac{S}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \text{Im} \chi_{SE}(\omega).\end{aligned}$$

In Abb. 4.5 wird die Näherung mit der genaueren Lösung für verschiedene Dephasierungskonstanten verglichen. Abweichungen lassen sich hier nur für Dephasierungskonstanten unterhalb von 2 meV beobachten. Allerdings ist die Dephasierung für Halbleiter im Laser aufgrund von Coulomb- und Elektron-Phonon-Streuung wesentlich größer, daher scheint diese Näherung für Simulation von Laserdioden gerechtfertigt.

In Abb. 4.4 ist der Imaginärteil der Suszeptibilität für die verwendeten Dephasierungskonstanten und eine verschwindende Ladungsträgerdichte gezeigt. In diesem Fall folgt aus Gl.(4.9):

$$\text{Im} \chi(\omega) = \frac{2}{A} \frac{C_h}{\omega^2} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{2}{A} \frac{C_h}{\omega^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma}{(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h)^2 + \gamma^2} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \frac{C_h}{\omega^2} \frac{2\pi}{A} \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h)}_{I(\omega)}. \quad (4.10)$$

Dementsprechend ist der Imaginärteil für $\gamma \rightarrow 0$ proportional zur Zustandsdichte $I(\omega)$. Unter Verwendung der Näherung der effektiven Massen entspricht die Zustandsdichte in zwei Dimensionen einer Stufenfunktion. Dieses Verhalten ist in Abb. 4.8 sichtbar, allerdings sind für kleine Wellenlängen und kleine Dephasierungskonstanten Oszillationen sichtbar. Dies liegt an der Lorentz-Funktion in Gl. (4.10), deren Breite sehr klein wird und daher mit der gewählten Diskretisierung nicht mehr gut genug aufgelöst werden kann.

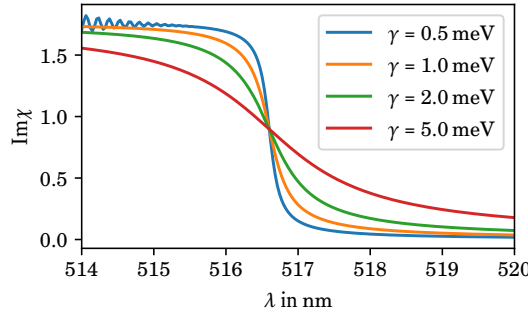


Abbildung 4.4: Imaginärteil der Suszeptibilität für verschiedene kleine Dephasierungskonstanten bei einer verschwindenden Ladungsträgerdichte.

4.6 Ratengleichungen

Wird die mikroskopische Polarisation wie in Kapitel 4.5 adiabatisch eliminiert, sind die Bewegungsgleichungen unter der Annahme von Streuzeiten und einfacher Dephasierung gut numerisch lösbar auf einer Nanosekunden-Zeitskala. Allerdings findet die Modendynamik auf einer Mikrosekunden-Zeitskala statt, wo sich die numerische Lösung weiterhin aufwendig gestaltet. Noch schwieriger wird es, wenn realistische Streuprozesse betrachtet werden sollen, wo sich die numerische Rechenzeit in jedem Zeitschritt vervielfacht.

Eine Möglichkeit für eine weitere Vereinfachung ist die Annahme von Gleichgewichtsverteilungen für die Besetzungsfunktionen. Die entsprechenden Fermi-Dirac-Verteilungen hängen von zwei Parametern ab: der Ladungsträgerdichte und der Temperatur. Effekte, die durch kleine Abweichungen von der Fermi-Dirac-

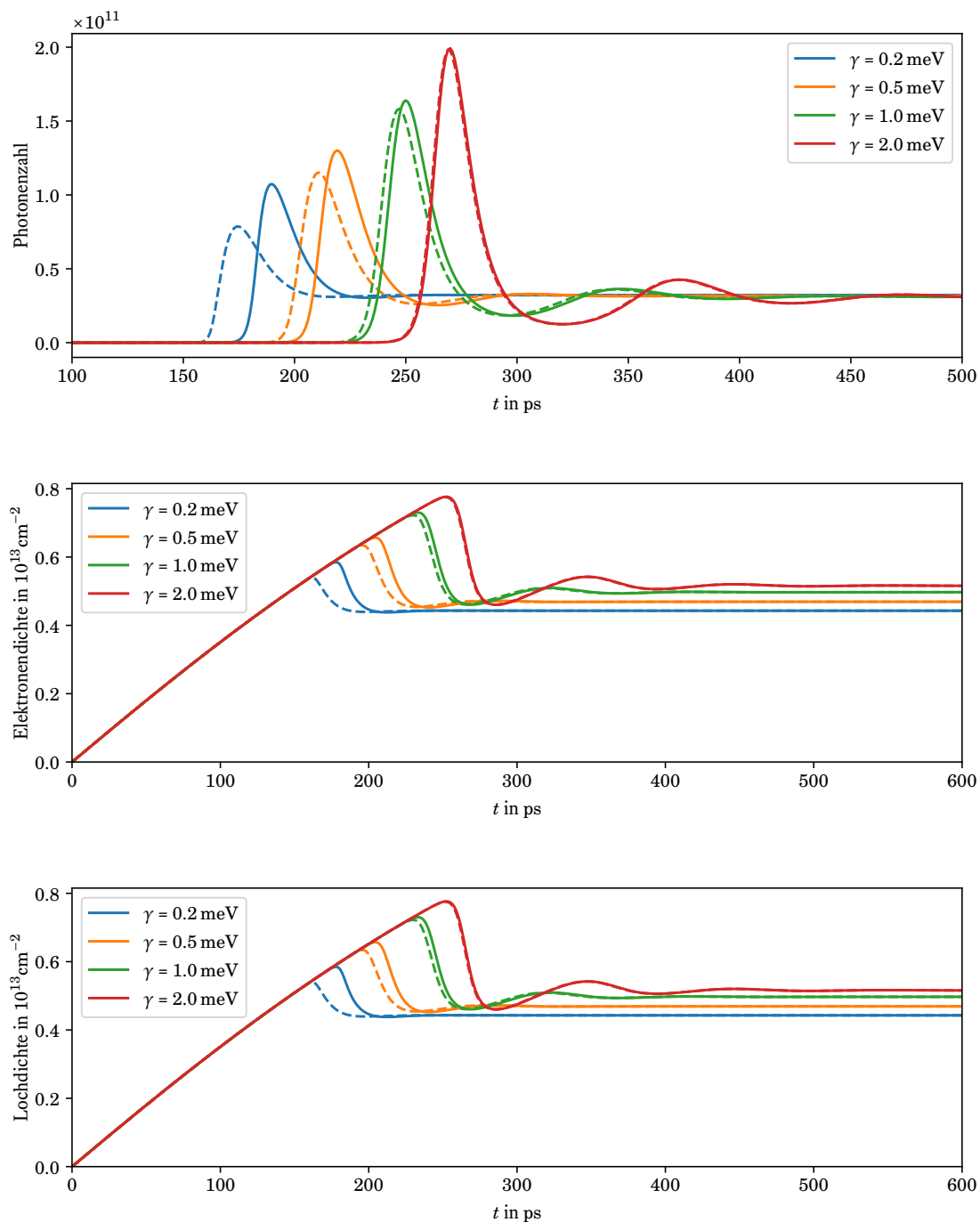


Abbildung 4.5: Um den Einfluss der adiabatischen Eliminierung darzustellen, wurden hier Lasersimulationen für einen Strom von 100 mA mit verschiedenen Dephasierungskonstanten durchgeführt. Hierbei wurde nur eine longitudinale Mode mit einer Wellenlänge von 511.75 nm betrachtet. Gezeigt werden hier die Zeitabhängigkeiten der Anzahl der Photonen in der Laserdiode, der Elektronendichte und der Lochdichte im Quantenfilm. Bei den durchgezogenen Linien wurde die Bewegungsgleichung für die mikroskopische Polarisation mit gelöst, während bei den gestrichelten Linien die adiabatische Eliminierung benutzt wurde.

Verteilung entstehen, können weiterhin näherungsweise beschrieben werden, dies wird genauer in Kapitel 5 diskutiert. Für die Temperatur der Ladungsträger wird die Gittertemperatur verwendet, welche in diesem Kapitel als konstant angenommen wird. Der längere Betrieb einer Laserdiode führt im Experiment zu einer Erwärmung [118], dieser Effekt könnte an dieser Stelle über eine zeitabhängige Temperatur berücksichtigt werden. Im Folgenden soll jedoch nur die Dynamik der Ladungsträgerdichten betrachtet werden. Die zeitliche Änderung dieser Ladungsträgerdichte folgt aus einer entsprechenden Summe über die Änderungen der Besetzungsfunktion:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_\alpha &= \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\alpha = -\frac{1}{w} \sum_p \frac{1}{\sqrt{\omega_p}} \operatorname{Im} \left\{ B_p^* g_p^*(y) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \right\} + \frac{j}{e} \eta^\alpha (n_\alpha) - B(n_h, n_e) - \frac{n_\alpha}{\tau_{nr}} \\ &\approx \frac{I_t}{w} \sum_{pq} \sqrt{\omega_q \omega_p} \operatorname{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi(\omega_p, n_e, n_h) g_p(y) g_q^*(y) \right\} + \frac{j}{e} \eta^\alpha (n_\alpha) - B(n_h, n_e) - \frac{n_\alpha}{\tau_{nr}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die Streuterme tauchen hier nicht auf, da sie die Ladungsträgerdichte nicht ändern. Hierbei wurde die Suszeptibilität aus Gl. (3.35) verwendet:

$$\chi(\omega, n_e, n_h) = \frac{C_h}{\omega^2} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}(\omega).$$

Um die Annahme von Fermi-Dirac-Verteilungen zu überprüfen, sind in Abb. 4.6 die Gleichgewichtsverteilungen für verschiedene Streuzeiten gezeigt. Dabei wurde wieder nur eine longitudinale Mode berücksichtigt. Hier lassen sich deutliche Abweichungen nur bei sehr großen Streuzeiten feststellen. Bei den Besetzungsfunktionen lässt sich eine Verringerung in der Nähe des Gamma-Punktes beobachten, da hier der Prozess der stimulierten Emission stattfindet. Realistische Streuzeiten liegen in der Größenordnung von 100 fs [100], daher scheint zumindest im Gleichgewicht die Annahme von kleinen Abweichungen gerechtfertigt.

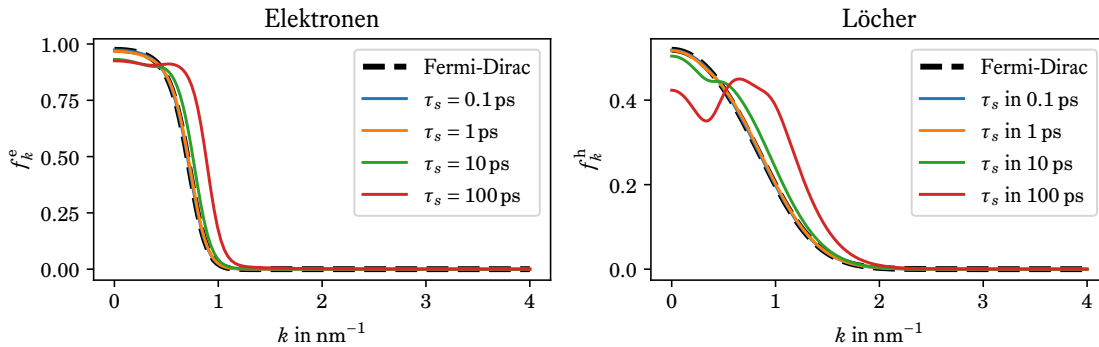


Abbildung 4.6: Gleichgewichtsverteilungen für einen Strom von 100 mA und eine longitudinale Mode mit einer Wellenlänge von 511.75 nm und für verschiedene Streuzeiten.

Es ist außerdem möglich, aus der Gesamtenergie der Besetzungsfunktionen

$$E = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}$$

eine Temperatur zu bestimmen. Dazu wird die Fermi-Dirac-Verteilungen bestimmt, welche die gleiche Ladungsträgerdichte und die gleiche Gesamtenergie besitzen, wie die Besetzungsfunktion $f_{\mathbf{k}}$. Der zeitliche Verlauf dieser Temperatur ist für verschiedene Streuzeiten in Abb. 4.7 gezeigt. Am Anfang der Simulation bei $t = 0$ sind die Ladungsträgerdichten noch Null und die Temperatur ist nicht definiert, da die Gesamtenergie in diesem Fall auch Null ist. Nach den ersten Pikosekunden ist die Temperatur zunächst größer als die Gittertemperatur, fällt anschließend aber auf die Gittertemperatur ab. Ein Anstieg der Temperatur ist außerdem bei $t \approx 500$ ps zu beobachten. Dies ist der Zeitpunkt, bei dem die Ladungsträgerdichte so groß ist, dass optische Verstärkung im Quantenfilm vorliegt. In diesem Fall rekombinieren Ladungsträger in der Nähe der Bandlücke durch stimulierte Emission. Die Ladungsträger, welche in den Quantenfilm gepumpt werden, können allerdings eine wesentlich größere Energie besitzen und müssen durch Streuprozesse zunächst in die

energetisch-niedrigeren Niveaus gelangen, bevor sie dort rekombinieren können. Die Abweichungen von der Gittertemperatur nehmen dementsprechend mit der Streuzeit zu.

Eine wichtige Größe ist die Ausgangsleistung des Lasers, diese ist abhängig von der Stromstärke in Abb. 4.8 dargestellt. Wie bei einer Laserdiode zu erwarten ist, nimmt die Leistung ab einer Schwellstromstärke von ungefähr 30 mA linear zu. Unterhalb der Schwellstromstärke wird die Ausgangsleistung durch spontane Emission und liegt Größenordnungen unterhalb der Leistungen, die überhalb des Schwellstroms erreicht werden.

4.7 Modendynamik mit Ratengleichungen

In diesem Kapitel soll die Modendynamik an einem ersten Beispiel diskutiert werden. Wie im letzten Kapitel beschrieben, werden dabei Fermi-Dirac-Verteilungen für die Besetzungsfunktionen verwendet und nur die Dynamik der Ladungsträgerdichten berücksichtigt.

Soll eine Simulation mit mehreren Moden durchgeführt werden, bleibt die Frage, wie die Frequenzen der einzelnen Moden gewählt werden müssen. In Kapitel 2 wurde ein Moden-Solver verwendet um den effektiven Brechungsindex n_{eff} zu bestimmen. Aus der Ableitung des effektiven Brechungsindex nach der Frequenz folgt der Gruppenbrechungsindex n_{gr} , welcher wiederum die Frequenzabstände der longitudinalen Moden bestimmt. In diesem Kapitel wird kein Moden-Solver verwendet und Brechungsindizes n_{eff} und n_{gr} gehen als Parameter in die Simulation ein.

Da in diesem Kapitel nur eine transversale Mode betrachtet wird, wird im Folgenden der Index p benutzt, um die verschiedenen longitudinalen Moden zu indizieren. Da der Frequenzabstand durch den Gruppenbrechungsindex gegeben ist (siehe Gl. (2.8)), können die Modenfrequenzen zunächst durch

$$\omega_p = \omega_0 + \frac{\pi c}{L n_{\text{gr}}}(p - p_0) \quad (4.12)$$

ausgedrückt werden. Die Frequenz ω_0 ist die Frequenz einer Referenzmode mit $p = p_0$ und wird durch den effektiven Brechungsindex bestimmt:

$$\omega_0 = \frac{\pi c}{L n_{\text{eff}}} p_0.$$

Die Modendynamik für einen Strom von 100 mA ist in Abb. 4.9 gezeigt. Die verwendeten Parameter sind in den Tabellen 9.10 und 9.11 im Anhang aufgeführt. Dabei wurde in den Bewegungsgleichungen angenommen, dass die Ladungsträgerdichten nicht vom Ort abhängen. Hier wird der Output des Lasers zeitabhängig und nach Wellenlängen aufgelöst dargestellt. Um ein Bild zu erhalten, was experimentellen Streak-Camera-Messungen ähnlich ist, wird hier jede longitudinale Mode auf der Wellenlänge-Achse durch eine Gauss-Funktion dargestellt. Das Maximum der Gauss-Funktion ist durch die Photonenzahl zum Zeitpunkt t gegeben, die Gauss-Funktion ist um die Wellenlänge der Mode zentriert und hat eine Breite von 0.0044 nm, was ungefähr der Auflösung im Experiment entspricht. Das Gesamtbild entspricht der Summe dieser Gauss-Funktionen zu jeder Zeit t . In der Modendynamik in Abb. 4.9 scheint sich nach genügend langer Zeit ein Gleichgewichtszustand einzustellen, wo nur die Mode mit der größten optischen Verstärkung aktiv ist. Dies entspricht allerdings qualitativ noch nicht experimentellen Ergebnissen, wo Effekte wie Modenrollen beobachtet werden, siehe zum Beispiel Abb. 1.1.

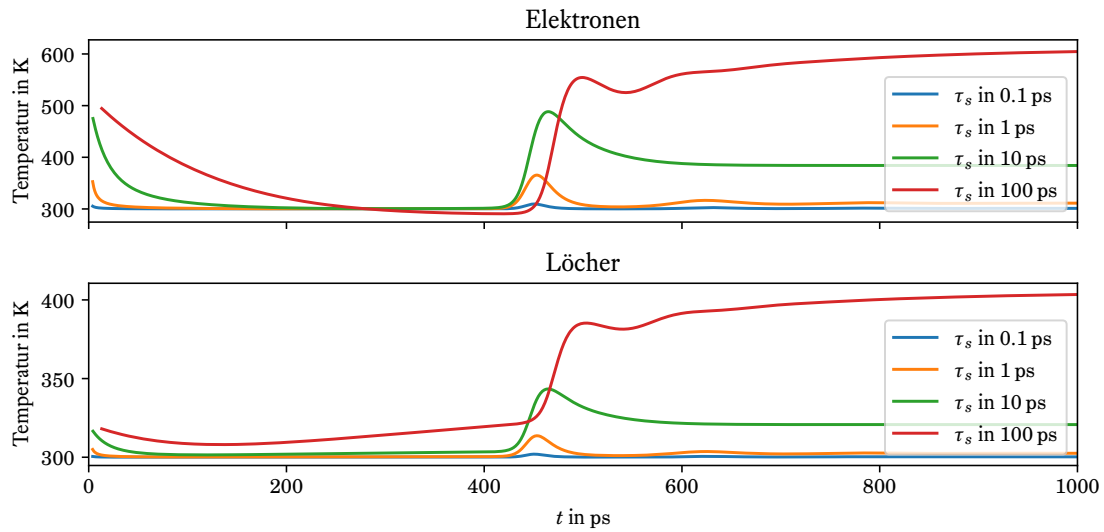


Abbildung 4.7: Zeitlicher Verlauf der Temperatur der Besetzungsfunktion, bestimmt aus der Gesamtenergie, für einen Strom von 100 mA und einer longitudinalen Mode mit einer Wellenlänge von 511.75 nm und für verschiedene Streuzeiten.

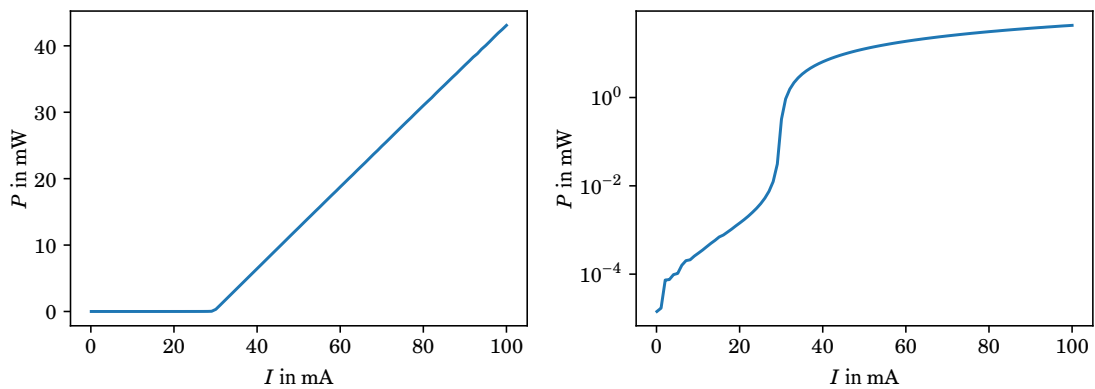


Abbildung 4.8: Die Abhängigkeit der Leistung von der Stromstärke, links in linearer Darstellung und rechts in logarithmischer Darstellung.

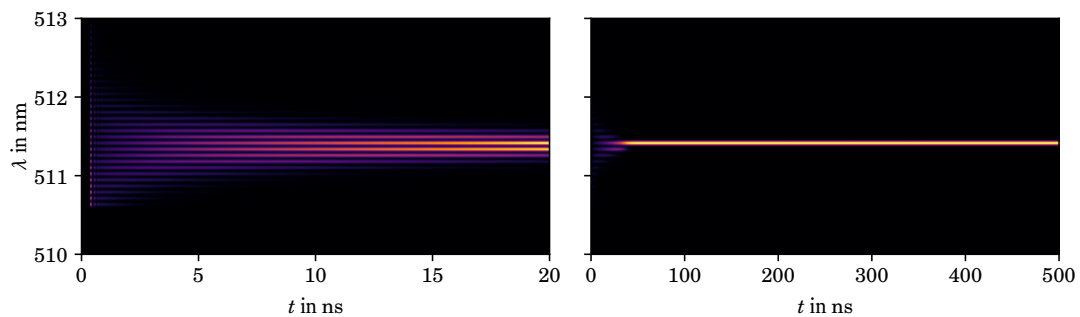


Abbildung 4.9: Modendynamik für einen Strom von $I = 100$ mA unter der Annahme ortsunabhängiger Ladungsträgerdichten.

4.8 Fourierentwicklung der Besetzungsfunktionen

In den bisherigen Rechnungen wurde die Ortsabhängigkeit der Besetzungsfunktionen vernachlässigt und die entsprechenden simulierten Streak-Camera-Bilder stimmen qualitativ nicht mit experimentellen Ergebnissen überein. In diesem Kapitel soll die Ortsabhängigkeit in longitudinaler Richtung (y -Richtung) berücksichtigt werden, die Ortsabhängigkeit in lateraler Richtung (x -Richtung) wird aber weiterhin vernachlässigt. Aufgrund der hohen Spiegelreflektivitäten an den beiden Enden des Resonators werden stehende Wellen angenommen und die longitudinalen Anteile der Modenfunktionen haben die Form

$$g_p(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(p\pi \frac{y}{L}\right).$$

Da die mikroskopische Polarisation durch das optische Feld angeregt wird, wird sie hier zur Vereinfachung in die entsprechenden Anteile der stehenden Wellen zerlegt:

$$\psi_{\mathbf{k}}(y, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_p \psi_{\mathbf{k}}^p(t) \sin\left(p\pi \frac{y}{L}\right).$$

Für die longitudinale Ortsabhängigkeit der Besetzungsfunktionen ist es sinnvoll, eine Fourierentwicklung durchzuführen:

$$f_{\mathbf{k}}^\alpha(y, t) = f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0}(t) + \sum_{m=1}^{\infty} f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m}(t) \cos\left(m\pi \frac{y}{L}\right).$$

Mithilfe von Gl. (4.8) sollen nun die Bewegungsgleichungen der Fourier-Komponenten bestimmt werden. Dabei wird auch die ortsabhängige Fermi-Dirac-Verteilung benötigt, welche aber nichtlinear von der ortsabhängigen Ladungsträgerdichte abhängt. Für die Ladungsträgerdichten wird dementsprechend ebenso eine Fourier-Entwicklung durchgeführt, die einzelnen Fourier-Komponenten können durch eine Summation der Fourier-Komponenten der Besetzungsfunktionen berechnet werden:

$$n_\alpha(y, t) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^\alpha(y, t) = \underbrace{\frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0}(t)}_{n_\alpha^0(t)} + \sum_{m=1}^{\infty} \underbrace{\frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m}(t) \cos\left(m\pi \frac{y}{L}\right)}_{n_\alpha^m(t)}.$$

Weil die Fourier-Komponenten mit $m > 0$ klein im Vergleich zur gemittelten Dichte n_α^0 sein sollen, wird für Größen, die von den Ladungsträgerdichten abhängen, eine Taylor-Entwicklung durchgeführt. Zum Beispiel können die Fermi-Dirac-Besetzungsfunktionen folgendermaßen entwickelt werden:

$$f_{\mathbf{k}}^{\alpha,\text{FD}}(n_\alpha(y, t)) \approx f_{\mathbf{k}}^{\alpha,\text{FD}}(n_\alpha^0(t)) + \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\alpha,\text{FD}}}{\partial n_\alpha^0} \sum_{m=1}^{\infty} n_\alpha^m(t) \cos\left(m\pi \frac{y}{L}\right).$$

Wird die Fourierentwicklung der mikroskopischen Polarisation zusammen mit den Modenfunktionen in die Bewegungsgleichung (4.8) eingesetzt, entstehen Terme der Form

$$\psi_{\mathbf{k}}^p(t) \sin\left(\frac{\pi}{L} p\right) g_q(y) \propto \sin\left(\frac{\pi}{L} p\right) \sin\left(\frac{\pi}{L} q\right) \propto \cos\left(\frac{\pi}{L}(p-q)\right) - \cos\left(\frac{\pi}{L}(p+q)\right). \quad (4.13)$$

Dementsprechend wird durch den ersten Term die Fourierkomponente $|p-q|$ der Besetzungsfunktionen angeregt und eine Fourierkomponente $p+q$ durch den zweiten Term. p und q sind aber beide sehr große Zahlen, daher sind $p+q$ und die dazugehörige Wellenzahl $\frac{(p+q)\pi}{L}$ sehr groß. Daher ist anzunehmen, dass hier die Diffusion eine große Rolle spielen kann. Dies soll hier kurz an einem Beispiel diskutiert werden. Die Diffusionsgleichung mit einer Diffusionskonstanten D lautet

$$\frac{d}{dt} f(t, y) = D \Delta f(t, y)$$

Für eine Sinusfunktion mit Wellenzahl k folgt eine Abklingzeit τ :

$$\frac{d}{dt} f(t, y) = -Dk^2 f(t, y) = -\frac{1}{\tau} f(t, y) \quad \Rightarrow \quad \tau = \frac{1}{Dk^2}.$$

Besitzt das Licht eine Wellenlänge von ungefähr 500 nm im Vakuum, hat es mit einem effektiven Brechungsindex von 2.4 im Material eine Wellenzahl von $k_0 = 2\pi n_{\text{eff}}/\lambda_0 \approx 0.03 \text{ nm}^{-1}$. Dementsprechend liegt die Wellenzahl $\frac{(p+q)\pi}{L}$ bei ungefähr $2k_0 \approx 0.06 \text{ nm}^{-1}$. Mit einer Resonatorlänge von $600 \mu\text{m}$ liegt die Differenz der Wellenzahlen zwei benachbarter Moden bei $\Delta k = \pi/L \approx 5.2 \times 10^{-6} \text{ nm}^{-1}$. Die Diffusionskonstante hat eine Größenordnung von $D = 10 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, damit lauten die zwei Abklingzeiten mit denen die beiden Fourierkomponenten jeweils abfallen:

$$\tau_1 = \frac{1}{D(2k_0)^2} \approx 0.3 \text{ ps}$$

$$\tau_2 = \frac{1}{D\Delta k^2} \approx 37 \mu\text{s}.$$

Die Abklingzeit der kleinen Wellenzahl ist hier so groß, dass in den Bewegungsgleichungen der entsprechenden Fourierkomponente die Diffusion nicht berücksichtigt werden muss. Hingegen ist die Abklingzeit der großen Wellenzahlen so klein, dass angenommen wird, dass die entsprechenden Fourierkomponenten der Besetzungsfunktionen verschwindend klein sind. Daher wird beim Einsetzen der Fourierentwicklungen in die Bewegungsgleichungen bei Termen wie in Gl. (4.13) immer nur der Term mit der kleinen Ortsabhängigkeit berücksichtigt. Dies ist natürlich auch der numerischen Behandlung sehr nützlich, da der Rechenaufwand unter Berücksichtigung all dieser Fourierkomponenten der Besetzungsfunktionen um ein Vielfaches höher wäre.

Aus Gl. (4.8) folgen dann die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0} &= \frac{1}{L} \int_0^L dy \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\alpha} \\ &\approx -\frac{1}{L\omega} \sum_p \frac{1}{\sqrt{\omega_p}} \text{Im} \{B_p^* \psi_{\mathbf{k}}^p\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^{\alpha} (1 - f_{\mathbf{k}}^{\alpha}) - B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{e,0} f_{\mathbf{k}}^{h,0} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0}}{\tau_{\text{nr}}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0} - f_{\mathbf{k}}^{\alpha,\text{FD}}}{\tau_s}, \\ \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m} &= \frac{2}{L} \int_0^L dy \cos\left(\pi m \frac{y}{L}\right) \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\alpha} \approx -\frac{1}{L\omega} \sum_{p \neq q} \frac{1}{\sqrt{\omega_p}} \text{Im} \{B_p^* \psi_{\mathbf{k}}^q\} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m}}{\tau_{\text{nr}}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m} - n_{\alpha}^m \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\alpha,\text{FD}}}{\partial n_{\alpha}^0}}{\tau_s}, \\ \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^p &\approx -i \sum_p C_h I_t \frac{1}{\hbar \sqrt{\omega_p}} B_p (1 - f_{\mathbf{k}}^{h,0} - f_{\mathbf{k}}^{e,0}) - \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h) \psi_{\mathbf{k}}^p \\ &\quad + \frac{i}{2} \sum_q C_h I_t \frac{1}{\hbar \sqrt{\omega_q}} B_p (f_{\mathbf{k}}^{h,|p-q|} + f_{\mathbf{k}}^{e,|p-q|}) - \frac{\gamma}{\hbar} \psi_{\mathbf{k}}^p, \\ \frac{d}{dt} B_p &= -i\omega_p B_p - \frac{i}{2\sqrt{\omega_p}} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^p - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}}. \end{aligned}$$

Hierbei wurden Integrale der Form

$$2 \int_0^1 dx \sin(\pi p x) \sin(\pi(p+m)x) \cos(\pi m x) = \frac{1}{2}$$

entsprechend ausgewertet.

Hier ist gut ersichtlich, dass zwei aktive longitudinale Moden p und q entsprechende Oszillationen der Besetzungsfunktionen auslösen. Der Wellenvektor dieser Schwingungen entspricht hierbei der Differenz der Wellenvektoren der beiden Moden und die Frequenz der Differenz der entsprechenden Modenfrequenzen. Wird die mikroskopische Polarisation, wie in Kapitel 4.5 beschrieben, adiabatisch eliminiert, ergeben sich folgende Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0} &= \frac{C_h I_t}{Lw} \sum_p \frac{1}{\omega_p} S_p \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^0(\omega_p) + \frac{C_h I_t}{2w} \sum_{pq} \frac{1}{\sqrt{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_{\mathbf{k}}^{|p-q|}(\omega_p) \right\} \\ &\quad + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^{\alpha} (1 - f_{\mathbf{k}}^{\alpha}) - B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{e,0} f_{\mathbf{k}}^{h,0} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0}}{\tau_{nr}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,0} - f_{\mathbf{k}}^{\alpha,FD}}{\tau_s}, \\ \frac{d}{dt}f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m} &= \frac{C_h I_t}{w} \sum_p \frac{1}{\omega_p} S_p \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^m(\omega_p) + \frac{C_h I_t}{w} \sum_{|p-q|=m} \frac{1}{\sqrt{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_{\mathbf{k}}^0(\omega_p) \right\} \\ &\quad - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m}}{\tau_{nr}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\alpha,m} - n_{\alpha}^m \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\alpha,FD}}{\partial n_{\alpha}^0}}{\tau_s},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}B_p &= + \frac{j}{2} C_h I_t B_p \frac{1}{\omega_p} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^0(\omega_p) + \frac{j}{4} C_h I_t \sum_q B_q \frac{1}{\sqrt{\omega_p \omega_q}} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^{|p-q|}(\omega_q) \\ &\quad - i \omega_p B_p - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{SE}.\end{aligned}\tag{4.14}$$

Dabei wurden die folgenden Abkürzungen verwendet:

$$\begin{aligned}\chi_{\mathbf{k}}^0(\omega) &= - \frac{1 - f_{\mathbf{k}}^{e,0} - f_{\mathbf{k}}^{h,0}}{\hbar \omega + i \gamma - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h}, \\ \chi_{\mathbf{k}}^m(\omega) &= \frac{f_{\mathbf{k}}^{e,m} + f_{\mathbf{k}}^{h,m}}{\hbar \omega + i \gamma - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h}.\end{aligned}$$

Werden die Frequenzen aus Gl. (4.12) in der Simulation verwendet, ist der Frequenzabstand zwischen zwei benachbarten longitudinalen Moden immer gleich. Dies ist für die numerische Modellierung ungünstig, da alle Beiträge zu den Fourierkomponenten der Besetzungsfunktionen mit der exakt gleichen Frequenz oszillieren und sich gegenseitig stark beeinflussen. Ein einfacher Weg wäre die Addition einer Zufallszahl zwischen $-\delta \Delta \omega$ und $\delta \Delta \omega$ auf alle Frequenzen. Der Parameter δ liegt hier bei wenigen Prozent und die Zufallszahlen stammen aus einer uniformen Verteilung. Der Einfluss des Parameters δ wird in Kapitel 4.11 an einem Beispiel diskutiert.

Alternativ könnte auch ein Modensolver verwendet werden um die genaue Frequenzabhängigkeit $n_{\text{eff}}(\omega)$ zu erhalten und die einzelnen Frequenzen exakt zu berechnen. Aufwändigere Möglichkeiten, mit diesem Problem umzugehen, wären die Berücksichtigung von Noise [119] oder eine genauere Betrachtung der quantenoptischen Effekte.

Aus der Bewegungsgleichung für die Modenkoeffizienten folgt neben der Bewegungsgleichung für die Photonenzahlen auch eine Bewegungsgleichung für die Phasen der Moden. Diese lautet:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\phi_p &= \frac{1}{S_p} \text{Im} \left\{ B_p^* \frac{d}{dt} B_p \right\} = -\omega_p + \frac{1}{2} C_h I_t \frac{1}{\omega_p} \text{Re} \left\{ \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^0(\omega_p) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{4} C_h I_t \sum_q \frac{1}{\sqrt{\omega_p \omega_q}} \text{Re} \left\{ \frac{B_p^* B_q}{S_p} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^{|p-q|}(\omega_q) \right\},\end{aligned}$$

dabei wurde der Term aus Gl. (4.6) für die spontane Emission verwendet, welcher keinen Einfluss auf die Phasendynamik hat. Nun bleibt noch die Frage nach den Anfangsbedingungen für das optische Feld. Die einfachste Möglichkeit ist, dass das optische Feld für $t = 0$ verschwindet. In diesem Fall müssen die Photonenzahlen auch verschwinden: $S_p(t = 0) = 0$, allerdings sind die Phasen bei $t = 0$ nicht definiert. Bei einer genaueren quantenoptischen Rechnung ist dies kein Problem. Beispielsweise regt die spontane Emission nicht die Modenkoeffizienten $B_p = \langle \hat{B}_p \rangle$ an, sondern Erwartungswerte der Form $\langle \hat{B}_p^\dagger \hat{B}_p \rangle$, welche in den Bewegungsgleichungen auch berücksichtigt werden müssten.

In dieser Arbeit wird allerdings ein klassisches optisches Feld angenommen und es müssen bestimmte Annahmen bezüglich der Anfangsphasen getroffen werden. Im Folgenden werden daher die Phasen zur Zeit $t = 0$ zufällig gewählt. In Kapitel 4.11 wird der Einfluss der Anfangsphasen und der Phasendynamik für ein Beispiel diskutiert.

4.9 Beispiel mit Dynamik der Besetzungsfunktionen

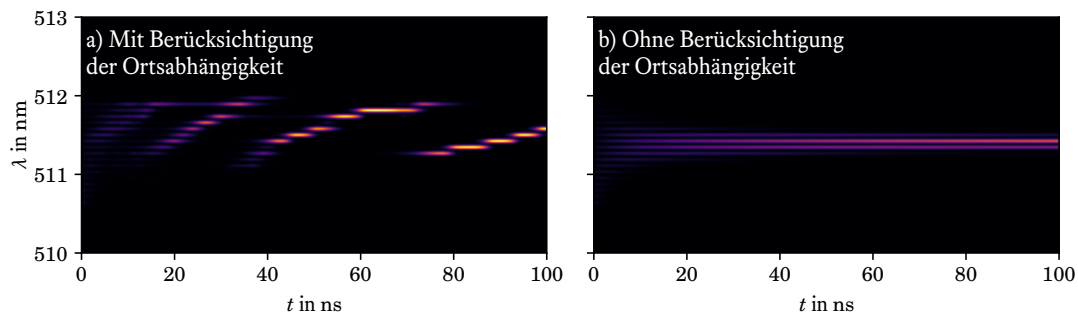


Abbildung 4.10: Vergleich der Modendynamik für einen Strom von $I = 100 \text{ mA}$. Während in a) die Ortsabhängigkeit der Besetzungsfunktion berücksichtigt wurde, wurde sie in b) vernachlässigt.

Die Modendynamik unter Berücksichtigung der ortsabhängigen Besetzungsfunktionen soll für einen Parametersatz diskutiert werden, welcher in Tabellen 9.10 und 9.11 im Anhang angegeben ist. Zur Vereinfachung werden die Phasen der Moden zunächst nur näherungsweise behandelt: $\phi_p = -\omega_p t$. Der Einfluss der Phasendynamik wird in Kapitel 4.11 genauer behandelt. Die so berechnete Modendynamik ist in Abb. 4.10 für einen Strom von 100 mA gezeigt.

Bei der Modendynamik stellt sich kein Gleichgewicht ein und die Moden in einer kleinen Wellenlängenregion wechseln sich ab. Hierbei ist jede Mode nur für einen kleinen Zeitraum aktiv, danach wird die benachbarte longitudinale Mode mit der größeren Wellenlänge aktiv. Dieser Prozess hält solange an, bis die aktive Mode soweit vom Maximum der optischen Verstärkung entfernt ist, dass die Verluste nicht mehr kompensiert werden können. In diesem Fall beginnt der Prozess beim Maximum von neuem. Dieser periodische Prozess wird als Modenrollen bezeichnet und kann auch gut experimentell mit einer Streak-Camera beobachtet werden, siehe zum Beispiel Abb. 1.1. In Abb. 4.10 ist auch die Modendynamik gezeigt für den Fall, wo die Ortsabhängigkeit der Ladungsträgerdichten ignoriert wurde und die Moden so nicht miteinander wechselwirken. In diesem Fall stellt sich nach einiger Zeit ein Gleichgewicht ein und nur die Mode mit der höchsten optischen Verstärkung ist aktiv, wie in Abb. 4.9.

4.10 Bewegungsgleichungen der Ladungsträgerdichten

Der Ansatz für die ortsabhängigen Besetzungsfunktionen soll in diesem Kapitel verwendet werden, um Bewegungsgleichungen für ortsabhängige Ladungsträgerdichten herzuleiten. Dies verringert den numerischen Aufwand erheblich, da die Anzahl der Differentialgleichungen stark reduziert wird. Dadurch ist es hier relativ einfach möglich, komplizierte Streuterme und Dephasierungsterme zu verwenden. Für die Besetzungsfunktionen werden Fermi-Dirac-Verteilungen angenommen, wie in Kapitel 4.6 schon diskutiert wurde. Für die Ladungsträgerdichten wird wie bei den Besetzungsfunktionen auch eine Fourier-Entwicklung durchgeführt:

$$n_\alpha(y, t) = n_\alpha^0(t) + \sum_{m=1}^{\infty} n_\alpha^m(t) \cos\left(m\pi \frac{y}{L}\right).$$

Da die Fourier-Komponenten mit $m > 0$ klein im Vergleich zu n_α^0 sein sollen, wird für entsprechende Größen, die von den Ladungsträgerdichten abhängen, eine Taylor-Entwicklung durchgeführt, wie das in Kapitel 4.8 schon für die Fermi-Dirac-Besetzungsfunktionen getan wurde. Die Bewegungsgleichungen für die Fourierkomponenten der Ladungsträgerdichten folgen dann aus der Summation der Bewegungsgleichungen (4.14) der Besetzungsfunktionen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_\alpha^0 &\approx \frac{I_t}{Lw} \sum_p S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) + \frac{j}{e} \eta^\alpha(n_\alpha^0) - B(n_h^0, n_e^0) - \frac{n_\alpha^0}{\tau_{nr}} \\ &+ \frac{I_t}{2Lw} \sum_{pq} \sqrt{\omega_q \omega_p} \operatorname{Im} \left\{ B_p B_q^* \left(n_e^{|p-q|} \frac{\partial}{\partial n_e^0} + n_h^{|p-q|} \frac{\partial}{\partial n_h^0} \right) \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) \right\}, \\ &\approx \frac{I_t}{Lw} \sum_p S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) + \frac{j}{e} \eta^\alpha(n_\alpha^0) - B(n_h^0, n_e^0) - \frac{n_\alpha^0}{\tau_{nr}} \\ \frac{d}{dt} n_\alpha^m &\approx \frac{I_t}{Lw} \sum_{|p-q|=m} \sqrt{\omega_q \omega_p} \operatorname{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) \right\} - \frac{n_\alpha^m}{\tau_{nr}} \\ &+ \frac{I_t}{Lw} \sum_p S_p \omega_p \operatorname{Im} \left\{ \left(n_e^m \frac{\partial}{\partial n_e^0} + n_h^m \frac{\partial}{\partial n_h^0} \right) \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) \right\}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Die Bewegungsgleichung der ortsabhängigen Anteile lässt sich näherungsweise umschreiben zu

$$\frac{d}{dt} n_\alpha^m \approx \frac{I_t}{Lw} \sum_{|p-q|=m} \sqrt{\omega_q \omega_p} \operatorname{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) \right\} - \gamma_\alpha n_\alpha^m,$$

mit der Abklingzeit $1/\gamma_\alpha$, welche hier definiert ist als

$$\gamma_\alpha = \frac{1}{\tau_{nr}} - \sum_p \frac{I_t}{Lw} S_p \omega_p |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW})|^2 \frac{\partial \operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0)}{\partial n_\alpha^0}.$$

Falls die Abklingzeiten von Elektronen und Löchern gleich sind, sind auch die Dichtevibrationen gleich:

$$\gamma_e = \gamma_h \quad \Rightarrow \quad n_e^m = n_h^m.$$

Für die Phasen der Modenkoeffizienten wird die folgende einfache Zeitabhängigkeit angenommen:

$$B_p = \sqrt{S_p} e^{-i\omega_p t + \phi_0^p}.$$

Eine näherungsweise Lösung der Bewegungsgleichung ergibt

$$n_\alpha^m \approx \frac{I_t}{Lw} \sum_{|p-q|=m} \sqrt{\omega_q \omega_p} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\gamma_\alpha + i(\omega_p - \omega_q)} B_p B_q^* \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) \right\}.$$

Da die Größenordnung der Abklingzeit im Bereich einer Nanosekunde und die Frequenzdifferenz zweier Moden eher im Bereich von Pikosekunden liegt, ist die Annahme $\gamma_\alpha(\omega_p - \omega_q) \ll 1$ hier gerechtfertigt. Das Ergebnis hat die Form

$$\begin{aligned}
n_e^m = n_h^m = n^m &\approx -\frac{I_t}{L\omega} \sum_{|p-q|=m} \sqrt{\omega_q \omega_p} \frac{1}{\omega_q - \omega_p} \operatorname{Re} \left\{ B_p B_q^* \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) \right\} \\
&\approx \frac{I_t}{L\omega} \sum_{p < q, |p-q|=m} \sqrt{\omega_q \omega_p} \operatorname{Im} \left\{ B_p B_q^* \right\} \frac{\operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e^0, n_h^0) + \operatorname{Im} \chi(\omega_q, n_e^0, n_h^0)}{\omega_q - \omega_p}. \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Die Amplitude der Dichtevibrationen, welche von zwei Moden p und q angeregt werden, ist dementsprechend proportional zu den entsprechenden Modenkoeffizienten und zum Imaginärteil der Suszeptibilität. Nun muss noch der Einfluss dieser Dichtevibrationen auf die Dynamik der Photonenzahlen untersucht werden. Zur Vereinfachung der Notation wird im Folgenden die Abhängigkeit der Suszeptibilität von den Ladungsträgerdichten nicht mehr explizit angegeben und die Bewegungsgleichung für die Modenkoeffizienten lautet

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} B_p &= -i\omega_p B_p + \frac{i}{2} I_t B_p \omega_p \chi(\omega_p) - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}} \\
&\quad + \frac{i}{4} I_t \sum_q B_q \sqrt{\omega_p \omega_q} \left[n_e^{|p-q|} \frac{\partial}{\partial n_e^0} \chi(\omega_q) + n_h^{|p-q|} \frac{\partial}{\partial n_h^0} \chi(\omega_q) \right] \\
&\approx -i\omega_p B_p + \frac{i}{2} I_t B_p \omega_p \chi(\omega_p) + \frac{i}{4} I_t \sum_q B_q \sqrt{\omega_p \omega_q} n^{|p-q|} \chi'(\omega_q) - \frac{1}{2} \frac{B_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} B_p \right|_{\text{SE}}.
\end{aligned}$$

Hierbei wurde die Ableitung der Suszeptibilität folgendermaßen definiert:

$$\chi'(\omega) = \frac{\partial}{\partial n_e^0} \chi(\omega) + \frac{\partial}{\partial n_h^0} \chi(\omega).$$

Aus der Bewegungsgleichung der Modenkoeffizienten folgen dann die Bewegungsgleichungen für die Photonenzahl und die Phasen der Modenkoeffizienten:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} S_p &= -I_t S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p) - \frac{1}{2} I_t \sum_q \operatorname{Im} \left\{ B_p^* B_q \sqrt{\omega_p \omega_q} n^{|p-q|} \chi'(\omega_q) \right\} - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \operatorname{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p) \\
\frac{d}{dt} \phi_p &= -\omega_p + \frac{1}{2} I_t \omega_p \operatorname{Re} \chi(\omega_p) + \frac{1}{4} I_t \sum_q \sqrt{\omega_p \omega_q} \operatorname{Re} \left\{ \frac{B_p^* B_q}{S_p} n^{|p-q|} \chi'(\omega_q) \right\}.
\end{aligned}$$

Unter der Annahme, dass nur zwei Moden p und q gleichzeitig aktiv sind, ist es nun möglich, einen Modenkopplungsterm herzuleiten. Dazu wird die Lösung aus Gl. (4.16) eingesetzt. Das Ergebnis lautet

$$\frac{d}{dt} S_p \approx -I_t S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p) - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + \frac{1}{2} \frac{I_t^2}{L\omega} \sum_q S_p S_q \omega_p \omega_q \frac{1}{\omega_q - \omega_p} \frac{\operatorname{Im} \chi(\omega_p) + \operatorname{Im} \chi(\omega_q)}{2} \operatorname{Re} \chi'(\omega_q).$$

Zu weiteren Vereinfachung wird die Suszeptibilität im Wechselwirkungsterm am Gain-Maximum ω_0 ausgewertet, das ergibt die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} S_p &\approx -I_t S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p) - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + \frac{I_t^2}{2L\omega} \sum_q \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} \omega_0^4 \frac{1}{\omega_q - \omega_p} \operatorname{Im} \chi(\omega_0) \operatorname{Re} \chi'(\omega_0) \\
&= -I_t S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p) - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + \frac{I_t^2}{2L\omega} \sum_q \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} A(\omega_q - \omega_p), \quad (4.17)
\end{aligned}$$

mit dem Kopplungsterm

$$A(\Delta\omega) = \frac{\omega_0^4}{\Delta\omega} \operatorname{Im} \chi(\omega_0) \operatorname{Re} \chi'(\omega_0).$$

Aufgrund von $A(-\Delta\omega) = -A(\Delta\omega)$ entspricht dies einem rein asymmetrischen Kopplungsterm. Am Gain-Maximum gilt $\operatorname{Im} \chi(\omega_0) < 0$ und $\operatorname{Re} \chi'(\omega_0) < 0$, daher gilt auch $A(\omega_q - \omega_p) < 0$ für $\omega_q < \omega_p$. Dies bedeutet, dass bei dieser Art der Modenwechselwirkung immer die Mode mit der kleineren Frequenz bevorzugt wird.

4.11 Beispiel mit Dynamik der Ladungsträgerdichten

Für ein einfaches Beispiel sollen nun verschiedene Eigenschaften der Modendynamik diskutiert werden. Die Parameter sind hier in Tabelle 9.10 angegeben und sind die gleichen wie bei in Abb. 4.10, wo die komplette Dynamik der Besetzungsfunktionen berücksichtigt wurde. Wie weiter oben schon diskutiert, ist der Wechselwirkungsterm, wenn nur die Dynamik der Ladungsträgerdichten betrachtet wird, rein asymmetrisch. Die resultierende Modendynamik weicht allerdings stark von Ergebnissen ab, welche unter Berücksichtigung der vollen Besetzungsfunktionen berechnet wurden, siehe Abb. 4.11. Daher wird hier der symmetrische Wechselwirkungsterm aus Gl. (5.16) verwendet, der in Kapitel 5 hergeleitet und genauer diskutiert wird. Dieser lautet

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{Symm}} = \frac{1}{2} \frac{I_t^2}{Lw} \sum_{q \neq p} \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} A_{\text{Symm}}(\omega_q - \omega_p)$$

$$A_{\text{Symm}}(\Delta\omega) = \frac{\tau_s}{\Delta\omega^2 \tau_s^2 + 1} \left[2C_h^2 \gamma^2 \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^h}{\left((\hbar\omega_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h)^2 + \gamma^2 \right)^2} + \omega_0^4 \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0) \right]. \quad (4.18)$$

Weiterhin führen Abweichungen der Besetzungsfunktionen von der angenommenen Fermi-Dirac-Verteilung auch zu kleinen Änderungen der Suszeptibilität $\delta\chi$. Dies ist in Kapitel 5.6 genauer beschrieben und hat im Vergleich zu dem oben genannten symmetrischen Wechselwirkungsterm nur einen kleinen Effekt auf die Moden, wird hier aber auch berücksichtigt. Die Änderung der Suszeptibilität $\delta\chi$ hängt von der Photonendichte s ab. Diese lautet mit den Definitionen aus diesem Kapitel und der bisher immer verwendeten räumlichen Mittelung:

$$s = \frac{1}{Lw} \int dx \int dy \sum_p S_p |u_p(x, y, z_{QW})|^2 \approx \frac{I_t}{Lw} \sum_p S_p.$$

Zum Vergleich ist in Abb. 4.11 die Modendynamik mit und ohne Verwendung der zusätzlichen Wechselwirkungsterme gezeigt. Die Modendynamik unter Berücksichtigung der vollen Besetzungsfunktionen mit den gleichen Parametern ist auch dargestellt. Hier stimmt die Modendynamik mit dem zusätzlichen Modenwechselwirkungsterm qualitativ sehr gut mit der wesentlich aufwendigeren Rechnung überein, allerdings ist hier die Periodendauer des Modenrollens leicht größer.

Wie in Kapitel 4.8 schon diskutiert wurde, wird ein zufälliger Offset auf die Frequenzen der Moden addiert, um zu verhindern, dass die Moden exakt äquidistant sind. In Abb. 4.12 wird die Notwendigkeit hierfür gezeigt. Hier wird für verschiedene Methoden die Modendynamik mit und ohne zufälligen Offset verglichen. Wird kein zufälliger Offset verwendet, hängt die resultierende Modendynamik stark von den Anfangsphasen ab. Eine Ausnahme ist die Verwendung eines effektiven Moden-Wechselwirkungsterms, da hier die Phasen der Moden keine Rolle spielen. Wird ein genügend groß zufälliger Offset verwendet, folgt in allen Fällen ein sehr ähnliches Ergebnis und die Modendynamik hängt nicht von den Anfangsphasen ab. Daher scheint es sinnvoll zu sein, einen effektiven Wechselwirkungsterm zu verwenden, falls nur die Modendynamik von Interesse ist, da hier nur ein Bruchteil der Zeitschritte in der Simulation notwendig ist.

Um aber die Dynamik der Phasen der Modenkoeffizienten oder die Vibrationen der Ladungsträgerdichte zu untersuchen, müssen die vollen Bewegungsgleichungen gelöst werden, wodurch sich der numerische Aufwand wesentlich erhöht. Die Periodendauer T der Dichtevibrationen ist abhängig vom Abstand zweier benachbarter Moden, also

$$T = \frac{2\pi}{\Delta\omega} = \frac{2Ln_{\text{gr}}}{c}$$

und liegt daher in der Größenordnung von Pikosekunden. Die Form der Vibrationen hängt außerdem stark von den Anfangsphasen der Modenkoeffizienten und anderen Faktoren ab, in Abb. 4.13 die Vibrationen für verschiedene Anfangsbedingungen gezeigt.

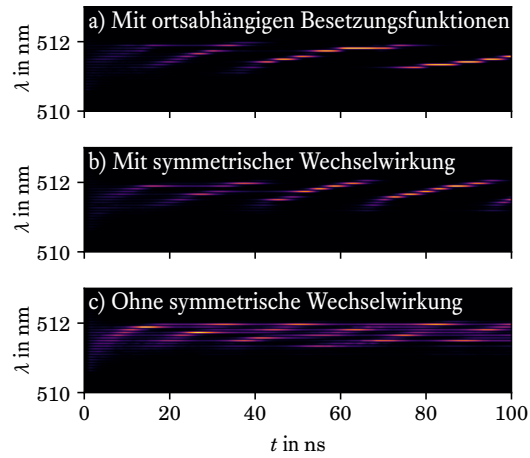


Abbildung 4.11: Vergleich der Modendynamik für verschiedene Methoden für einen Strom von $I = 100$ mA. Während in a) die Dynamik der vollen Besetzungsfunktionen berücksichtigt wurde, wurde in b) und c) eine Fermi-Dirac-Verteilung angenommen und nur die Dynamik der Ladungsträgerdichten betrachtet. In b) wurden die zusätzlichen Terme aus Gleichungen (4.18) und Kapitel 5.6 verwendet, während sie in c) vernachlässigt wurden.

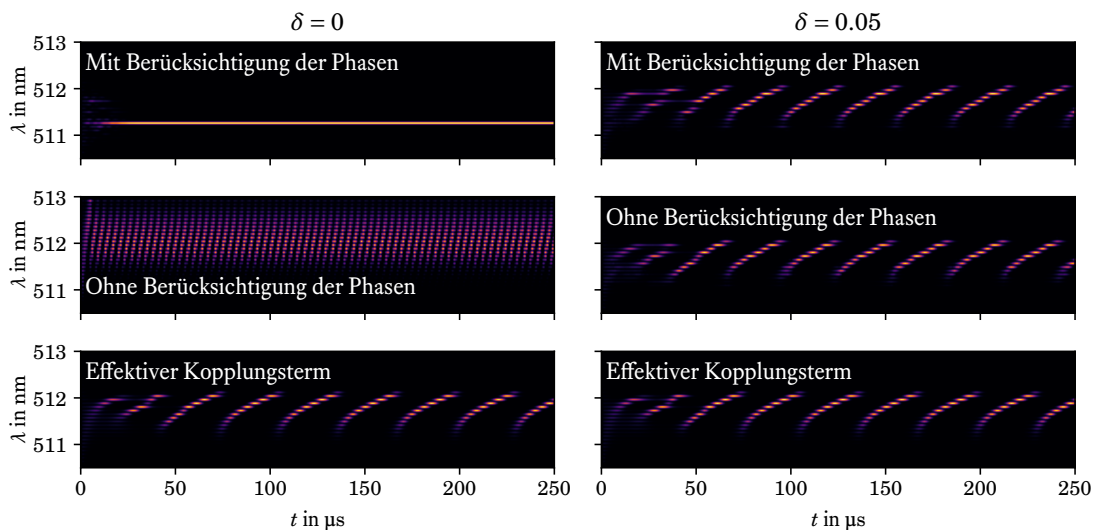


Abbildung 4.12: Einfluss des zufälligen Offsets der Modenfrequenzen für verschiedene Methoden. Bei den rechten drei Bildern wurde ein maximaler Offset von $0.05\Delta\omega$ verwendet, während bei den linken drei Bildern äquidistante Modenfrequenzen verwendet wurden. In beiden Fällen wurde bei der Berechnung der Modendynamik verschiedene Methoden verwendet. Einmal wurden die Fourierkomponenten und die Phasen der Moden in den Bewegungsgleichungen berücksichtigt, einmal nur die Fourierkomponenten und einmal wurden die effektiven Wechselwirkungsterme aus Gl. (4.17) und (4.18) verwendet.

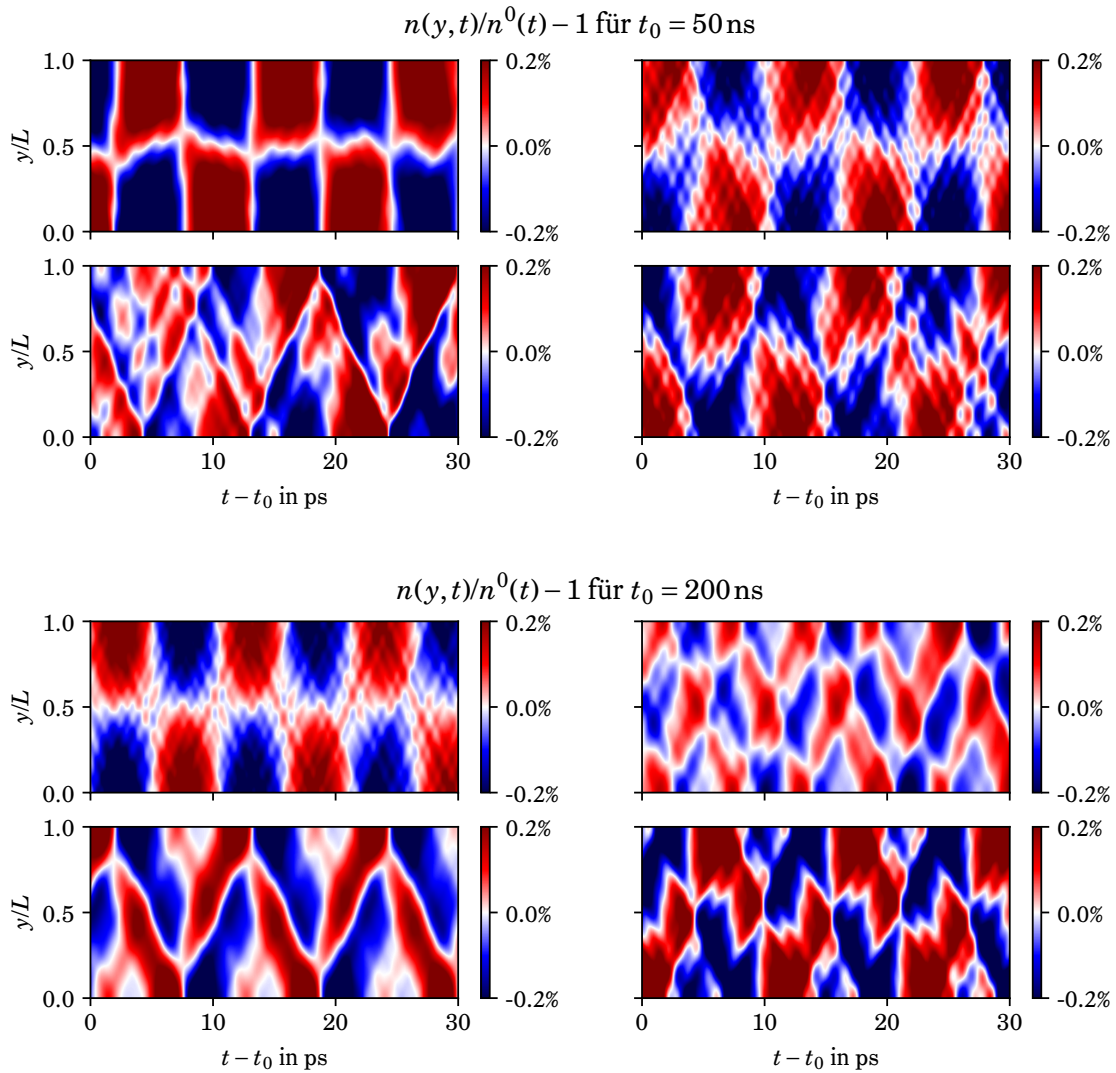


Abbildung 4.13: Ort- und Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten. Gezeigt ist hier ein kleiner Zeitbereich von 30 ps, welcher bei t_0 anfängt. Da das Ergebnis stark von den Anfangsphasen und von den zufällig gewählten Offsets der Modenfrequenzen abhängt, sind hier jeweils 4 Ergebnisse für zwei verschiedene Zeitbereiche gezeigt.

Es bleibt noch zu untersuchen, wie sich die Modendynamik bei verschiedenen Stromstärken verhält. Dies ist in Abb. 4.14 für einen effektiven Wechselwirkungsterm gezeigt. Wie schon in Kapitel 4.9 diskutiert wurde, ist das Modenrollen charakteristisch für die Modendynamik von Laserdioden, hierbei stellt sich kein Gleichgewichtszustand ein, sondern verschiedene longitudinale Moden wechseln sich ab. Die aktive Mode geht hierbei von kleineren Wellenlängen über zu größeren Wellenlängen. Irgendwann ist eine Wellenlänge erreicht, wo der Gain nicht mehr ausreicht, um die Photonenverluste zu kompensieren, und der Prozess fängt am Gain-Maximum wieder an. Die Periodendauer dieses Prozesses definiert eine Modenrollenfrequenz f , welche laut Abb. 4.14 für größere Stromstärken zunimmt. Bei Stromstärken nahe an der Schwelle zeigt sich ein anderes Verhalten, hier scheint es möglich zu sein, dass sich ein Gleichgewicht einstellt, wo eine oder mehrere Moden aktiv sind.

Dies ist nochmal genauer in Abb. 4.15 dargestellt. Hier ist die Modenrollenfrequenz abhängig von der Stromstärke gezeigt. Die Modenrollenfrequenz verschwindet in der Nähe des Schwellstroms, und nimmt für größere Stromstärken zu. Dies lässt sich auch experimentell beobachten, siehe Kapitel 5.8.

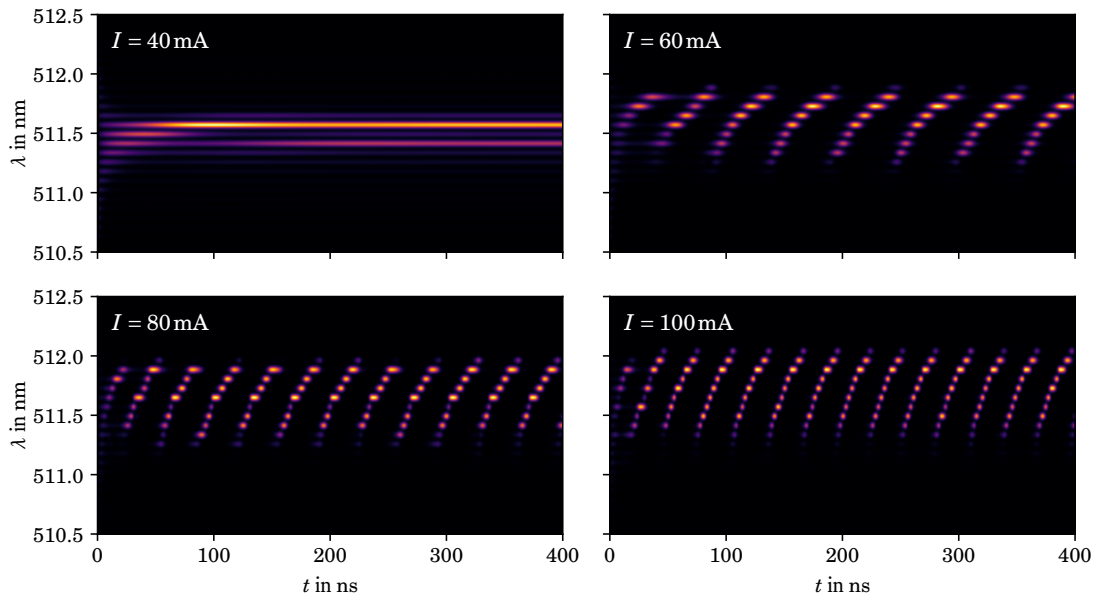


Abbildung 4.14: Modendynamik für verschiedene Stromstärken. Hierbei wurde nur die Dynamik der Ladungsträgerdichte berücksichtigt und es wurden die effektiven Wechselwirkungsterme aus Gleichungen (4.17) und (4.18) verwendet.

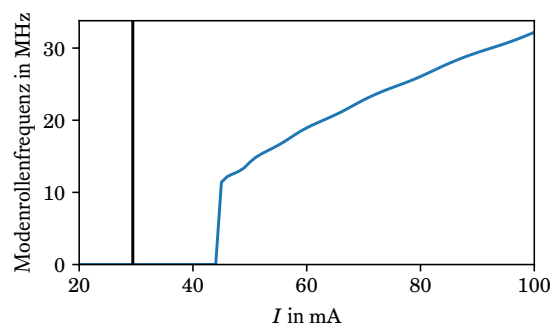


Abbildung 4.15: Die Stromabhängigkeit der Modenrollenfrequenz. Hierbei wurde die Modendynamik für verschiedene Stromstärken berechnet und die Frequenz aus dem Abstand der Peaks bestimmt.

4.12 Fazit

In diesem Kapitel wurden zunächst verschiedene Terme zu den Bewegungsgleichungen aus dem letzten Kapitel hinzugefügt. Diese Terme werden für die Laserdynamik benötigt und beschreiben beispielsweise das Pumpen der Quantenfilme oder die Photonen-Verluste. Anschließend wurde der Einfluss verschiedener Näherungen an einem möglichst einfachen Beispiel untersucht. So hat die adiabatische Eliminierung der mikroskopischen Polarisation für die hier verwendeten Parameter keinen Einfluss auf die Laserdynamik und die Abweichungen der Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen ist klein. Für das Beispiel wurde außerdem die Modendynamik untersucht. Es stellt sich heraus, dass die Ortsabhängigkeit der Besetzungsfunktionen und Ladungsträgerdichten in den Simulationen berücksichtigt werden muss um eine qualitative Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen zu erzielen. Werden für die Besetzungsfunktionen Fermi-Dirac-Verteilungen angenommen, muss außerdem ein symmetrischer Modenwechselwirkungsterm berücksichtigt werden, da dieser Effekt sonst in den Bewegungsgleichung nicht enthalten wäre. Die Herleitung und eine genauere Diskussion dieser Modenwechselwirkungsterme erfolgt im nächsten Kapitel.

Kapitel 5

Analyse der Modenwechselwirkung

Im letzten Kapitel wurde die Wechselwirkung von verschiedenen longitudinalen Moden anhand eines einfachen Beispiels diskutiert. Hierbei wurden viele Effekte vernachlässigt, beispielsweise die Ortsabhängigkeiten der Ladungsträgerdichten senkrecht zur Ausbreitungsrichtung sowie Vielteilcheneffekte. Diese Vielteilcheneffekte beinhalten neben Hartree-Fock-Korrekturen auch Streu- und Dephasierungsterme, welche eine numerische Lösung sehr aufwendig gestalten. Eine Möglichkeit zur Reduzierung der Rechenzeit ist das Benutzen von effektiven Wechselwirkungstermen, welche die Wechselwirkung der Moden über Vibrationen der Ladungsträgerdichten näherungsweise beschreiben. In diesem Fall haben die Modenwechselwirkungsterme die Form

$$\left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{Moden-WW}} = \sum_q A_{pq} S_p S_q. \quad (5.1)$$

Die Schwierigkeit besteht in der Bestimmung der Koeffizienten A_{pq} , welche von den Modenfunktionen und den Frequenzen der Moden p und q abhängen. In diesem Kapitel werden diese Koeffizienten hergeleitet und diskutiert. Dazu werden die Bewegungsgleichungen für bestimmte Anteile der Besetzungsfunktionen bzw. der Quantenfilmdichten näherungsweise gelöst. Hierbei ist es möglich, Vielteilcheneffekte näherungsweise zu berücksichtigen, außerdem ist wesentlich einfacher, eine Ortsabhängigkeit der Besetzungsfunktionen oder der Quantenfilmdichten senkrecht zur Ausbreitungsrichtung zu betrachten. Weiterhin wird angenommen, dass an jedem Zeitpunkt nur zwei Moden gleichzeitig aktiv sind. Dies ist notwendig, um einen Wechselwirkungsterm der Form in Gleichung (5.1) zu erhalten. Die Wechselwirkung zwischen drei oder mehr Moden wird vernachlässigt.

5.1 Herleitung der Modenwechselwirkungsterme

Ausgangspunkt für die Herleitung der Modenwechselwirkungsterme sind die ortsabhängigen Halbleiter-Bloch-Gleichungen und die Bewegungsgleichungen für die Modenkoeffizienten, siehe Gl. (4.5). Diese lauten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda &= i\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda - f_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^\lambda) \psi_{\mathbf{k}}^\lambda + \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}}, \\ \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^e &= 2 \sum_\lambda \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^\lambda (\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda)^* \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^e (1 - f_{\mathbf{k}}^e) - \sum_\lambda B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{f_{\mathbf{k}}^e}{\tau_{\text{nr}}} + \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^e \right|_{\text{Streu}}, \\ \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda &= 2 \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^\lambda (\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda)^* \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{f_{\mathbf{k}}^\lambda}{\tau_{\text{nr}}} + \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}}, \\ \frac{d}{dt} S_p &= \text{Re} \left\{ B_p^* \sqrt{\frac{2\omega_p}{\hbar\epsilon_0}} \int d^2 \mathbf{r}_\parallel u_p^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) P(\mathbf{r}_\parallel, \omega_p) \right\} - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} \\ &\quad + \int d^2 \mathbf{r}_\parallel |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p, \mathbf{r}_\parallel). \end{aligned}$$

Die Polarisation ist hierbei

$$P(\mathbf{r}_\parallel, \omega) = - \sum_\lambda \frac{ie p_\lambda}{\omega m_0} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}_\parallel),$$

die Rabi-Frequenz ist gegeben als

$$\hbar\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda = -\frac{ep_\lambda^*}{m_0} \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p\epsilon_0}} B_p u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) + \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{c\lambda} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\lambda,$$

und die Einteilchen-Energien in der Hartree-Fock-Näherung lauten

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^\lambda = \epsilon_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\lambda\lambda} f_{\mathbf{k}'}^\lambda.$$

Zur Herleitung der Modenwechselwirkungsterme muss zunächst die Bewegungsgleichung für die mikroskopische Polarisation $\psi_{\mathbf{k}}^\lambda$ näherungsweise gelöst werden, wie das in Kapitel 4.5 schon diskutiert wurde. Anstelle des einfachen Dephasierungsterms wird allerdings eine allgemeine Dephasierungsmatrix verwendet und das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda &= \sum_p \frac{ep_\lambda^*}{m_0} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p\epsilon_0}} u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) B_p \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_p) (1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^\lambda) \\ &= -\sum_p \frac{ep_\lambda^*}{m_0} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p\epsilon_0}} u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) B_p \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p). \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet $\chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega)$ den Beitrag zur Suszeptibilität, der zum Wellenvektor \mathbf{k} gehört:

$$\chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega) = -\sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^e - f_{\mathbf{k}'}^\lambda),$$

mit der Matrix aus Gl. (3.33):

$$\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda(\omega) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (\hbar\omega - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^\lambda) + i\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda + \frac{1}{A} (1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^\lambda) V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{e\lambda}.$$

Eingesetzt in die Bewegungsgleichungen für die Besetzungsfunktionen ergibt sich der folgende Beitrag für die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{EM}} &= 2\text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^\lambda (\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda)^* \right\} \\ &= \sum_{pq} \frac{e^2 |p_\lambda|^2}{m_0^2 \epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) u_q^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) \right\}, \end{aligned}$$

hierbei wurden die Beiträge, welche aufgrund der Hartree-Fock-Korrektur in der Rabi-Frequenz vorkommen, vernachlässigt. Diese tragen ohnehin nicht zu den Bewegungsgleichungen der Elektron- und Lochdichten bei [62]. Das ‘‘EM’’ soll hier darauf hinweisen, dass hier nur die Beiträge aufgrund der direkten Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld betrachtet werden. Für die Photonenzahlen der einzelnen Moden lauten die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{EM}} &= -\text{Re} \left\{ B_p^* \frac{iep_\lambda}{m_0} \sqrt{\frac{2}{\hbar\omega_p\epsilon_0}} \int d^2\mathbf{r}_\parallel u_p^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}_\parallel) \right\} \\ &= \sum_q \text{Im} \left\{ B_p^* B_q \frac{C_\lambda}{\sqrt{\omega_p\omega_q}} \int d^2\mathbf{r}_\parallel u_p^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) u_q(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}}) \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_q) \right\}, \quad (5.2) \end{aligned}$$

hierbei ist C_λ eine Abkürzung für $e^2 |p_\lambda|^2 / m_0^2 \epsilon_0$. Die ortsabhängigen Besetzungsfunktionen werden nun in zwei Anteile $f_{\mathbf{k}}^0$ und $\delta f_{\mathbf{k}}$ aufgespalten:

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_\parallel) = f_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_\parallel) + \delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_\parallel).$$

Hierbei entspricht $f_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_\parallel)$ einer zeitlichen Mittelung der Besetzungsfunktion über ein Intervall in der Größenordnung von 100 ps in der Nähe von t und ändert sich dementsprechend nur auf großen Zeitskalen. Der Anteil $\delta f_{\mathbf{k}}$ beschreibt die Abweichungen der Besetzungsfunktionen von dem zeitlichen Mittelwert $f_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_\parallel)$ und

kann stark von der Zeit abhängen. Diese Abweichungen beschreiben Vibrationen der Ladungsträgerdichten und treten auf, wenn zwei oder mehr optische Moden gleichzeitig aktiv sind.

Nun wird zunächst die Dynamik der Loch-Besetzungsfunktionen untersucht, die Behandlung der Elektron-Besetzungsfunktionen erfolgt analog, dabei muss aber immer nur über alle Lochbänder summiert werden. Die Bewegungsgleichungen für die Loch-Besetzungsfunktionen lauten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0} &\approx \sum_p C_\lambda \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p) + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) \\ &\quad - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}}{\tau_{\text{nr}}} - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda (f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,0} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}), \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta f_{\mathbf{k}}^\lambda &\approx \sum_{p \neq q} C_\lambda \frac{1}{\sqrt{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_q^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right\} \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda \left(\delta f_{\mathbf{k}'}^\lambda - \delta n_h \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}}{\partial n_h^0} \right) - \frac{\delta f_{\mathbf{k}}^\lambda}{\tau_{\text{nr}}}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Hierbei wurde wie in Kapitel 4.10 angenommen, dass sich die Besetzungsfunktionen nur schwach von einer Fermi-Dirac-Verteilung unterscheiden, sodass der Streuterm die folgende Form hat:

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}} \approx - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda (f_{\mathbf{k}'}^\lambda - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}).$$

Beim Einfluss auf die Bewegungsgleichung von $\delta f_{\mathbf{k}}^\lambda$ muss beachtet werden, dass die Fermi-Dirac-Verteilung von der Dichte abhängt, welche dementsprechend auch in zwei Anteile aufgespalten werden muss:

$$n_h = n_h^0 + \delta n_h, \quad \delta n_h = \frac{2}{A} \sum_{\lambda \mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}}^\lambda.$$

Unter der Annahme, dass die Dichtevibrationen im Vergleich zur gemittelten Dichte sehr klein sind, ergibt sich

$$f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}(n_h(\mathbf{r}_{\parallel})) \approx f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}(n_h^0(\mathbf{r}_{\parallel})) + \delta n_h(\mathbf{r}_{\parallel}) \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}}{\partial n_h^0}.$$

Da in der Bewegungsgleichung von $\delta f_{\mathbf{k}}^\lambda$ die rechte Seite von den Dichtevibrationen δn_h abhängt, ist es sinnvoll, zunächst die entsprechende Bewegungsgleichung zu betrachten und eine geeignete Näherung für δn_h zu finden. Die dazugehörige Bewegungsgleichung lautet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_h &= \frac{d}{dt} \frac{2}{A} \sum_{\lambda \mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^\lambda \\ &= \frac{j}{e} \eta_h(n_h) - B(n_e, n_h) - \frac{n_h}{\tau_{\text{nr}}} + \sum_{\lambda p q} C_\lambda \frac{1}{\sqrt{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_\lambda(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_q^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right\} \end{aligned}$$

Dabei ist χ_λ der Anteil eines Valenzbandes zur gesamten Suszeptibilität, allerdings ohne den Vorfaktor:

$$\chi_\lambda(\omega) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega)$$

und die gesamte Suszeptibilität lautet

$$\chi(\omega) = \sum_{\lambda} \frac{C_\lambda}{\omega^2} \chi_\lambda(\omega).$$

Die Bewegungsgleichungen für die einzelnen Anteile lauten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_h^0 &= \frac{j}{e} \eta_\lambda(n_h^0) - B(n_e^0, n_h^0) - \frac{n_h^0}{\tau_{nr}} + \sum_{\lambda p} C_\lambda \frac{1}{\omega_p} S_p |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW})|^2 \text{Im} \chi_\lambda^0(\omega_p) \\ \frac{d}{dt} \delta n_h &\approx -\frac{\delta n_h}{\tau_{nr}} + \sum_{\lambda p} C_\lambda \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW})|^2 \text{Im} \delta \chi_\lambda(\omega_p) \\ &\quad \sum_{\lambda pq, p \neq q} C_\lambda \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_\lambda^0(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) u_q^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Die Suszeptibilität wurde in zwei Anteile aufgespalten:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega) &= -\sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^e - f_{\mathbf{k}'}^\lambda) \\ &= -\sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega) (1 - f_{\mathbf{k}'}^{e,0} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,0}) + \sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega) (\delta f_{\mathbf{k}'}^e + \delta f_{\mathbf{k}'}^\lambda) \\ &= \chi_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}(\omega) + \delta \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega). \end{aligned}$$

Unter der Annahme einer konstanten Temperatur und einer kleinen Dichteänderung gilt

$$\delta \chi_\lambda(\omega) = \chi_\lambda(\omega) - \chi_\lambda^0(\omega) \approx \frac{\partial \chi_\lambda(\omega)}{\partial n_h^0} \delta n_h = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega) \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_h^0} \delta n_h.$$

Die Bewegungsgleichung für den stark zeitabhängigen Anteil lautet

$$\frac{d}{dt} \delta n_h = -\gamma_h \delta n_h + \sum_{\lambda pq, p \neq q} C_\lambda \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_\lambda^0(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) u_q^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) \right\},$$

mit der Abklingzeit $1/\gamma_h$, welche hier definiert ist als

$$\gamma_h = \frac{1}{\tau_{nr}} - \sum_{\lambda p} C_\lambda \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW})|^2 \frac{\partial \chi_\lambda(\omega_p)}{\partial n_h^0}.$$

Für die Phasen der Modenkoeffizienten wird die folgende Zeitabhängigkeit angenommen:

$$B_p = \sqrt{S_p} e^{-i\omega_p t + \phi_0}.$$

Eine Lösung der Bewegungsgleichung ergibt näherungsweise

$$\delta n_h \approx \sum_{\lambda pq, p \neq q} C_\lambda \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\gamma_h + i(\omega_p - \omega_q)} B_p B_q^* \chi_\lambda^0(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) u_q^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) \right\}.$$

Da die Größenordnung der Abklingzeit einer Nanosekunde entspricht und die Frequenzdifferenz zweier longitudinaler Moden in der Größenordnung von inversen Pikosekunden liegt, ist die Annahme $\gamma_h(\omega_p - \omega_q) \ll 1$ gerechtfertigt. Das Ergebnis hat die Form

$$\delta n_h \approx -\sum_{\lambda pq, p \neq q} C_\lambda \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \frac{1}{\omega_q - \omega_p} \text{Re} \left\{ B_p B_q^* \chi_\lambda^0(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) u_q^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) \right\}.$$

Nun fehlt noch die Lösung der Bewegungsgleichung (5.4) für die entsprechenden Änderungen der Besetzungsfunktionen. Diese Bewegungsgleichung lautet umgeformt

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\frac{d}{dt} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda - C_\lambda \sum_p \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW})|^2 \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_p) \right) \delta f_{\mathbf{k}'}^\lambda \approx \\ C_\lambda \sum_{pq, p \neq q} \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \text{Im} \left\{ B_p B_q^* \chi_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}(\omega_p) u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) u_q^*(\mathbf{r}_\parallel, z_{QW}) \right\} + \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda \delta n_h \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_h^0}. \end{aligned}$$

Die Gleichung kann analog zu der adiabatischen Eliminierung der mikroskopischen Polarisation in Kapitel 4.5 näherungsweise gelöst werden. Das Ergebnis lautet

$$\delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \approx \sum_{\lambda' p q, p \neq q} C_{\lambda'} \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \operatorname{Im} \left\{ B_p B_q^* u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_q^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right. \\ \left. \left(\delta_{\lambda \lambda'} \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_q - \omega_p) \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda, 0}(\omega_p) - \sum_{\lambda'} \frac{i}{\omega_q - \omega_p} \chi_{\lambda'}^0(\omega_p) \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_q - \omega_p) J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda} \frac{\partial f_{\mathbf{k}''}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\text{h}}^0} \right) \right\}.$$

Bei der Matrix $\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ spielt neben der Streumatrix $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ auch die Frequenzdifferenz der beiden Moden eine Rolle:

$$\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(\Delta\omega) = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} + i\Delta\omega\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - C_{\lambda} \sum_p \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \operatorname{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_p). \quad (5.6)$$

Die Lösung für $\delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ kann weiter vereinfacht werden, indem angenommen wird, dass sich die Suszeptibilitäten bei ω_p und ω_q kaum unterscheiden. Wird deshalb $\chi(\omega_p) \approx \chi(\omega_q) \approx (\chi(\omega_p) + \chi(\omega_q))/2$ angenommen, ergibt sich

$$\delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \approx \sum_{\lambda' p q, p > q} C_{\lambda'} \sqrt{\frac{1}{\omega_q \omega_p}} \operatorname{Re} \left\{ B_p B_q^* u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_q^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right. \\ \left. \left(\delta_{\lambda \lambda'} \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(\omega_q - \omega_p) (\operatorname{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda, 0}(\omega_p) + \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda, 0}(\omega_q)) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{i}{\omega_q - \omega_p} (\operatorname{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_p) + \operatorname{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_q)) \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_q - \omega_p) J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda} \frac{\partial f_{\mathbf{k}''}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\text{h}}^0} \right) \right\}.$$

Soweit wurden nur die Besetzungsfunktionen der Lochbänder betrachtet. Die Besetzungsfunktion der Elektronen sieht genauso aus, nur dass über die Lochbänder λ summiert und bei der Ableitung der Fermi-Dirac-Verteilung nach der Dichte nur ein Band berücksichtigt werden muss. Die dadurch entstehenden Beiträge zur Bewegungsgleichung der Photonenzahlen lauten

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{WW}} = - \sum_{\lambda q} \frac{C_{\lambda}}{\sqrt{\omega_p \omega_q}} \operatorname{Im} \left\{ B_p^* B_q \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_q(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_q) (\delta f_{\mathbf{k}'}^e + \delta f_{\mathbf{k}'}^{\lambda}) \right\} \\ = - \sum_{\substack{\lambda \lambda' q r s \\ r > s}} \frac{C_{\lambda} C_{\lambda'}}{\sqrt{\omega_p \omega_q \omega_r \omega_s}} \operatorname{Im} \left\{ B_p^* B_q \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} u_p^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_q(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_q) \right. \\ \left. \operatorname{Re} \left\{ B_r B_s^* u_r(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) u_s^*(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right. \right. \\ \left. \left. \left(\sum_{\mathbf{k}''} [\tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{e, -1}(\omega_s - \omega_r) + \delta_{\lambda \lambda'} \tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1}(\omega_s - \omega_r)] (\operatorname{Im} \chi_{\mathbf{k}''}^{\lambda', 0}(\omega_r) + \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{k}''}^{\lambda', 0}(\omega_s)) \right. \right. \right. \\ \left. \left. - i \frac{\operatorname{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_r) + \operatorname{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_s)}{\omega_s - \omega_r} \right. \right. \\ \left. \left. \left. \sum_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} \left[\tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{e, -1}(\omega_s - \omega_r) J_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^e \frac{\partial f_{\mathbf{k}'''}^e, \text{FD}}{\partial n_e^0} + \tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1}(\omega_s - \omega_r) J_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^{\lambda} \frac{\partial f_{\mathbf{k}'''}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_{\text{h}}^0} \right] \right) \right\} \right\}$$

In dieser Gleichung sind auch Wechselwirkungen von mehr als zwei Moden enthalten. Wird angenommen,

dass nur zwei Moden aktiv sind und werden nur die dominanten Beiträge berücksichtigt, folgt das Endergebnis

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{WW}} &= - \sum_{\lambda\lambda'} \frac{C_\lambda C_{\lambda'} S_p S_q}{\omega_p \omega_q} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 |u_q(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \\
&\quad \text{Im} \left\{ \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_q) \left(\sum_{\mathbf{k}''} [\tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{e, -1}(\omega_q - \omega_p) + \delta_{\lambda\lambda'} \tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1}(\omega_q - \omega_p)] \left(\text{Im} \chi_{\mathbf{k}''}^{\lambda', 0}(\omega_p) + \text{Im} \chi_{\mathbf{k}''}^{\lambda', 0}(\omega_q) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - i \frac{\text{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_p) + \text{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_q)}{\omega_q - \omega_p} \sum_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} \left[\tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{e, -1}(\omega_q - \omega_p) J_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^e \frac{\partial f_{\mathbf{k}'''}^{e, \text{FD}}}{\partial n_e^0} + \tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1}(\omega_q - \omega_p) J_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^{\lambda} \frac{\partial f_{\mathbf{k}'''}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_h^0} \right] \right\} \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{WW}} &\approx \sum_q \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 |u_q(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 A(\omega_q - \omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}). \tag{5.7}
\end{aligned}$$

Die Wechselwirkung zwischen zwei Moden ist dementsprechend das Integral über die Betragsquadrate der Modenfunktionen mit einem Wechselwirkungsterm. Da die Besetzungsfunktionen vom Ort abhängen können, ist es möglich, dass der Wechselwirkungsterm auch vom Ort abhängt. Dieser Wechselwirkungsterm lautet

$$\begin{aligned}
A(\Delta\omega) &= - \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \text{Im} \left\{ \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_0) \left(\sum_{\mathbf{k}''} [\tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{e, -1}(\Delta\omega) + \delta_{\lambda\lambda'} \tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1}(\Delta\omega)] \text{Im} \chi_{\mathbf{k}''}^{\lambda', 0}(\omega_0) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - i \frac{\text{Im} \chi_{\lambda'}^0(\omega_0)}{\Delta\omega} \sum_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} \left[\tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{e, -1}(\Delta\omega) J_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^e \frac{\partial f_{\mathbf{k}'''}^{e, \text{FD}}}{\partial n_e^0} + \tilde{J}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1}(\Delta\omega) J_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^{\lambda} \frac{\partial f_{\mathbf{k}'''}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_h^0} \right] \right\}, \tag{5.8}
\end{aligned}$$

hierbei wurden Frequenzen ω_p und ω_q durch eine geeignete Frequenz ω_0 ersetzt, damit der Wechselwirkungsterm nur noch von der Frequenzdifferenz $\Delta\omega$ abhängt. Die Frequenz ω_0 kann zum Beispiel dem Maximum in der optischen Verstärkung entsprechen. Dieser Wechselwirkungsterm hängt nur noch von der Bandstruktur und der Wahl der Streuterme ab und kann daher unabhängig von der Form der Moden berechnet werden. Beinhaltet die Laserdiode mehr als einen Quantenfilm, ist es notwendig, über alle Quantenfilme zu summieren. Das Ergebnis lautet

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{WW}} = \sum_{n=1}^{N_{\text{QW}}} \sum_q \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}^n)|^2 |u_q(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}^n)|^2 A_n(\omega_q - \omega_p, \mathbf{r}_{\parallel}).$$

5.2 Modenwechselwirkung mit konstanter Streuzeit

Bevor kompliziertere Streuterme betrachtet werden, macht es Sinn zunächst den einfachsten Fall zu diskutieren, nämlich den einer konstanten Streuzeit, siehe Gl. (3.25):

$$J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda \approx \frac{1}{\tau_s} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Die Matrix $\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda$ aus Gl. (5.6) hat damit näherungsweise die Form

$$\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda(\Delta\omega) \approx \left(i\Delta\omega + \frac{1}{\tau_s} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Der Wechselwirkungsterm lautet

$$A(\Delta\omega) = - \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \text{Im} \left\{ \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_0) \left(\frac{1 + \delta_{\lambda\lambda'}}{i\Delta\omega + \frac{1}{\tau_s}} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda',0}(\omega_0) - i \frac{\text{Im} \chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0(\omega_0)}{\Delta\omega} \frac{1}{\tau_s} \left[\frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{e,\text{FD}}}{\partial n_e^0} + \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}}{\partial n_h^0} \right] \right) \right\}. \quad (5.9)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite entspricht im Wesentlichen der Ableitung der Suszeptibilität bezüglich der Quantenfilmdichten. Unter Benutzung von

$$\chi'(\omega) = \frac{\partial \chi(\omega)}{\partial n_e^0} + \frac{\partial \chi(\omega)}{\partial n_h^0}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} A(\Delta\omega) &= \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \text{Im} \left\{ \tau_s(1 + \delta_{\lambda\lambda'}) \frac{i\Delta\omega\tau_s - 1}{\Delta\omega^2\tau_s^2 + 1} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_0) \text{Im} \chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda',0}(\omega_0) \right\} \\ &\quad + \omega_0^4 \text{Im} \left\{ i \frac{\text{Im} \chi(\omega_0) - i\Delta\omega\tau_s + 1}{\Delta\omega} \chi'(\omega_0) \right\} \\ &\approx - \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \frac{\tau_s(1 + \delta_{\lambda\lambda'})}{\Delta\omega^2\tau_s^2 + 1} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_0) \text{Im} \chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda',0}(\omega_0) \\ &\quad + \omega_0^4 \frac{\text{Im} \chi(\omega_0) \text{Re} \chi'(\omega_0)}{\Delta\omega} + \omega_0^4 \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0) \frac{\tau_s}{\Delta\omega^2\tau_s^2 + 1}. \end{aligned}$$

Hierbei wurde angenommen, dass $\Delta\omega$ sehr viel kleiner als $1/\tau_s$ ist, da die Streuzeit in der Größenordnung von 100 fs liegt. In der obigen Gleichung ist leicht zu erkennen, dass der erste Term symmetrisch in $\Delta\omega$ ist und die Form einer Lorentz-Kurve mit einer Verbreiterung $1/\tau_s$ hat. Der zweite Term ist asymmetrisch in $\Delta\omega$ und zeigt ein $1/\Delta\omega$ Verhalten. Der dritte Term ist wieder symmetrisch und zeigt das gleiche Verhalten wie der erste Term. Die Vorfaktoren hängen hierbei von den Besetzungsfunktionen und der Dephasierungsmatrix ab. Da sich die symmetrischen Terme und der asymmetrische Term so unterschiedlich verhalten, macht es Sinn, diese getrennt zu diskutieren:

$$A(\Delta\omega) = A_{\text{Symm}}(\Delta\omega) + A_{\text{Asymm}}(\Delta\omega),$$

mit

$$\begin{aligned} A_{\text{Symm}}(\Delta\omega) &= \frac{A(\Delta\omega) + A(-\Delta\omega)}{2} = - \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \frac{\tau_s(1 + \delta_{\lambda\lambda'})}{\Delta\omega^2\tau_s^2 + 1} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_0) \text{Im} \chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda',0}(\omega_0) \\ &\quad + \omega_0^4 \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0) \frac{\tau_s}{\Delta\omega^2\tau_s^2 + 1} \end{aligned} \quad (5.10)$$

und

$$A_{\text{Asymm}}(\Delta\omega) = \frac{A(\Delta\omega) - A(-\Delta\omega)}{2} = \omega_0^4 \frac{\text{Im} \chi(\omega_0) \text{Re} \chi'(\omega_0)}{\Delta\omega}. \quad (5.11)$$

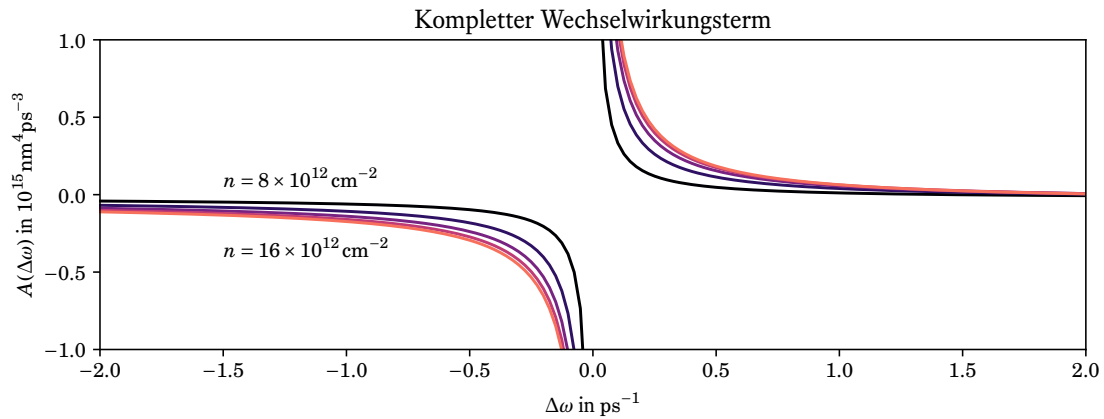


Abbildung 5.1: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz von zwei Moden, dargestellt für verschiedene Ladungsträgerdichten, berechnet mit Gl. (5.8).

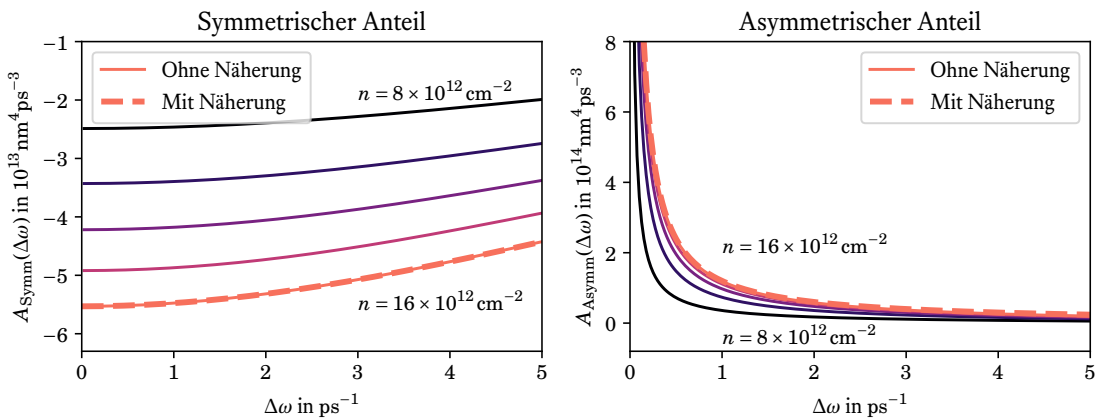


Abbildung 5.2: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz für verschiedene Ladungsträgerdichten, aufgeschlüsselt nach asymmetrischen und symmetrischen Anteilen. Zum Vergleich sind hier auch die Näherungen aus Gl. (5.10) und (5.11) für die größte Ladungsträgerdichte dargestellt.

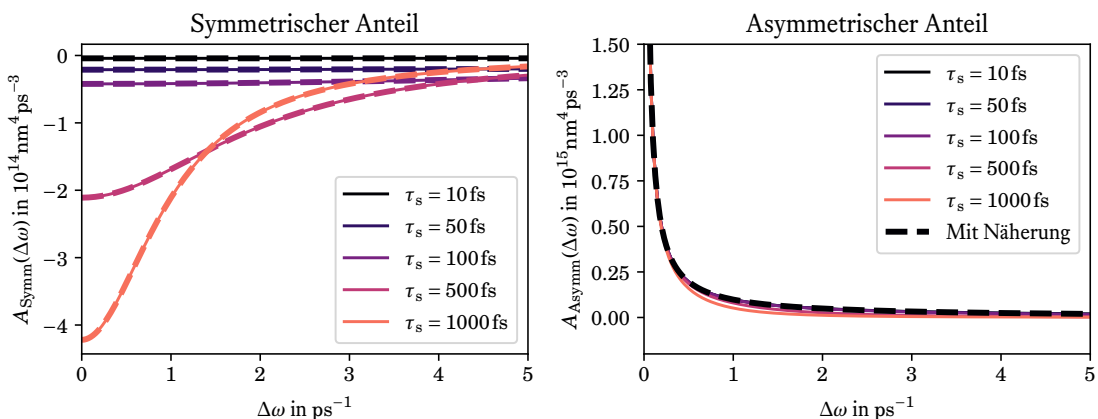


Abbildung 5.3: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz von zwei Moden, dargestellt für verschiedene Streuzeiten. Die durchgezogenen Linien sind hierbei die genaueren Rechnungen mit Gl. (5.8) und die gestrichelten Linien zeigen die Näherungen aus Gl. (5.10) und (5.11).

Beim asymmetrischen Wechselwirkungsteil lässt sich die Ableitung des Realteils der Suszeptibilität durch den Antiguiding-Faktor α ausdrücken: $\text{Re } \chi' = \alpha \text{Im } \chi'$. Der Imaginärteil ist proportional zur optischen Verstärkung, die oft durch $G = dg(n - n_{\text{tr}})$ angenähert wird, mit dem differentiellen Gain dg . Der asymmetrische Wechselwirkungsterm ist proportional zu αdg^2 , was auch in der Literatur zu finden ist [56–59].

Für ein einfaches Beispiel sollen nun die Wechselwirkungsterme diskutiert und das Ergebnis aus Gl. (5.9) mit den Näherungen verglichen werden. Die Wechselwirkungsterme für verschiedene Ladungsträgerdichten sind für eine mit der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode berechnete Bandstruktur in Abb. 5.2 dargestellt. Die Parameter sind in Tabelle 9.13 im Anhang aufgelistet. Die Wechselwirkungsterme werden dabei immer am Maximum der optischen Verstärkung ausgewertet, damit dieses existiert beginnen die Ladungsträgerdichten hier bei $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. In Abb. 5.1 ist der komplette Wechselwirkungsterm gezeigt, welcher in Abb. 5.2 in symmetrische und asymmetrische Anteile aufgespalten wurde. Mit zunehmender Ladungsträgerdichte wird die Modenwechselwirkung immer stärker, was auch für die beiden Anteile für sich betrachtet gilt. Der symmetrische Wechselwirkungsterm ist hierbei immer negativ und nimmt gleichmäßig mit der Ladungsträgerdichte zu. Der asymmetrische Wechselwirkungsterm wird auch größer, für große Ladungsträgerdichten sind die Änderungen allerdings klein. Außerdem sind noch Rechnungen mit den Näherungen aus Gleichungen (5.10) und (5.11) dargestellt. Für die hier gewählte Streuzeit von 100 fs stimmen die Ergebnisse gut mit exakten Rechnung überein.

Um den Gültigkeitsbereich der Näherungen zu untersuchen, wurden die Wechselwirkungsterme in Abb. 5.3 für unterschiedliche Streuzeiten und eine feste Ladungsträgerdichte dargestellt. Hierbei lässt sich beobachten, dass es wie erwartet eine gute Übereinstimmung für Streuzeiten unterhalb von 100 fs gibt. Bei dem asymmetrischen Anteil sind die Abweichungen selbst bei sehr großen Streuzeiten noch vergleichsweise klein.

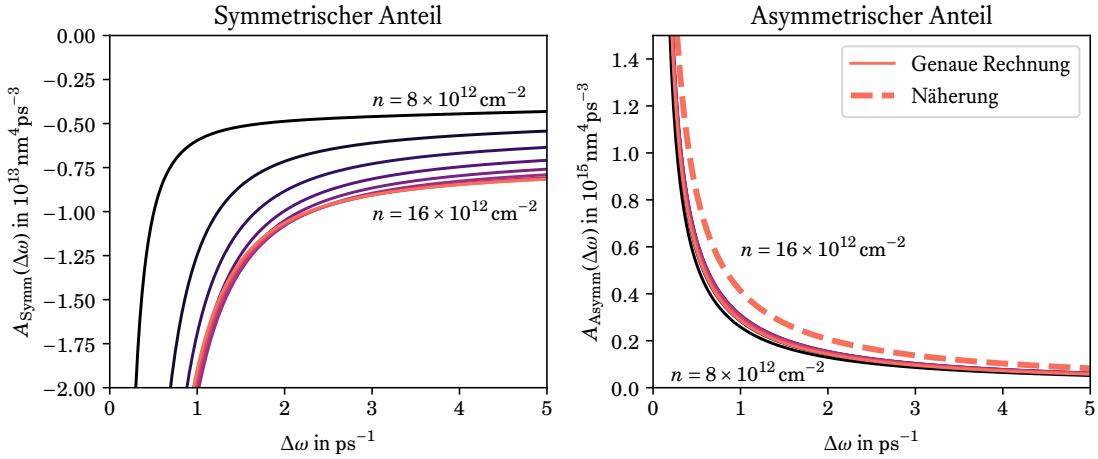


Abbildung 5.4: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz von zwei Moden für verschiedene Ladungsträgerdichten unter Berücksichtigung der Coulomb-Streuung und Elektron-Phonon-Streuung für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur. Hartree-Fock-Beiträge wurden hierbei vernachlässigt. Die gestrichelte Linie stellt die Näherung aus Gl. (5.11) dar.

5.3 Kompliziertere Streuterme

Im vorigen Kapitel wurde unter Benutzung einer einfachen Streuzeit festgestellt, dass der Term auf der ersten Zeile von Gl. (5.8) einen symmetrischen Wechselwirkungsterm liefert, während der Term auf der zweiten Zeile die Moden in asymmetrischer Weise miteinander koppelt. Wird anstelle einer konstanten Streuzeit die Streuung detaillierter beschrieben, zum Beispiel über Coulomb-Streuung oder Phonon-Streuung, ist dies nicht mehr der Fall. Laut Gl. (3.26) besitzen die Streuterme für Coulomb-Streuung und Phonon-Streuung die folgende Eigenschaft:

$$\sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda \frac{\partial f_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \text{FD}}}{\partial n_\lambda} = 0. \quad (5.12)$$

Daher verschwindet hier der Term in der zweiten Zeile von Gl. (5.8) und der Wechselwirkungsterm lautet nur noch

$$A(\Delta\omega) = - \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \text{Im} \left\{ \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_0) [\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\Delta\omega) + \delta_{\lambda\lambda'} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\Delta\omega)] \text{Im} \lambda_{\mathbf{k}'}^{\lambda', 0}(\omega_0) \right\}$$

Der Wechselwirkungsterm ist nun simpler, allerdings lassen sich symmetrische und asymmetrische Anteile nicht mehr so leicht trennen wie das bei dem einfachen Streuterm der Fall war. Bei der Streumatrix $\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ aus Gl. (5.6) wird zunächst der Einfluss der Photonenzahlen vernachlässigt. Die Streumatrizen lauten dementsprechend

$$\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda(\Delta\omega) = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda + i\Delta\omega \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Beispiele für kompliziertere Streuterme sind die Coulomb-Streuung mit dynamischer Abschirmung und die Elektron-Phonon-Streuung. In Abb. 5.4 und Abb. 5.5 sind die daraus resultierenden Wechselwirkungsterme für verschiedene Ladungsträgerdichten gezeigt, dabei wurden die Hartree-Fock-Korrekturen einmal vernachlässigt und einmal berücksichtigt. Für die Dephasierung wurden die gleichen Streuterme verwendet, alle Parameter sind in Tabelle 9.12 im Anhang aufgeführt.

Der asymmetrische Anteil hat in beiden Fällen die gleiche Form wie in Abb. 5.2, wo eine einfache Streuzeit verwendet wurde. Hier nimmt die Stärke der Wechselwirkung für größere Ladungsträgerdichten zu und divergiert für $\Delta\omega \rightarrow 0$. Zum Vergleich wurde auch die Näherung aus Gl. (5.11) dargestellt, hierbei sind allerdings größere Abweichungen sichtbar.

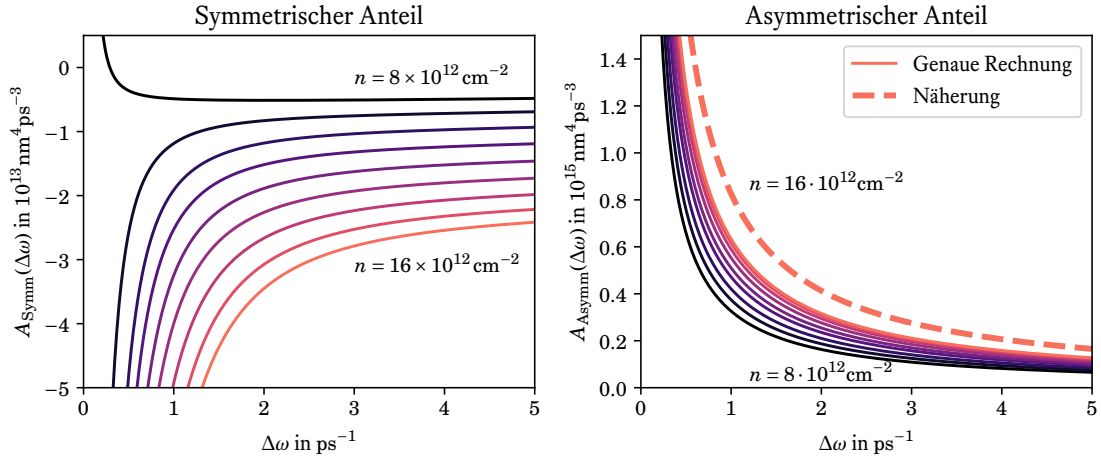


Abbildung 5.5: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz von zwei Moden für verschiedene Ladungsträgerdichten unter Berücksichtigung der Coulomb-Streuung und Elektron-Phonon-Streuung für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur. Hartree-Fock-Beiträge wurden hierbei berücksichtigt. Die gestrichelte Linie stellt die Näherung aus Gl. (5.11) dar.

Noch interessanter ist hier das Verhalten des symmetrischen Anteils. Für größere Frequenzabstände gibt es eine Ähnlichkeit im Vergleich zu dem symmetrischen Anteil in Abb. 5.2, für kleine Frequenzabstände gibt es aber sehr große qualitative Unterschiede. Während sich bei einem einfachen Streuterm der symmetrische Anteil für $\Delta\omega \rightarrow 0$ einem bestimmten Wert annähert, scheint bei realistischeren Streutermen der symmetrische Anteil zu divergieren, genau wie der asymmetrische Anteil. Grund hierfür ist die Eigenschaft aus Gl. (5.12), welche dafür sorgt, dass die Determinante der Streumatrizen $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}$ verschwinden muss. Für $\Delta\omega = 0$ gilt $\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(\Delta\omega) = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}$, dementsprechend gestaltet sich die numerische Lösung des Gleichungssystems für kleine $\Delta\omega$ schwierig.

Wird zusätzlich zur Coulomb-Streuung und Elektron-Phonon-Streuung noch eine große konstante Streuzeit τ_s von 1 ps verwendet, ergeben sich die Wechselwirkungsterme in Abb. 5.6. Beim symmetrischen Anteil für $\Delta\omega > \tau_s^{-1}$ ergibt sich das gleiche Verhalten wie in Abb. 5.4 und für $\Delta\omega < \tau_s^{-1}$ wird wie erwartet der Verlauf der Kurve durch die Streuzeit bestimmt. Beim asymmetrischen Term sorgt diese zusätzliche Streuzeit für eine Annäherung der Kurve an die Näherung aus Gl. (5.11), vor allem für kleine $\Delta\omega$.

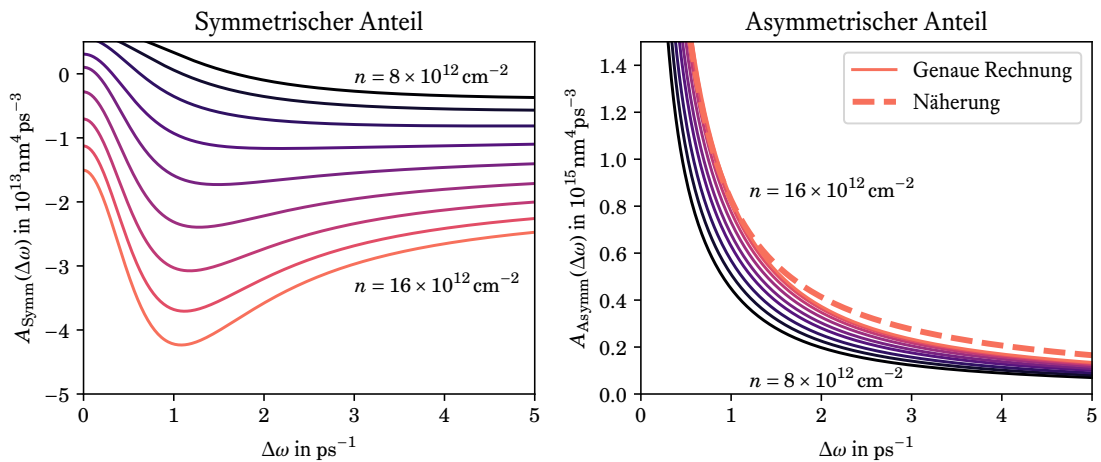


Abbildung 5.6: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz von zwei Moden für verschiedene Ladungsträgerdichten unter Berücksichtigung der Coulomb-Streuung, der Elektron-Phonon-Streuung und einer zusätzlichen Streuzeit von 1 ps für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur. Hartree-Fock-Beiträge wurden hierbei berücksichtigt. Die gestrichelte Linie stellt die Näherung aus Gl. (5.11) dar.

5.4 Einfluss der Photonendichte

Im letzten Unterkapitel wurde der Einfluss des optischen Feldes auf die Streumatrix vernachlässigt. In diesem Kapitel soll dieser Einfluss auf die Wechselwirkung der Moden untersucht werden. Dafür wird in der Streumatrix aus Gl. (5.6) zunächst eine Photonendichte s eingeführt:

$$\begin{aligned}\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda(\Delta\omega) &= J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda + i\Delta\omega\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - C_\lambda \sum_p \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_p) \\ &\approx J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda + i\Delta\omega\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - s \frac{C_\lambda}{\omega_0} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_0).\end{aligned}$$

Dabei lautet die ortsabhängige Photonendichte

$$s = \sum_p S_p |u_p(\mathbf{r}_\parallel, z_{\text{QW}})|^2.$$

In Abb. 5.7 ist die Modenwechselwirkung für die Parameter aus Tabelle 9.12 für verschiedene Photonendichten dargestellt. Beim symmetrischen Anteil der Wechselwirkung sorgt die Photonendichte dafür, dass die Wechselwirkung für $\Delta\omega \rightarrow 0$ nicht mehr divergiert. Während höhere Photonendichten die Wechselwirkung bei kleinen $\Delta\omega$ abschwächen, sorgen sie bei höheren $\Delta\omega$ für eine stärkere Wechselwirkung. Bei dem asymmetrischen Anteil der Wechselwirkung lässt sich ebenso beobachten, dass die Divergenz für $\Delta\omega \rightarrow 0$ nun aufgehoben wird. Dementsprechend muss die asymmetrische Wechselwirkung nun für $\Delta\omega \rightarrow 0$ verschwinden, für kleine $\Delta\omega$ steigt die Wechselwirkung stark an und fällt für größere $\Delta\omega$ wieder ab. Eine weitere Erhöhung der Photonendichte führt zu einer Verringerung des Maximums, allerdings bleibt das Verhalten für größere $\Delta\omega$ unverändert.

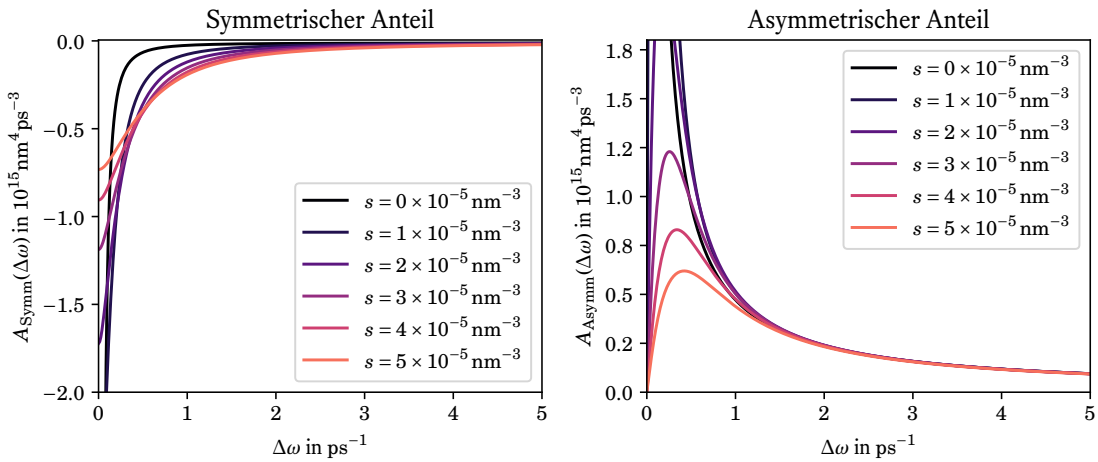


Abbildung 5.7: Modenwechselwirkungsterm abhängig von der Frequenzdifferenz von zwei Moden für verschiedene Photonendichten für eine Ladungsträgerdichte von $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ unter Berücksichtigung der Coulomb-Streuung und der Elektron-Phonon-Streuung. Hartree-Fock-Beiträge wurden hierbei berücksichtigt.

5.5 Einfluss der Modenfunktionen

Nun muss noch der Einfluss der Modenfunktionen diskutiert werden, hierbei werden die transversalen Moden mit m nummeriert und die longitudinalen Moden mit p . Die Modenfunktionen haben die Form

$$u_{mp}(\mathbf{r}) \approx t_m(x, z) g_p(y).$$

Weiterhin wird zunächst angenommen, dass die Elektronen- und Lochdichten im Quantenfilm nicht vom Ort abhängen. Die Wechselwirkung zweier Moden ist proportional zum Integral

$$\begin{aligned} I_{mp,nq} &= \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_{mp}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 |u_{nq}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \\ &= \int dx |t_m(x, z_{\text{QW}})|^2 |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \int dy |g_p(y)|^2 |g_q(y)|^2 \\ &= I_{mn} I_{pq}. \end{aligned}$$

Der longitudinale Anteil der Modenfunktion wird im einfachsten Fall durch laufende Wellen oder stehende Wellen beschrieben, siehe Kapitel 2. Für stehende Wellen

$$g_p(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{p\pi y}{L}\right).$$

ergibt das entsprechende Integral für den longitudinalen Anteil

$$I_{pq} = \frac{4}{L^2} \int dy \sin^2\left(\frac{p\pi y}{L}\right) \sin^2\left(\frac{q\pi y}{L}\right) = \frac{4}{L} \cdot \frac{1}{4} = \frac{1}{L}, \quad (5.13)$$

dabei wurde $p \neq q$ angenommen, da es für $p = q$ keine Ladungsträgervibrationen in Ausbreitungsrichtung der optischen Moden gibt. Für laufende Wellen

$$g_p(y) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{i \frac{p\pi y}{L}},$$

es folgt das gleiche Ergebnis wie für stehende Wellen. Übrig bleibt die Diskussion der transversalen Moden, hier ist $n = m$ möglich. Eine einfache Näherung für die transversalen Moden ist [95]

$$t_m(x, z) \approx C(z) \sqrt{\frac{2}{w}} \sin\left(\frac{m\pi x}{w}\right),$$

hierbei bestimmt w die Ausdehnung der Modenfunktion in der lateralen Richtung. Das Integral in x -Richtung ergibt

$$I_{nm} \approx |C(z_{\text{QW}})|^4 \frac{4}{w^2} \int_0^w dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{w}\right) \sin^2\left(\frac{m\pi x}{w}\right) = \frac{|C(z_{\text{QW}})|^4}{w} \begin{cases} \frac{3}{2} & \text{für } n = m \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (5.14)$$

Dementsprechend ist die Wechselwirkung einer transversalen Mode mit sich selber näherungsweise 50 % stärker als die Wechselwirkung mit einer anderen transversalen Mode. Die Annahmen, die bei dieser Diskussion benutzt wurden, sind natürlich nur bedingt realistisch. Es macht in einer möglichst realistischen Simulation Sinn, die Ortsabhängigkeit der Ladungsträgerdichten zu betrachten und die Integrale numerisch auszuwerten, um die Modenwechselwirkung möglichst genau zu behandeln.

Um eine qualitativ korrekte Modendynamik zu simulieren, wurde in Kapitel 4.11 ein symmetrischer Wechselwirkungsterm benötigt. Weil in Kapitel 4.11 einfache Streu- und Dephasierungsterme verwendet wurden, sind die Wechselwirkungsterme aus Gl. (5.10) und (5.11) relevant. In Kapitel 4 wurde außerdem nur eine transversale Mode betrachtet, daher wird in der folgenden Diskussion nur die transversale Mode mit $m = 1$ berücksichtigt. Zusammen mit Gl. (5.13) und Gl. (5.14) lauten die Wechselwirkungsterme

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{WW}} = \frac{3}{2} \frac{|C(z_{\text{QW}})|^4}{Lw} \sum_{q \neq p} \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} [A_{\text{Symm}}(\omega_q - \omega_p) + A_{\text{Asymm}}(\omega_q - \omega_p)]. \quad (5.15)$$

In Kapitel 4 wird der Faktor I_t genutzt, um die Amplitude der Modenfunktion am Ort des Quantenfilms zu beschreiben. Mit Gl. (4.7) und den Definitionen in diesem Kapitel lautet dieser Faktor

$$I_t = \int_0^w dx |t(x, z_{\text{QW}})|^2 = \int_0^w dx \frac{2}{w} \sin^2\left(\frac{\pi x}{w}\right) |C(z_{\text{QW}})|^2 = |C(z_{\text{QW}})|^2.$$

Allerdings wurde im letzten Kapitel in einem Zwischenschritt in x -Richtung gemittelt, daher haben auch die Dichtevibrationen der Ladungsträgerdichte keine x -Abhängigkeit. Die Form der transversalen Mode hat in diesem Fall keinen Einfluss und der Faktor $3/2$ aus der Gl. (5.15) muss durch 1 ersetzt werden:

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{WW}} = \frac{I_t^2}{Lw} \sum_{q \neq p} \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} [A_{\text{Symm}}(\omega_q - \omega_p) + A_{\text{Asymm}}(\omega_q - \omega_p)].$$

Wird nun der asymmetrische Anteil mit dem Wechselwirkungsterm aus Gl. (4.17) verglichen, fällt auf, dass hier ein Faktor $1/2$ fehlt. Dies liegt daran, dass in Kapitel 4.8 die Ladungsträgerdichtevibrationen mit sehr hohen Wellenzahlen vernachlässigt wurden, da sie aufgrund der Ladungsträger-Diffusion sehr schnell abklingen. Diese Ladungsträgerdichtevibrationen tragen allerdings in gleichem Maße zu der Modenwechselwirkung bei wie die Vibrationen mit kleinen Wellenzahlen. Der Effekt der Diffusion wurde in diesem Kapitel aber noch nicht berücksichtigt; eine Möglichkeit, um dies zu tun, wäre, einen zusätzlichen Faktor $1/2$ zum Integral in Gl. (5.13) hinzuzufügen:

$$I_{pq} = \frac{1}{2L}.$$

Damit ist der asymmetrische Wechselwirkungsterm identisch mit dem aus Gl. (4.17) und der noch benötigte zusätzliche symmetrische Wechselwirkungsterm lautet:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{Symm}} &= \frac{1}{2} \frac{I_t^2}{Lw} \sum_{q \neq p} \frac{S_p S_q}{\omega_p \omega_q} A_{\text{Symm}}(\omega_q - \omega_p) \\ A_{\text{Symm}}(\Delta\omega) &= -2C_h^2 \frac{\tau_s}{\Delta\omega^2 \tau_s^2 + 1} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{h,-1}(\omega_0) \text{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{h,0}(\omega_0) \\ &\quad + \omega_0^4 \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0) \frac{\tau_s}{\Delta\omega^2 \tau_s^2 + 1} \\ &= \frac{\tau_s}{\Delta\omega^2 \tau_s^2 + 1} \left[2C_h^2 \gamma^2 \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - f_{\mathbf{k}}^e - f_{\mathbf{k}}^h}{((\hbar\omega_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\mathbf{k}}^h)^2 + \gamma^2)^2} + \omega_0^4 \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0) \right]. \end{aligned} \quad (5.16)$$

5.6 Spektrales Lochbrennen

Bei der Herleitung des Modenwechselwirkungsterms aus Gl. (5.7) wurden bisher nur Beiträge zur Änderung der Besetzungsfunktionen aufgrund von zwei verschiedenen longitudinalen Moden berücksichtigt. Zu lösen sind noch die Bewegungsgleichungen für die Besetzungsfunktion $f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}$, wo alle anderen Effekte enthalten sind. Zur Reduzierung des numerischen Aufwands ist es nützlich, die Besetzungsfunktionen in der Laserdynamik durch Fermi-Dirac-Funktionen zu beschreiben. In diesem Fall ist es von Interesse, zu untersuchen, wie stark die tatsächlichen Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen abweichen. Diese Abweichungen hängen über die stimulierte Emission von der Feldstärke bzw. von den Photonenzahlen ab und können zu einer Verringerung der optischen Verstärkung bei der Laser-Wellenlänge führen. Dieser Effekt wird als spektrales Lochbrennen bezeichnet und ist zum Beispiel in Ref. [62, S. 341] beschrieben.

In diesem Kapitel sollen die Abweichungen für die in dieser Arbeit verwendete Theorie untersucht werden, dazu werden zunächst die Bewegungsgleichungen der Besetzungsfunktionen aus Gl. (5.3) benötigt, diese lauten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0} \approx & \sum_p C_\lambda \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p) + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}) \\ & - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^{e,0} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}}{\tau_{\text{nr}}} - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda (f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,0} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Diese Besetzungsfunktion werden nun in eine Fermi-Dirac-Verteilung und Abweichungen davon aufgeteilt:

$$f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0} = f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}} + \delta f_{\mathbf{k}}^\lambda.$$

Wird angenommen, dass die Temperatur der Fermi-Dirac-Verteilung der Gittertemperatur entspricht und damit konstant ist, hängt die Verteilung nur noch von dem chemischen Potential ab. An dieser Stelle wird das chemische Potential so gewählt, dass $f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}$ und $f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}$ die gleiche Ladungsträgerdichte beschreiben, siehe auch Kapitel 3.2. Für die Löcher muss beispielsweise gelten:

$$n_{\text{h}} = \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0} = \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}.$$

Für die Bewegungsgleichung der Abweichungen $\delta f_{\mathbf{k}}^\lambda$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta f_{\mathbf{k}}^\lambda \approx & \sum_p C_\lambda \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p) + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}) \\ & - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^{e,0} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}}{\tau_{\text{nr}}} - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda \delta f_{\mathbf{k}'}^\lambda - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}}{\partial n_{\text{h}}} \frac{d}{dt} n_{\text{h}}. \end{aligned}$$

Diese Gleichung gilt für die Löcher, die Gleichung für die Elektronen hat die gleiche Form. Im Gleichgewicht verschwinden die Zeitableitungen und die Lösung lautet

$$\delta f_{\mathbf{k}}^\lambda \approx \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1} \left(\sum_p C_\lambda \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^\lambda(\omega_p) + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}'}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,0}) - B_{\mathbf{k}'}^\lambda f_{\mathbf{k}'}^{e,0} f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,0} - \frac{f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,0}}{\tau_{\text{nr}}} \right), \quad (5.18)$$

allerdings steht auf der rechten Seite noch die Besetzungsfunktion $f_{\mathbf{k}}^{\lambda,0}$, welche die Abweichungen enthält. Daher muss hier eigentlich ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden. Um dies in ein lineares Gleichungssystem zu verwandeln, werden die Terme auf der rechten Seite entsprechend entwickelt. In diesem Fall gilt im Gleichgewicht

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\frac{d}{dt} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda - C_\lambda \sum_p \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_p) + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda + \frac{1}{\tau_{\text{nr}}} + B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^{e,\text{FD}} \right) \right) \delta f_{\mathbf{k}'}^\lambda \approx \\ C_\lambda \sum_p \frac{S_p}{\omega_q} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}(\omega_p) |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}) - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^{e,\text{FD}} f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}} - \frac{f_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}}{\tau_{\text{nr}}}. \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet $\chi_{\mathbf{k}}^{\lambda,\text{FD}}(\omega)$ Beiträge zur Suszeptibilität, welche für Fermi-Dirac-Verteilungen bestimmt wurden. Die Lösung dieser Gleichung lautet näherungsweise

$$\delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \approx \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1} \left(C_{\lambda} \sum_p \frac{S_p}{\omega_p} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}(\omega_p) |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}'}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}) - B_{\mathbf{k}'}^{\lambda} f_{\mathbf{k}'}^{e,\text{FD}} f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}} - \frac{f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}}{\tau_{\text{nr}}} \right), \quad (5.19)$$

mit der Matrix

$$\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} - C_{\lambda} \sum_p \frac{S_p}{\omega_p} |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_p) + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \frac{1}{\tau_{\text{nr}}} + B_{\mathbf{k}}^{\lambda} f_{\mathbf{k}}^{e,\text{FD}} \right). \quad (5.20)$$

An einem Beispiel soll nun untersucht werden, wie gut die Lösung dieser Gleichung die tatsächlichen Abweichungen der Besetzungsfunktionen widerspiegelt. Dazu wird die Bewegungsgleichung (5.17) für die Besetzungsfunktion und eine longitudinale Mode numerisch gelöst und so die tatsächlichen Abweichungen bestimmt. Dabei werden die gleichen Streuterme wie in Kapitel 4 und die Parameter in Tabelle 9.10 verwendet. Da in diesem Fall auch die genauen Besetzungsfunktionen bekannt sind, ist es hier auch möglich, Gl. (5.18) zu verwenden und mit Gl. (5.19) zu vergleichen.

In Abb. 5.8 ist ein Beispiel einer Rechnung für einen Parametersatz gezeigt. Die tatsächlichen Abweichungen stimmen sehr gut mit den aus Gleichungen (5.18) und (5.19) berechneten überein. Da auf der rechten Seite neben dem Term der optischen Verstärkung noch der Pumfterm und die Verluste eine Rolle spielen, ist es auch von Interesse den Einfluss dieser Terme zu diskutieren. Dies ist auch in Abb. 5.8 dargestellt. Hierbei ist leicht zu sehen, dass der Term der optischen Verstärkung eine Verringerung der Besetzungsfunktion bei der Frequenz der optischen Mode hervorruft, welche in diesem Fall energetisch leicht über der Bandlücke liegt. Diese Verringerung wird verstärkt durch nichtradiative Verluste und spontane Emission. Der Pumfterm muss diese Verringerung der Dichte ausgleichen und führt zu einer Erhöhung der Besetzungsfunktion bei höheren Wellenvektoren. Um daher die Abweichungen der Besetzungsfunktion genau zu berechnen, scheint es notwendig zu sein, alle Terme auf der rechten Seite von Gl. (5.19) zu berücksichtigen.

In Gl. (5.20) hat die Matrix eine komplexe Form, es kann daher sinnvoll sein, zu diskutieren, welche Terme hier am wichtigsten sind. Dies ist in Abb. 5.8 gezeigt. Um überhaupt einen Unterschied zu sehen, wurde hier die Streuzzeit auf 1 ps erhöht. Die Abweichungen von der Fermi-Dirac-Verteilung sind hierbei schon vergleichsweise hoch. Wird die Matrix in Gl. (5.20) durch die Streumatrix ersetzt, dann werden die Abweichungen der Besetzungsfunktion von einer Fermi-Dirac-Verteilung insgesamt immer noch gut wiedergegeben, nur in der Nähe $k = 0.25 \text{ nm}^{-1}$ sind die Abweichungen zu groß. Für kleinere Streuzzeiten in der Größenordnung von 100 fs ist kein Unterschied mehr sichtbar, daher scheint die Näherung, die volle Matrix durch die Streumatrix zu ersetzen, gerechtfertigt zu sein. In Gl. (5.19) bedeutet die Nutzung der vollen Matrix keinen großen numerischen Mehraufwand, außerdem stehen die gleichen Terme auf der rechten Seite, sodass dadurch auch keine Parameter eingespart werden.

Der Einfluss der Stromstärke auf die Abweichungen ist in Abb. 5.9 gezeigt. Wie erwartet ist die Abweichung der Besetzungsfunktion näherungsweise proportional zu der Photonenzahl bzw. zu $I - I_{\text{thr}}$. Wie in Abb. 5.10 gezeigt, ist ein ähnliches Verhalten bei Änderung der Streuzzeit beobachtbar, dabei wachsen die Abweichungen mit $1/\tau_s$.

Die Abweichungen von der Fermi-Dirac-Verteilung hängen von den Photonenzahlen und der Stromstärke ab. Allerdings lautet die Bewegungsgleichung für die Ladungsträgerdichte

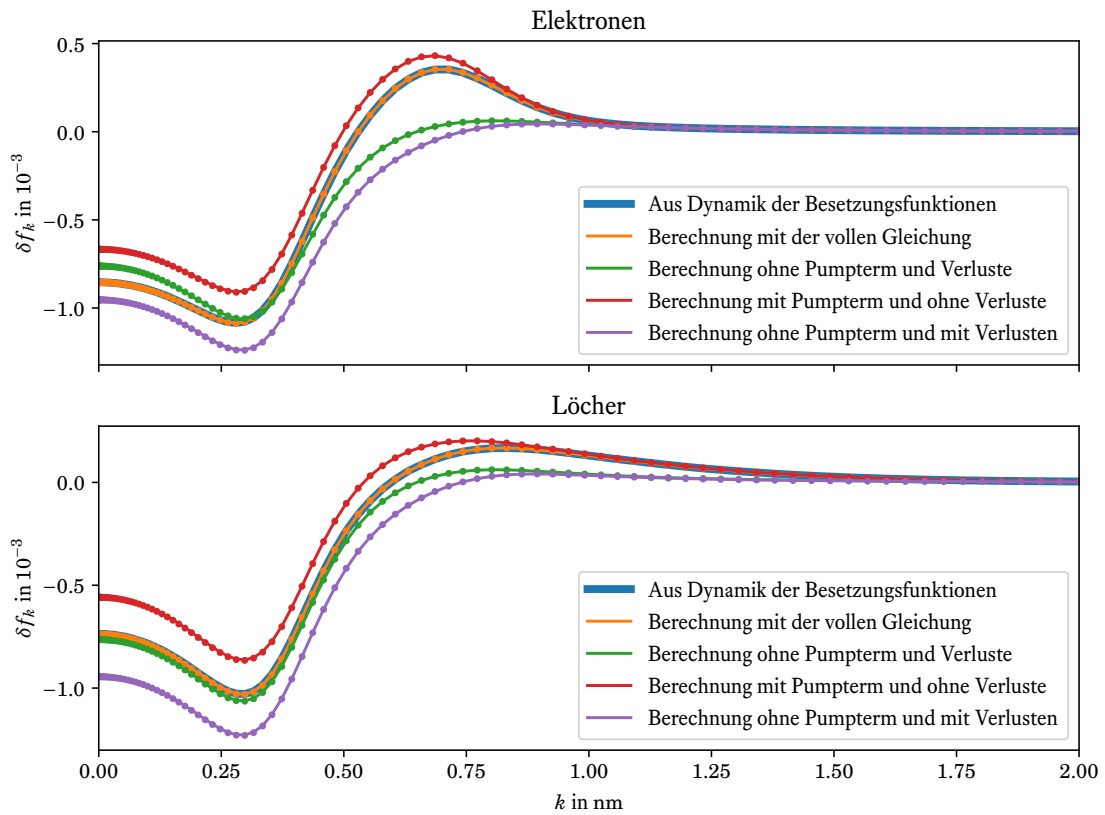
$$\frac{d}{dt} n_{\text{h}}^0 \approx \frac{j}{e} \eta_{\lambda}(n_{\text{h}}^0) - B(n_{\text{e}}^0, n_{\text{h}}^0) - \frac{n_{\text{h}}^0}{\tau_{\text{nr}}} + \sum_p \omega_p S_p |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi^{\text{FD}}(\omega_p).$$

Im Gleichgewicht gilt daher

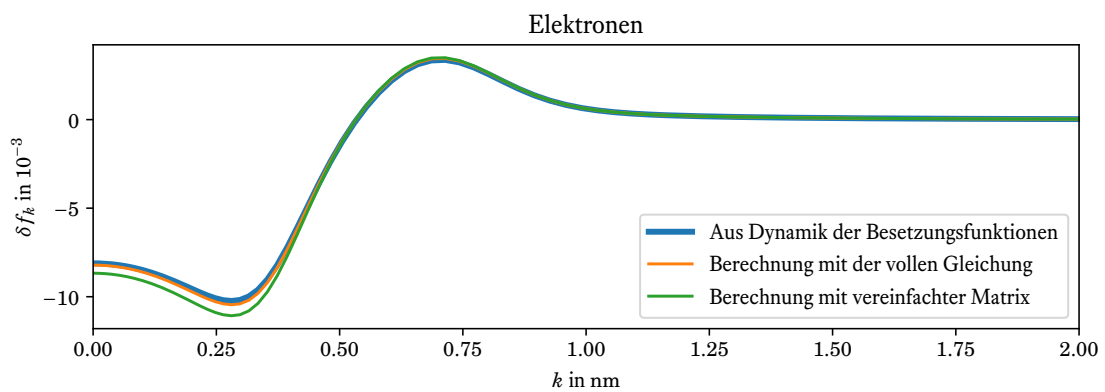
$$\frac{j_{\text{eq}}}{e} = \eta_{\lambda}(n_{\text{h}}^0)^{-1} \left(B(n_{\text{e}}^0, n_{\text{h}}^0) + \frac{n_{\text{h}}^0}{\tau_{\text{nr}}} - \sum_p \omega_p S_p |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi^{\text{FD}}(\omega_p) \right).$$

Werden die Photonenzahlen folgendermaßen in einer Photonendichte zusammengefasst:

$$s = \sum_p S_p |u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2,$$



(a) Einfluss der Terme auf der rechten Seite



(b) Einfluss der verschiedenen Beiträge zur Matrix

Abbildung 5.8: Abweichung der Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen für eine Stromstärke von 100 mA für eine parabolische Bandstruktur mit den effektiven Massen aus Tabelle 9.10. Es werden verschiedene Näherungen sowie die Berechnung mit der vollen Gleichung verglichen. In der oberen Abbildung wurden verschiedene Terme auf der rechten Seite von Gl. (5.19) berücksichtigt und unten wird der Einfluss der verschiedenen Beiträge zu der Matrix in Gl. (5.20) diskutiert.

folgt für die Gleichgewichtsstromdichte

$$\frac{j_{\text{eq}}^{\text{h}}}{e} = \eta_{\lambda}(n_{\text{h}}^0)^{-1} \left(B(n_{\text{e}}^0, n_{\text{h}}^0) + \frac{n_{\text{h}}^0}{\tau_{\text{nr}}} - \omega_0 \text{Im} \chi^{\text{FD}}(\omega_0) s \right).$$

Dabei wurde die Annahme in der Suszeptibilität gemacht, dass sich die Frequenzen nur schwach voneinander unterscheiden: $\omega_p \approx \omega_0$. Damit hängen die Abweichungen von der Fermi-Dirac-Verteilung nur von s ab und das Ergebnis lautet

$$\delta f_{\mathbf{k}}^{\lambda}(s) \approx \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1} \left(C_{\lambda} \frac{s}{\omega_0} \text{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}(\omega_0) + \frac{j_{\text{eq}}^{\text{h}}}{e} \eta_{\mathbf{k}'}^{\lambda} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}) - B_{\mathbf{k}'}^{\lambda} f_{\mathbf{k}'}^{\text{e,FD}} f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}} - \frac{f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}}{\tau_{\text{nr}}} \right),$$

mit

$$\tilde{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}(s) = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} - C_{\lambda} \frac{s}{\omega_0} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega_0) + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\frac{j_{\text{eq}}^{\text{h}}}{e} \eta_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \frac{1}{\tau_{\text{nr}}} + B_{\mathbf{k}}^{\lambda} f_{\mathbf{k}}^{\text{e,FD}} \right).$$

Die Änderung der Suszeptibilität lautet

$$\delta \chi(\omega, s) = \sum_{\lambda \mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{C_{\lambda}}{\omega^2} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1}(\omega) \left(\delta f_{\mathbf{k}'}^{\text{e}}(s) + \delta f_{\mathbf{k}'}^{\lambda}(s) \right). \quad (5.21)$$

Da die Modenfrequenzen sich nur schwach unterscheiden, wird in den Laser-Simulation die Änderung der Suszeptibilität nur am Maximum der optischen Verstärkung bestimmt und für alle optischen Moden gleich verwendet.

In Abb. 5.11 ist die Abhängigkeit der Suszeptibilitäts-Änderung am Maximum der optischen Verstärkung von der Photonendichte s für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur mit realistischen Streutermen dargestellt. Dabei wurden die Parameter aus Tabelle 9.12 im Anhang verwendet. Mit den hier gewählten Parametern fällt die Änderung des Imaginärteils für kleine Ladungsträgerdichte noch negativ aus, wird für größere Ladungsträgerdichten aber positiv, was eine Verringerung der optischen Verstärkung bedeutet. Beim Realteil zeigt sich hingegen das entgegengesetzte Verhalten, dementsprechend wird bei größeren Ladungsträgerdichten der Brechungsindex kleiner. In Abb. 5.12 wurde der Einfluss der verschiedenen Streutermen untersucht. Wird anstelle beider Streutermen nur ein einzelner Streuterm verwendet, weichen die Besetzungsfunktionen stärker von Fermi-Dirac-Verteilungen ab und die Suszeptibilitäts-Änderungen fallen im Vergleich größer aus. Interessanterweise gibt es größere qualitative Unterschiede zwischen den einzelnen Kurvenverläufen, was vermutlich an der Struktur der Streumatrizen liegt.

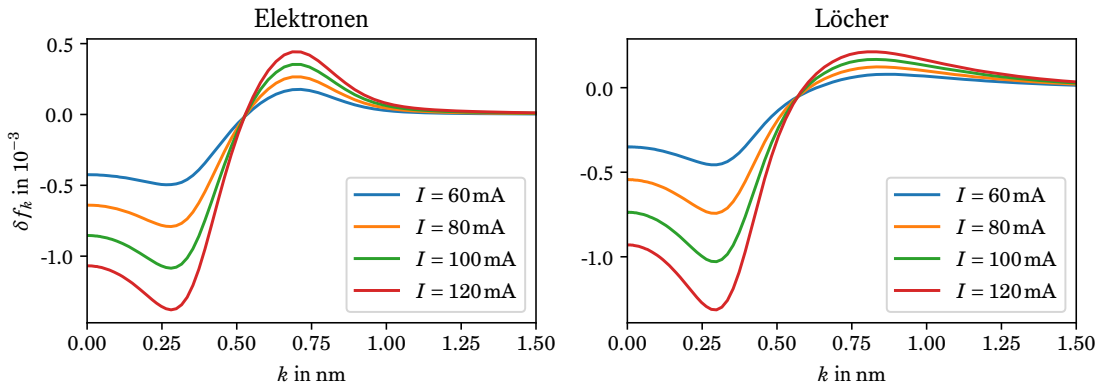


Abbildung 5.9: Abweichung der Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen für verschiedene Stromstärken und die Bandstruktur mit effektiven Massen aus Tabelle 9.10.

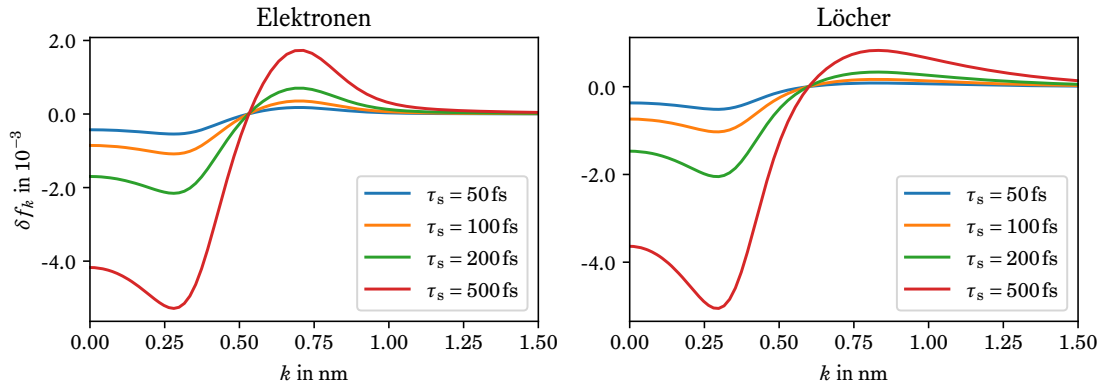


Abbildung 5.10: Abweichung der Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen für verschiedene Streuzeiten. Hierbei wurde die Bandstruktur mit effektiven Massen aus Tabelle 9.10 und eine Stromstärke von 100 mA verwendet.

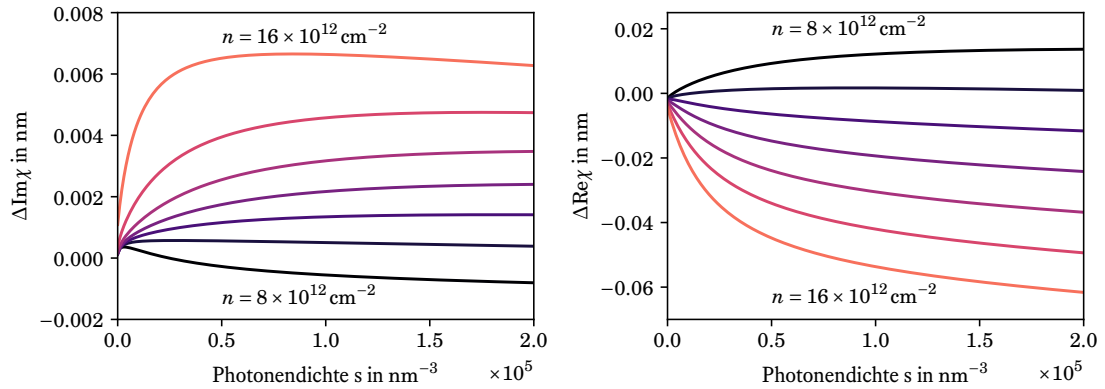


Abbildung 5.11: Änderung der Suszeptibilität in der dritten Ordnung des optischen Feldes abhängig von der Photonendichte s für verschiedene Ladungsträgerdichten. Hierbei wurde die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur verwendet und die Coulomb-Wechselwirkung und Elektron-Phonon-Streuung berücksichtigt.

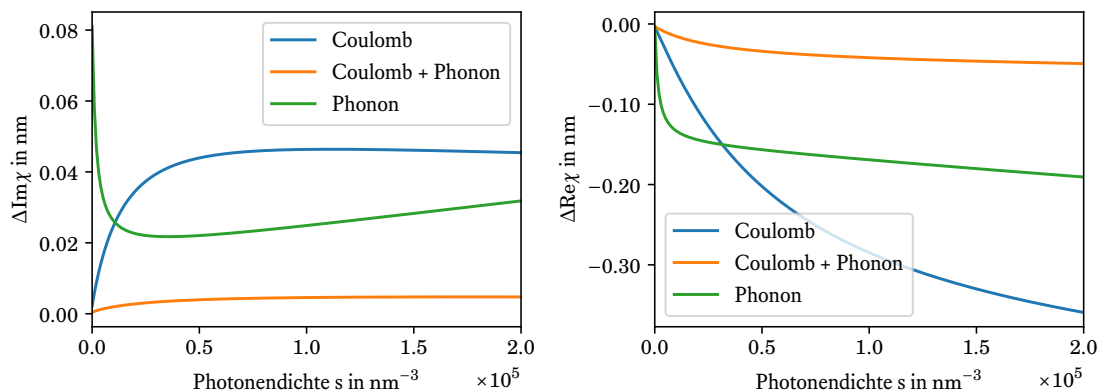


Abbildung 5.12: Änderung der Suszeptibilität in der dritten Ordnung des optischen Feldes abhängig von der Photonendichte s für verschiedene Streuterme. Einmal wurde nur die Elektron-Phonon-Streuung, einmal nur die Coulomb-Streuung und einmal wurden beide Streuterme zusammen verwendet.

5.7 Einfaches Modendynamik-Modell

Abschließend soll der Einfluss verschiedener Größen auf die Modendynamik diskutiert werden. Dazu wird das Modell aus Kapitel 4 verwendet, wo angenommen wurde, dass die Ladungsträgerdichten nicht vom Ort abhängen und nur eine laterale Mode eine Rolle spielt. Allerdings hat beispielsweise die Änderung der Dephasierungskonstanten große Auswirkungen auf viele verschiedene Aspekte der Laserdynamik. Daher sollen in diesem Unterkapitel die Bewegungsgleichungen zunächst so weit wie möglich vereinfacht werden, ohne dass die Abbildung der Modendynamik inkorrekt wird. Die Bewegungsgleichungen aus Kapitel 5.1 lauten

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}S_p &= -I_t S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e, n_h) - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + I_t \operatorname{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_p, n_e, n_h) + \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{WW}} \\ \frac{d}{dt}n_{e,h} &= \frac{j}{e} \eta_0 + I_t \frac{1}{Lw} \sum_p S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e, n_h) - B(n_e, n_h) - \frac{n_{e,h}}{\tau_{\text{nr}}}.\end{aligned}$$

Zunächst ist es sinnvoll die Suszeptibilität möglichst einfach darzustellen. Bei der Laserdynamik spielt nur die Suszeptibilität in der Nähe des Maximums der optischen Verstärkung ω_0 eine Rolle. In diesem Bereich kann der Imaginärteil der Suszeptibilität gut durch eine Parabel angenähert werden [56], außerdem wird angenommen, dass sich der Imaginärteil nur linear mit der Ladungsträgerdichte ändert. Der Imaginärteil hat dementsprechend die folgende Form:

$$\begin{aligned}\omega \operatorname{Im} \chi(\omega, n, n) &\approx \omega_0 \operatorname{Im} \chi(\omega_0, n_0, n_0) + \omega_0 (n - n_0) \operatorname{Im} \chi'(\omega_0, n_0, n_0) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\omega - \omega_0)^2 \left. \frac{\partial^2 \omega \operatorname{Im} \chi(\omega, n_0, n_0)}{\partial \omega^2} \right|_{\omega=\omega_0} \\ &= \operatorname{Im} \chi_0 + a(n - n_0) + b(\omega - \omega_0)^2.\end{aligned}$$

Die Koeffizienten wurden hierbei bei einer Referenzdichte n_0 ausgewertet und es wurde angenommen, dass Elektron- und Lochdichten übereinstimmen: $n_e = n_h = n$. Die spontane Emission spielt bei der Modendynamik keine allzu große Rolle, daher wird hier einfach der Wert am Maximum der optischen Verstärkung für die Referenzdichte verwendet:

$$I_t \operatorname{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega, n, n) \approx I_t \operatorname{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_0, n_0, n_0) = I_{\text{SE}}$$

Für die Ladungsträgerdichte wird der folgende Ansatz verwendet:

$$n = n_{\text{thr}} + \Delta n,$$

n_{thr} ist hierbei die Ladungsträgerdichte an der Schwelle und Δn die Abweichung davon. Bei der Schwellendichte gilt im Gleichgewicht

$$\begin{aligned}-I_t \operatorname{Im} \chi(\omega_0, n_{\text{thr}}, n_{\text{thr}}) \omega_0 &= \frac{1}{\tau_{\text{photon}}} = g_{\text{thr}}, \\ \frac{d}{dt}n &= 0 = \frac{j_{\text{thr}}}{e} \eta_0 - B(n_{\text{thr}}, n_{\text{thr}}) - \frac{n_{\text{thr}}}{\tau_{\text{nr}}}.\end{aligned}$$

Ist die Abweichung Δn klein, lässt sich dafür die folgende Bewegungsgleichung formulieren:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \Delta n &= \frac{j}{e} \eta_0 + I_t \frac{1}{Lw} \sum_p S_p \omega_p \operatorname{Im} \chi(\omega_p, n_e, n_h) - B(n, n) - \frac{n}{\tau_{\text{nr}}} \\ &\approx \frac{j}{e} \eta_0 + I_t \frac{1}{Lw} \omega_0 \operatorname{Im} \chi(\omega_0, n_{\text{thr}}, n_{\text{thr}}) \sum_p S_p \\ &\quad - B(n_{\text{thr}}, n_{\text{thr}}) - \Delta n \left. \frac{\partial B(n, n)}{\partial n} \right|_{n=n_0} - \frac{n_{\text{thr}}}{\tau_{\text{nr}}} - \frac{\Delta n}{\tau_{\text{nr}}} \\ &= \frac{j - j_{\text{thr}}}{e} \eta_0 - \frac{g_{\text{thr}}}{Lw} \sum_p S_p - \frac{\Delta n}{\tau}.\end{aligned}$$

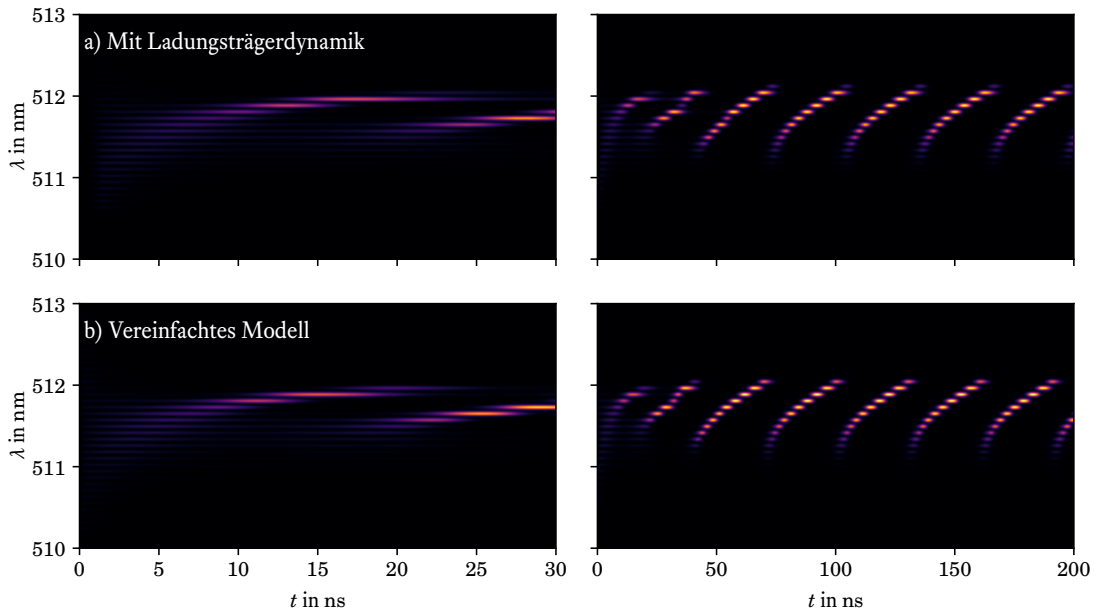


Abbildung 5.13: Vergleich der Modendynamik bei einer Stromstärke von 100 mA mit (a) dem vollen Modell und (b) dem vereinfachten Modell aus Gl. (5.23).

Dabei wurde in der Summe der Imaginärteil der Suszeptibilität durch den Wert am Maximum der optischen Verstärkung ersetzt und bei der Ableitung der Verluste wurde an der Referenzdichte ausgewertet. Die Referenzdichte sollte möglichst der Schwell-Ladungsträgerdichte entsprechen, damit eine möglichst gute Übereinstimmung erzielt wird. In der Abklingzeit τ wurden die Verluste zusammengefasst:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{nr}} + \left. \frac{\partial B(n, n)}{\partial n} \right|_{n=n_0}.$$

Im Gleichgewicht lautet die Lösung der Bewegungsgleichung

$$\Delta n = \tau \left(\Delta \tilde{j} - \frac{g_{thr}}{Lw} \sum_p S_p \right), \quad \Delta \tilde{j} = \frac{j - j_{thr}}{e} \eta_0.$$

Mit den Vereinfachungen der Suszeptibilität und der spontanen Emission lautet die Bewegungsgleichung der Photonen-Zahlen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_p &= -I_t S_p \left[a \Delta n + b (\omega_p - \omega_0)^2 \right] + I_0 + \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{WW} \\ &= -S_p \left[\tilde{a} \Delta n + \tilde{b} (\omega_p - \omega_0)^2 \right] + I_0 + \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{WW}. \end{aligned}$$

Aufgrund von Gl. (5.10) und Gl. (5.11) wird für den Modenwechselwirkungsterm die folgende Form verwendet:

$$\left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{WW} = \sum_{q \neq p} \frac{S_p S_q}{2Lw} \left[\frac{\alpha}{\omega_q - \omega_p} - \beta \right], \quad (5.22)$$

mit den Parametern

$$\alpha = I_t^2 \omega_0^2 \text{Im} \chi(\omega_0, n_0, n_0) \text{Re} \chi'(\omega_0, n_0, n_0)$$

und

$$\begin{aligned} \beta &= -I_t^2 \sum_{\lambda \lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \frac{\tau_s (1 + \delta_{\lambda \lambda'})}{\omega_0^2} \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_0) \text{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda', 0}(\omega_0) \\ &\quad + I_t^2 \omega_0^2 \tau_s \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0). \end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichungen können weiter vereinfacht werden, indem die Photonenzahlen durch Photondichten $s_p = S_p/(Lw)$ ersetzt werden. Das Endergebnis lautet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}s_p &= -s_p \left[\tilde{a}\Delta n + \tilde{b}(\omega_p - \omega_0)^2 \right] + \tilde{I}_0 + \sum_{q \neq p} \frac{s_p s_q}{2} \left[\frac{\alpha}{\omega_q - \omega_p} - \beta \right] \\ \Delta n &= \tau \left(\Delta \tilde{j} - g_{\text{thr}} \sum_p s_p \right), \quad \tilde{I}_0 = \frac{I_0}{Lw}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Die Frequenzen der Moden sind durch

$$\omega_p = \omega_0 + \frac{\pi c}{Ln_{\text{gr}}}(p - p_0)$$

gegeben.

Diese Bewegungsgleichungen können nun einfach implementiert werden und es gibt eine übersichtliche Anzahl an Parametern. Bis auf den Faktor I_t können \tilde{a} , \tilde{b} , α , β und \tilde{I}_0 aus einer Bandstruktur für eine Referenzdichte ausgerechnet werden. Die anderen beiden Parameter τ und g_{thr} hängen mit Verlusten zusammen, und müssen wie bei dem detaillierteren Modell aus Kapitel 4 entsprechend gewählt werden. Um die Ergebnisse dieses vereinfachten Modells mit dem detaillierteren Modell zu vergleichen, ist es außerdem notwendig den Schwellstrom I_{thr} und die Effizienz η_0 zu kennen. Werden die Parameter aus Tabelle 9.10 verwendet, um die neuen Parameter bei einer Referenzdichte von $9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ mit den obigen Formeln zu berechnen, folgen die Parameter in Tabelle 9.14.

In Abb. 5.13 wird die Modendynamik des vereinfachten Modells mit der des komplexeren Modells bei einer Stromstärke von 100 mA verglichen. Hier gibt es qualitativ eine gute Übereinstimmung, allerdings scheint die Frequenz des Modenrollens bei dem vereinfachten Modell etwas größer auszufallen. Dies könnte daran liegen, dass die Suszeptibilität leicht von der Parabelform abweicht oder dass die Frequenzabhängigkeit des symmetrischen Modenwechselwirkungsterms vernachlässigt wurde. Dies kann auch beobachtet werden, wenn die Modenrollenfrequenzen über die Stromstärke aufgetragen werden, wie in Abb. 5.14. Hier ist auch zu erkennen, dass der Bereich überhalb des Schwellstroms, wo es kein Modenrollen gibt, kleiner wird. Die Übereinstimmung könnte zwar durch Anpassung der Parameter noch optimiert werden, ist aber zufriedenstellend und reicht für die weitere Diskussion aus.

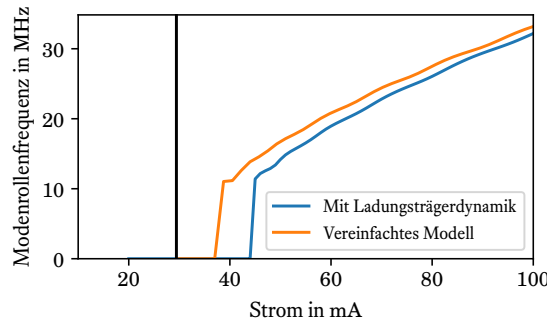


Abbildung 5.14: Die Stromabhängigkeit der Modenrollenfrequenz. Hierbei wurde die Modendynamik für verschiedene Stromstärken berechnet und dann die Frequenz aus dem Abstand der Peaks bestimmt.

Es ist nun von Interesse, die Auswirkung der verschiedenen Parameter auf die Modendynamik zu diskutieren. Zum Beispiel ist in Abb. 5.15 der Einfluss des asymmetrischen Modenwechselwirkungsparameters α dargestellt. Dieser bewirkt vor allem eine Skalierung der Modenrollenfrequenzen, hat aber keinen Einfluss auf den Strombereich wo kein Modenrollen stattfindet. Dies ist anders für den symmetrischen Modenwechselwirkungsparameter β , was in Abb. 5.16 gezeigt. Hier bewirkt eine Erhöhung des Parameters eine Verkleinerung dieses Bereiches und außerdem eine Verringerung der Modenrollenfrequenzen.

Von Interesse ist auch der Einfluss der Parameter \tilde{a} und \tilde{b} , welche die Suszeptibilität bestimmen. So beschreibt die \tilde{a} die Abhängigkeit der Suszeptibilität von der Ladungsträgerdichte und \tilde{b} die Frequenzabhängigkeit. Wie in Abb. 5.17 dargestellt, hat \tilde{a} überhaupt keinen Einfluss auf die Modendynamik. Allerdings ist natürlich eine Änderung des Schwellstroms zu erwarten, dies wird aber von dem vereinfachten Modell

nicht erfasst. Die Situation ist anders für den Parameter \tilde{b} , welcher die Parabelkrümmung definiert, wie in Abb. 5.18 gezeigt. Bei einer geringeren Parabelkrümmung nehmen mehr Moden am Modenrollen teil und der Wellenlängenbereich, in dem sich die aktiven Moden befinden, wird vergrößert. Die Modenrollenfrequenzen ändern sich aber interessanterweise nur geringfügig.

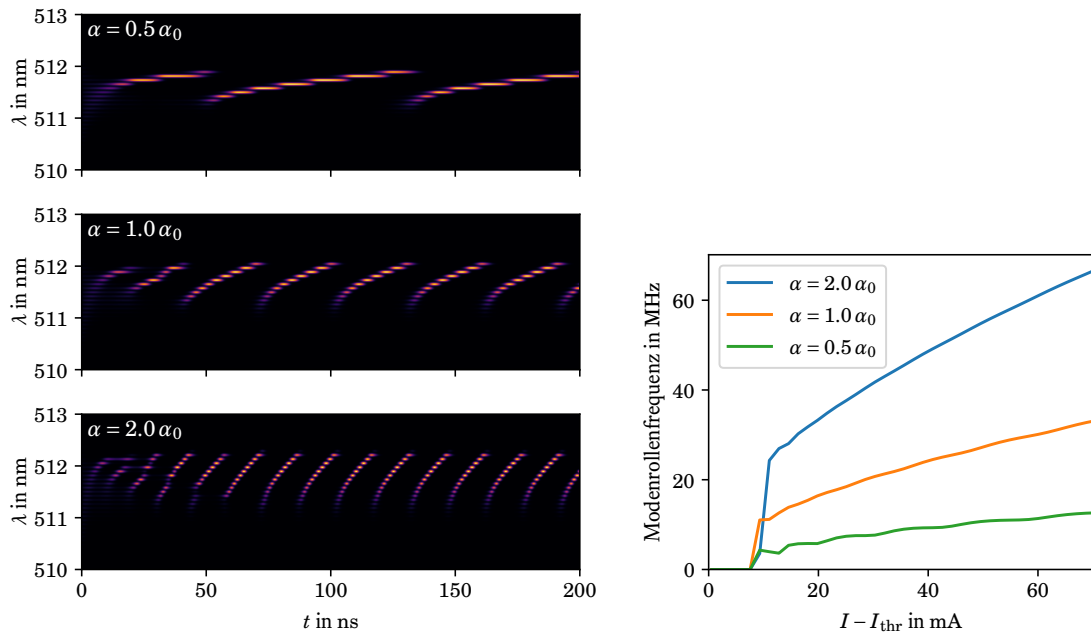


Abbildung 5.15: Einfluss des asymmetrischen Wechselwirkungsparameters auf die Modendynamik, α_0 bezeichnet den Wert für α aus Tabelle 9.14 (Links) Modendynamik bei einem Strom von 100 mA (Rechts) Abhängigkeit der Modenrollenfrequenzen von der Stromstärke.

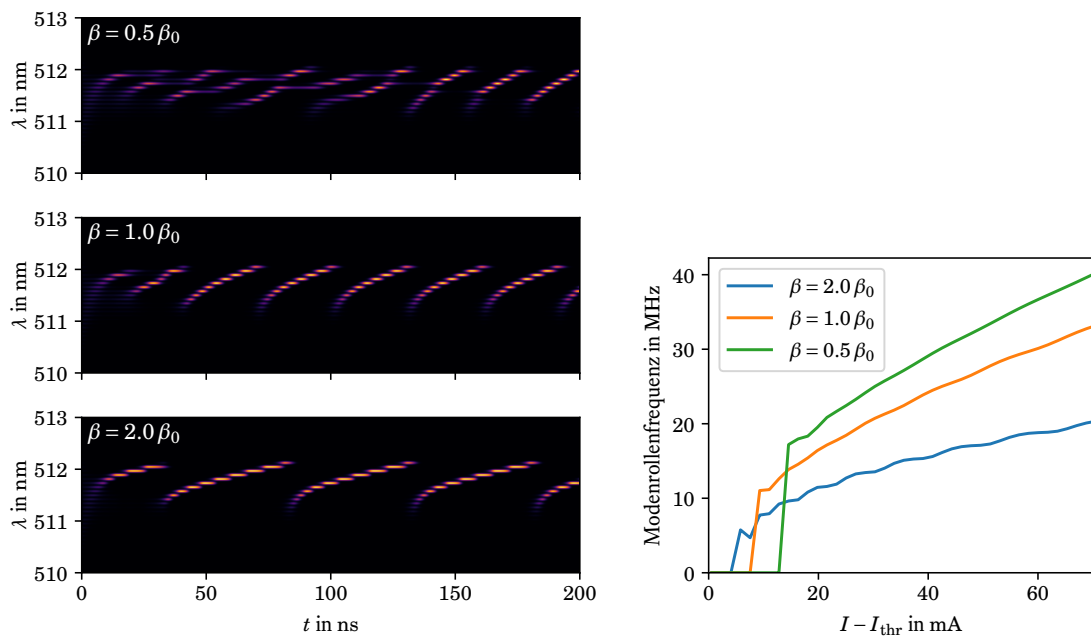


Abbildung 5.16: Einfluss des symmetrischen Wechselwirkungsparameters auf die Modendynamik, β_0 bezeichnet den Wert für β aus Tabelle 9.14 (Links) Modendynamik bei einem Strom von 100 mA (Rechts) Abhängigkeit der Modenrollenfrequenzen von der Stromstärke.

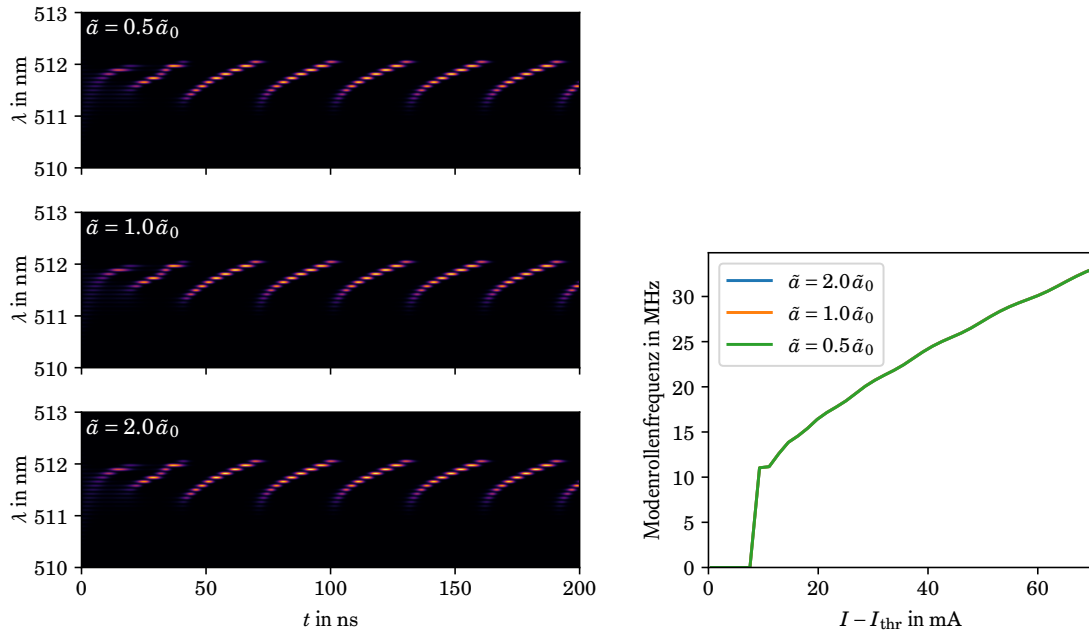


Abbildung 5.17: Einfluss des Parameters \tilde{a} auf die Modendynamik, welcher die Abhängigkeit der Suszeptibilität von der Ladungsträgerdichte beschreibt. Dabei bezeichnet \tilde{a}_0 den Wert für \tilde{a} aus Tabelle 9.14 (Links) Modendynamik bei einem Strom von 100 mA (Rechts) Abhängigkeit der Modenrollenfrequenzen von der Stromstärke.

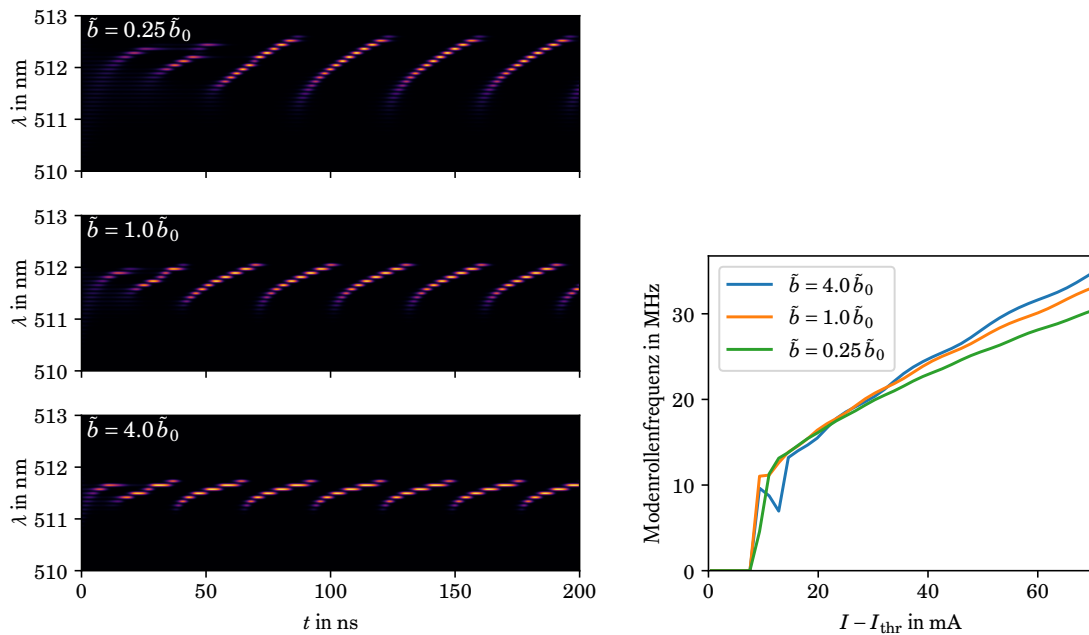


Abbildung 5.18: Einfluss des Parameters \tilde{b} auf die Modendynamik, welcher die Parabelkrümmung der Suszeptibilität definiert. Dabei bezeichnet \tilde{b}_0 den Wert für \tilde{b} aus Tabelle 9.14 (Links) Modendynamik bei einem Strom von 100 mA (Rechts) Abhängigkeit der Modenrollenfrequenzen von der Stromstärke

5.8 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

In diesem Unterkapitel sollen die in den bisherigen Kapiteln vorgestellten Methoden verwendet werden, um einen Vergleich mit experimentellen Ergebnissen herzustellen. Beim Experiment wurden hierbei zwei verschiedene grüne Laserdioden mit einer Streak-Camera untersucht. Beide Laserdioden emittieren hierbei Licht mit einer ähnlichen Wellenlänge und besitzen ähnliche Schwellstromdichten, die Resonatorlänge unterscheidet sich allerdings stark. Während die Resonatorlänge der einen Laserdiode 300 μm beträgt, besitzt die zweite Laserdiode eine Resonatorlänge von 900 μm und eine größere Spiegel-Reflektivität auf der Ausgangsseite des Resonators. Die Streak-Camera-Messungen wurden hierbei von Lukas Uhlig in der Arbeitsgruppe von Prof. Schwarz an der TU Chemnitz durchgeführt, eine genauere Beschreibung des Experiments ist in Ref. [51] zu finden.

In der folgenden Simulation wird die laterale Ortsabhängigkeit der Ladungsträgerdichten vernachlässigt und diese Bewegungsgleichungen aus Gl. (4.15) und Gl. (4.17) werden verwendet:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_{e,h} &= \frac{\Gamma}{n_{\text{eff}}^2 d_{\text{QWL}} L w} \sum_p S_p \omega_p \text{Im} \chi(\omega_p, n_e, n_h) + \frac{j}{e} \eta_{\text{inj}} - B(n_h, n_e) - \frac{n_{e,h}}{\tau_{\text{nr}}} \\ \frac{d}{dt} S_p &= - \frac{\Gamma}{d_{\text{QWL}} n_{\text{eff}}^2} S_p \omega_p \text{Im} \chi(\omega_p) - \frac{S_p}{\tau_{\text{photon}}} + \left. \frac{d}{dt} S_p \right|_{\text{Wechselwirkung}} \end{aligned}$$

mit τ_{photon} aus Gl. (4.4) und Confinement-Faktor Γ . Der Modenwechselwirkungsterm setzt sich aus Gl. (5.8) und dem Korrekturterm aus Gl. (5.21) zusammen. Für die laterale Ortsabhängigkeit wird eine sinusähnliche Funktion angenommen, damit folgt im Vergleich zu Kapitel 4 ein zusätzlicher Faktor 3/2 im Wechselwirkungsterm, siehe Gl. (5.14).

Um den Vergleich möglichst einfach zu halten, wird hier eine $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur verwendet, allerdings werden zur Beschreibung der Streuung eine Streuzeit und eine Dephasierungskonstante verwendet. Außerdem werden Hartree-Fock-Korrekturen vernachlässigt. In diesem Fall sind die Modenwechselwirkungsterme durch Gl. (5.10) und Gl. (5.11) gegeben. Nun müssen noch die Parameter entsprechend gewählt werden. Die Indium-Konzentration im Quantenfilm wird hier so bestimmt, dass die Wellenlänge des emittierten Licht mit den experimentellen Werten übereinstimmt. Werden nun für den Confinement-Faktor, die Dephasierungskonstante und die Pump-Effizienz realistische Werte angenommen und die Spiegelreflektivitäten des Herstellers verwendet, verbleiben drei zu bestimmende Parameter.

Diese drei Parameter sind die internen Photonverluste α_{int} , die nichtstrahlenden Verluste τ_{nr} der Ladungsträger und die Streuzeit τ_s , welche vor allem für den symmetrischen Modenwechselwirkungsterm wichtig ist. Zwei dieser Parameter können mithilfe der experimentellen Kennlinien festgelegt werden. Dabei werden durch einen linearen Fit der Schwellstrom und die Steigung bestimmt. Diese Werte können benutzt werden, um α_{int} und τ_{nr} zu berechnen. Der verbleibende Parameter ist die Streuzeit τ_s , dieser kann verwendet werden, um die Frequenzen des Modenrollens an die experimentellen Werte anzunähern. Für die Laserdiode mit einer Resonatorlänge von 300 μm folgt so der Wert 95 fs und für die längere Laserdiode der Wert 210 fs. Beide Werte liegen in der zu erwartenden Größenordnung.

Die so bestimmten Parameter sind in Tabelle 9.15 im Anhang zusammengefasst. In Abb. 5.19 und 5.20 sind die simulierten und experimentellen Ergebnisse dargestellt. Die experimentelle Kennlinie für die 300 μm Laserdiode zeigt größere Abweichungen von einem linearen Verlauf, daher ergibt sich für den linearen Fit eine kleine Abweichung in der Schwellstromstärke. In der Modendynamik in Abb. 5.20 ist auf den ersten Blick eine gute Übereinstimmung mit den hier gewählten Parametern erkennbar. Bei der 900 μm Laserdiode ist der Abstand zwischen den longitudinalen Moden so klein, dass es in den Streak-Camera-Aufnahmen schwierig ist, die einzelnen Moden auseinander zu halten. Bei der 300 μm Laserdiode ist der Modenabstand hingegen ungefähr dreimal so groß. Die Wechselwirkung der Moden ist dementsprechend vergleichsweise kleiner, was zu kleineren Modenrollen-Frequenzen führt. Außerdem gibt es dadurch einen Stromstärken-Bereich leicht oberhalb des Schwellstroms, wo es kein Modenrollen gibt und nur eine longitudinale Mode aktiv ist. Dieses Verhalten lässt sich sowohl im Experiment wie auch in der Simulation beobachten. Um die Modenrollen-Frequenzen zu untersuchen, werden die experimentellen Daten zunächst in der Nähe einer aktiven Mode über verschiedene Wellenlängen gemittelt und der zeitliche Abstand der Maxima in den resultierenden Daten bestimmt. Die so erhaltenen Frequenzen sind in Abb. 5.19 dargestellt. Mit den hier gewählten Parametern gibt es eine gute Übereinstimmung der Werte und bei der 300 μm Laserdiode ist der Bereich, wo nur eine Mode aktiv ist, gut erkennbar.

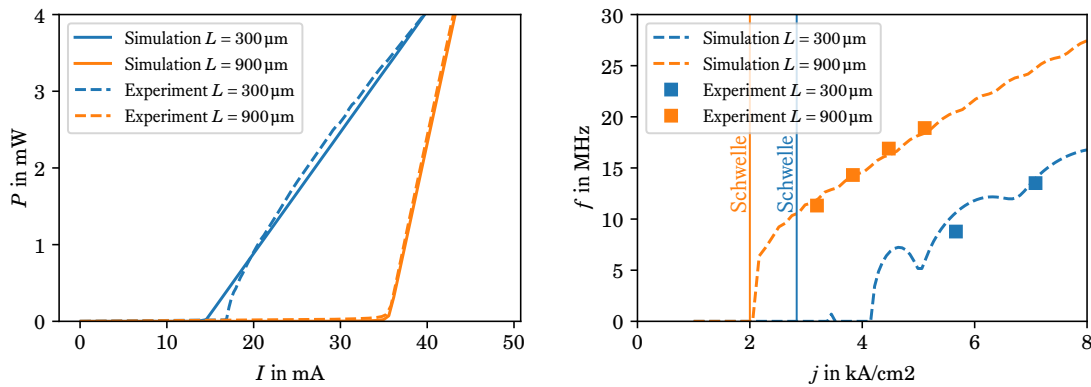


Abbildung 5.19: (Links) Kennlinien aus Experiment und Simulation (Rechts) Modenrollen-Frequenzen abhängig von der Stromdichte für Experiment und Simulation.

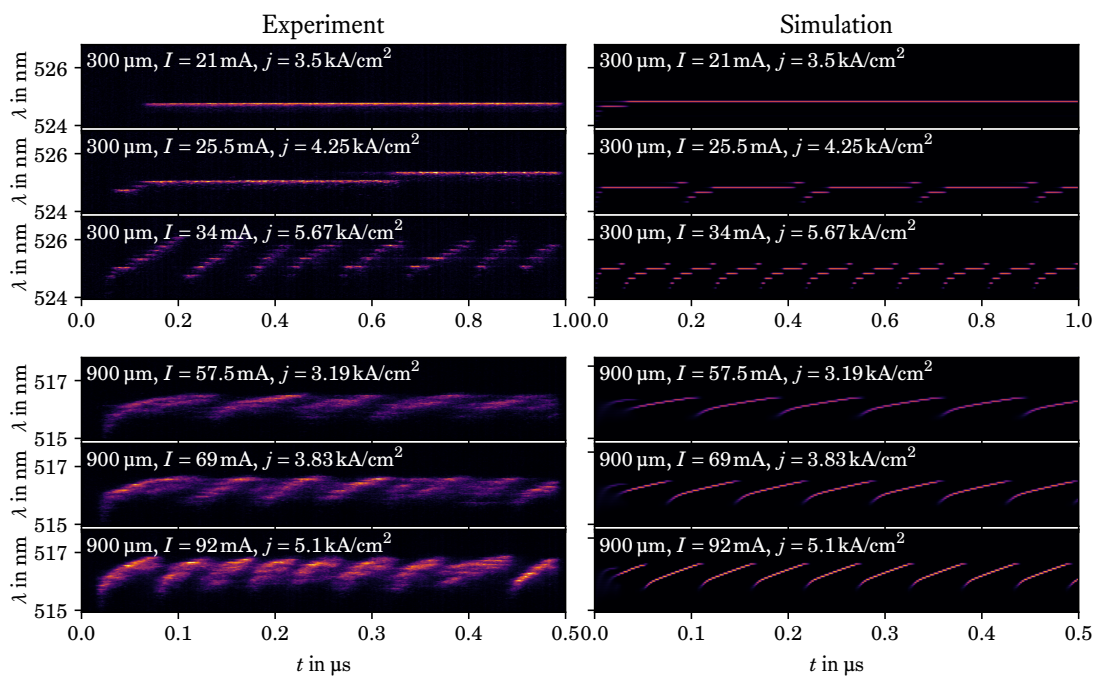


Abbildung 5.20: Die Modendynamik für verschiedene Stromstärken und die beiden Laserdioden. Links sind experimentelle Streak-Camera-Messungen dargestellt und rechts Ergebnisse aus der Simulation.

Es ist auch interessant zu diskutieren, wie sich die Modendynamik verhält, wenn statt einer konstanten Streuzeit kompliziertere Streuterme wie Coulomb-Streuung und Elektron-Phonon-Streuung verwendet werden. Für die Bandstruktur der Quantenfilme der beiden Dioden werden zu diesem Zweck die Parameter aus Kapitel 5.3 verwendet und sind in Tabelle 9.12 im Anhang gegeben. Weil hier nur der Einfluss auf die Modendynamik diskutiert werden soll, wird damit in Kauf genommen, dass die Laser-Wellenlänge leicht von den experimentellen Ergebnissen abweicht. Die intrinsischen Verluste und die nichtstrahlenden Verluste der Ladungsträger werden wieder mithilfe der experimentellen Kennlinien festgelegt, siehe Abb. 5.21 und Tabelle 9.16 im Anhang. Um realistische Parameter zu erhalten, ist es hier notwendig, eine zusätzliche Dephasierungskonstante zu verwenden, hier wird der gleiche Wert wie in den obigen Simulationsergebnissen benutzt ($\gamma = 30 \text{ meV}$). Die resultierende Modendynamik ist für verschiedene Stromstärken in Abb. 5.22 dargestellt und die Modenrollenfrequenzen sind in Abb. 5.21 gezeigt. Die Simulations-Ergebnisse für die Modendynamik sind sehr ähnlich zu denen in Abb. 5.20 für die Simulationen mit einer konstanten Streuzeit und stimmen für $L = 300 \mu\text{m}$ und $I = 34 \text{ mA}$ qualitativ sogar besser mit den experimentellen Ergebnissen aus Abb. 5.20 überein. Die Modenrollenfrequenzen sind im Vergleich zu den experimentellen Werten zu groß, dabei ist allerdings zu beachten, dass hier kein Parameter wie die Streuzeit verwendet werden konnte, um die Ergebnisse anzupassen.

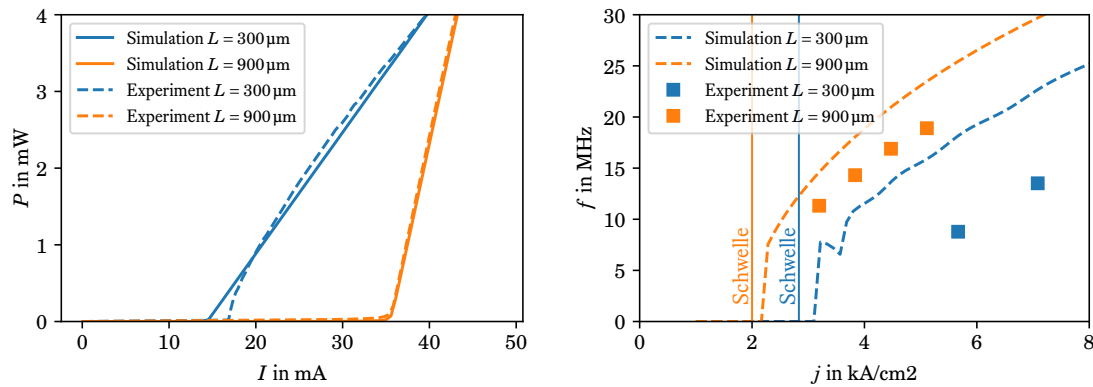


Abbildung 5.21: (Links) Kennlinien aus Experiment und Simulation mit komplizierteren Streutermen (Rechts) Modenrollen-Frequenzen abhängig von der Stromdichte für Experiment und die Simulation mit komplizierteren Streutermen.

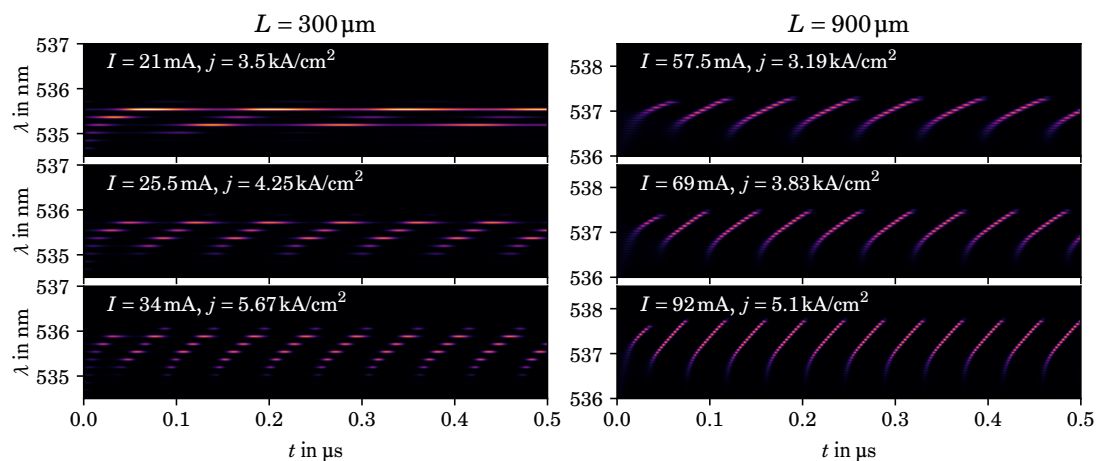


Abbildung 5.22: Die Modendynamik für verschiedene Stromstärken und kompliziertere Streuterme. Links wurde eine Resonatorlänge von $300 \mu\text{m}$ verwendet und rechts eine Resonatorlänge von $900 \mu\text{m}$.

5.9 Fazit

In diesem Kapitel wurden zunächst Terme hergeleitet, welche die effektive Wechselwirkung von longitudinalen Moden in einer Laserdiode beschreiben. Diese Herleitung der Wechselwirkungsterme ist unabhängig von der Wahl der Streuterme und im Fall einer konstanten Streuzeit stimmt das Ergebnis mit der Literatur überein. Für komplizierte Streuterme zeigen die Wechselwirkungsterme allerdings ein anderes Verhalten und hängen stark von der Photonenzahl ab. Anschließend wurden Abweichungen der Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen und deren Einfluss auf die Laserdynamik diskutiert. Die resultierenden Änderungen der Suszeptibilität sind für realistische Streuterme zwar klein, können in der Simulation aber ohne großen Rechenaufwand berücksichtigt werden. Anhand einer stark vereinfachten Version der Laser-Bewegungsgleichung wurde untersucht, wie sich die Stärke der symmetrischen und asymmetrischen Anteile der Modenwechselwirkung auf die Modendynamik auswirken. Abschließend wurden experimentelle Ergebnisse für zwei Laserdioden mit unterschiedlichen Resonatorlängen mit simulierten Streak-Camera-Bildern verglichen. Verwendet wurden in der Simulation eine $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur und einfache Streuterme. Die Streuzeiten wurden so gewählt, dass es eine möglichst gute Übereinstimmung der Simulation mit dem Experiment gibt, und liegen in der zu erwartenden Größenordnung von 100 fs. Wird statt der konstanten Streuzeit die Streuung durch Coulomb-Streuung und Elektron-Phonon-Streuung beschrieben, stimmt die Modendynamik qualitativ gut mit den experimentellen Streak-Camera-Bildern überein, allerdings sind die Modenrollenfrequenzen zu groß. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass in diesem Kapitel verschiedene Wechselwirkungsterme hergeleitet wurden, welche für die Simulation der Modendynamik von realen Strukturen verwendet werden können.

Kapitel 6

Drift-Diffusions-Gleichungen

In den bisherigen Simulationen wurde angenommen, dass die Ladungsträgerdichten nur in dem Bereich direkt unterhalb des Stegs von Null verschieden sind. Außerdem wurde angenommen, dass die Ladungsträgerdichten in diesem Bereich nicht von der lateralen Koordinate x abhängen. Die Berücksichtigung dieser Ortsabhängigkeit ist aber bei breiteren Laserdioden notwendig, da in diesem Fall viele transversale Moden zur Laserdynamik beitragen, welche alle eine andere x -Abhängigkeit besitzen. Um die Simulationen in dieser Hinsicht zu verbessern, muss der Transport der Ladungsträger von den Kontakten zum Quantenfilm beschrieben werden. Zu diesem Zweck werden in diesem Kapitel die Drift-Diffusions-Gleichungen [120] verwendet, welche bei der Simulation von Halbleiter-Bauteilen wie Laserdioden oft benutzt werden [82].

Dabei beschreiben die Drift-Diffusions-Gleichungen den Transport der Bulk-Ladungsträger, für die Ladungsträger im Quantenfilm und die Photonen wird die gleiche Theorie verwendet wie in den vorherigen Kapiteln. Was noch fehlt, ist ein Einfangsterm, welcher beschreibt, wie die Bulk-Ladungsträger in den Quantenfilm gelangen. Der in diesem Kapitel verwendete Einfangsterm ist proportional zu einem Einfang-Parameter, dessen Einfluss in den Beispielen auch genauer untersucht wird.

Um allerdings die volle Modendynamik zu bestimmen, wäre die Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen zu aufwendig. Daher werden die Drift-Diffusions-Gleichungen hier nur verwendet, um den zeitunabhängigen Fall zu untersuchen. Für jede angelegte Spannung können die Stromdichten, mit denen die Quantenfilme gepumpt werden, sowie die Ladungsträgerdichten der Quantenfilme im Gleichgewicht bestimmt werden.

In einer weiteren Simulation wird nur noch die Dynamik der Quantenfilme simuliert und die Gleichgewichts-Stromdichten aus der Simulation der Drift-Diffusions-Gleichungen verwendet. Dies erlaubt es, die Laserdynamik ohne großen numerischen Aufwand auf sehr langen Zeitskalen zu simulieren und die Modendynamik zu untersuchen. Hierbei kann die Wechselwirkung der Moden wie in Kapitel 5 berücksichtigt werden.

6.1 Bestimmung der Ladungsträgerdichten

Bei den Drift-Diffusions-Gleichungen spielt die Beziehung zwischen der Ladungsträgerdichte, dem chemischen Potential und dem elektrostatischen Potential eine wichtige Rolle. Dies wurde in Kapitel 3.2 schon teilweise diskutiert, in diesem Unterkapitel soll es für die Näherung der effektiven Massen noch einmal genauer behandelt werden. Im Gleichgewicht sind Besetzungen durch Fermi-Dirac-Funktionen gegeben und die Dichte ist in drei Dimensionen definiert durch

$$n_{e,h} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{3D}} f_{\mathbf{k}}^{e,h} = \frac{1}{4\pi^3} \int d^3\mathbf{k}_{3D} \frac{1}{\exp\left(\beta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}_{3D}}^{e,h} - \mu_{e,h}\right)\right) + 1},$$

hier wurde zunächst nur ein Lochband berücksichtigt. Die Energien lauten

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\mathbf{k}_{3D}}^e &= E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - e\phi \\ \varepsilon_{\mathbf{k}_{3D}}^h &= -E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} + e\phi,\end{aligned}$$

mit dem elektrostatischen Potential ϕ . Mit der Abkürzung

$$\eta_{e,h} = \beta(\mu_{e,h} \pm e\phi \mp E_{c,v})$$

folgt für die Dichte:

$$\begin{aligned}
 n_{e,h} &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \frac{1}{e^{\beta \hbar^2 k^2 / (2m_{e,h}) - \eta_{e,h}} + 1} \\
 &= N_{e,h} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \frac{1}{1 + e^{x - \eta_{e,h}}} \\
 &= N_{e,h} F(\eta_{e,h}).
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Hier wurden die Vorfaktoren in der Konstante $N_{e,h}$ zusammengefasst:

$$N_{e,h} = 2 \left(\frac{m_{e,h}}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Ist mehr als ein Lochband relevant, muss die Gleichung für die Löcher folgendermaßen modifiziert werden:

$$N_h = \sum_j 2 \left(\frac{m_j}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta \Delta E_j}$$

ΔE_j bezeichnet hier die Abstände zum höchsten Valenzband. Die statistische Verteilungs-Funktion $F(\eta)$ hat für die Fermi-Dirac-Statistik die Form

$$F(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \frac{1}{1 + e^{x - \eta}} = F_{\frac{1}{2}}(\eta).$$

Dies ist das Fermi-Dirac-Integral, für das es aber keine einfache analytische Form gibt. Daher werden oft statt der Fermi-Dirac-Statistik andere Statistiken verwendet. Eine Möglichkeit ist die Boltzmann-Statistik, welche für $\eta \ll 0$ mit der Fermi-Dirac-Statistik übereinstimmt. Hier hat statistische Verteilungsfunktion die Form

$$F(\eta) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} e^{\eta - x} = e^\eta.$$

6.2 Drift-Diffusions-Gleichungen

Die Drift-Diffusions-Gleichungen können aus den ortsabhängigen Bewegungsgleichungen der Einteilchen-Dichtematrix bzw. der Besetzungsfunktionen in Gl. (3.10) hergeleitet werden, welche in drei Dimensionen die gleiche Form haben:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}_{3D}}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{mn} \frac{(\nabla_{\mathbf{r}'} \nabla_{\mathbf{k}_{3D}})^n (\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{k}'_{3D}})^m}{(2i)^{n+m} n! m!} \\
 &\quad \left[(-1)^m \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}_{3D}}^{\lambda'}(\mathbf{r}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}'_{3D}}(\mathbf{r}') - (-1)^n \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}_{3D}}^{\lambda}(\mathbf{r}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda \mathbf{k}_{3D}}(\mathbf{r}') \right. \\
 &\quad \left. - (-1)^m \sum_{\lambda''} \hbar \hat{\Omega}_{\mathbf{k}_{3D}}^{\lambda' \lambda''}(\mathbf{r}) \hat{\rho}_{\lambda'' \lambda \mathbf{k}'_{3D}}(\mathbf{r}') + (-1)^n \sum_{\lambda''} \hbar \hat{\Omega}_{\mathbf{k}_{3D}}^{\lambda'' \lambda}(\mathbf{r}) \hat{\rho}_{\lambda' \lambda'' \mathbf{k}_{3D}}(\mathbf{r}') \right] \Bigg|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}', \mathbf{k}_{3D}=\mathbf{k}'_{3D}},
 \end{aligned}$$

die Energien und Rabi-Frequenzen können dabei analog zum zweidimensionalen Fall definiert werden, siehe Gl. (3.11) und Gl. (3.12). In der Herleitung werden alle Terme berücksichtigt, die höchstens eine Ortsableitung enthalten. Die genaue Rechnung ist zum Beispiel in Ref. [64] gezeigt, hier werden nur die wichtigsten Ergebnisse angegeben.

Zum Beispiel lautet die Bestimmungsgleichung für die Stromdichten

$$\mathbf{j}_{e,h} = -D_{e,h} \nabla n_{e,h} \pm n_{e,h} \mu_{e,h}^M \nabla \phi.$$

Die Diffusionskonstante $D_{e,h}$ ist hier mit der Mobilität $\mu_{e,h}^M$ über die folgende Beziehung verbunden:

$$D_{e,h} = \mu_{e,h}^M \frac{\partial \mu_{e,h}}{\partial n_{e,h}} \frac{n_{e,h}}{e}.$$

Mit Gl. (6.1) ergibt die Ableitung

$$\frac{\partial n_{e,h}}{\partial \mu_{e,h}} = \frac{\partial n_{e,h}}{\partial \eta_{e,h}} \frac{\partial \eta_{e,h}}{\partial \mu_{e,h}} = \beta N_{e,h} F'(\eta_{e,h}).$$

Das Verhältnis von Diffusionskonstante und Mobilität ist dementsprechend durch die statistische Funktion bestimmt:

$$\frac{D_{e,h}}{\mu_{e,h}^M} = \frac{F(\eta_{e,h})}{F'(\eta_{e,h})} \frac{1}{\beta e}. \quad (6.2)$$

Zusammen mit dem Gradienten der Dichte

$$\nabla n_{e,h} = N_{e,h} F'(\eta_{e,h}) \beta (\nabla \mu_{e,h} \pm e \nabla \phi)$$

folgt dann die einfachere Form der Stromdichte:

$$\mathbf{j}_{e,h} = -\frac{\mu_{e,h}^M}{e} n_{e,h} \nabla \mu_{e,h}.$$

Aufgrund der Erhaltung der Teilchenzahl lässt sich die folgende Kontinuitätsgleichung formulieren:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{e,h} + \nabla \mathbf{j}_{e,h} = R_{e,h}(n_e, n_h, \phi),$$

der Term $R_{e,h}(n_e, n_h, \phi)$ beschreibt hier die Rekombination oder Erzeugung von Ladungsträgern. Im statischen Fall verschwindet die Zeitableitung und es bleibt

$$\nabla \mathbf{j}_{e,h} = R_{e,h}(n_e, n_h, \phi).$$

Zusammen mit der Poisson-Gleichung [96] lautet das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} -\nabla \left(\frac{\mu_e^M}{e} n_e \nabla \mu_e \right) &= R_e(n_e, n_h, \phi) \\ -\nabla \left(\frac{\mu_h^M}{e} n_h \nabla \mu_h \right) &= R_h(n_e, n_h, \phi) \\ -\nabla (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \phi) &= \rho = e (n_h - n_e + C), \end{aligned} \quad (6.3)$$

welches die Drift-Diffusions-Gleichungen darstellt. Die Dotierung geht hier als Zusatzterm zur Ladungsdichte über die Größe $C(\mathbf{r})$ ein. Die Dotierung kann dann auch noch detaillierter beschrieben werden, siehe zum Beispiel Ref. [95, 115].

6.3 Thermodynamisches Gleichgewicht

Die Lösung der Gleichungen (6.3) erfolgt in der Regel iterativ. In diesem Fall wird ein Anfangszustand benötigt, welcher der Lösung möglichst ähnlich ist. Eine Möglichkeit ist das thermodynamische Gleichgewicht, welches hier im Folgenden diskutiert wird. Das thermodynamische Gleichgewicht spielt außerdem eine wichtige Rolle bei der Definition der Randbedingungen. Im thermodynamischen Gleichgewicht sind die chemischen Potentiale von Valenz- und Leitungsband gleich:

$$\mu_v = \mu_c \quad \Rightarrow \quad \mu_e = -\mu_h = \mu_0.$$

Außerdem sind die chemischen Potentiale konstant, das heißt die Stromdichten verschwinden

$$\nabla \mu_{e,h} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{j}_{e,h} = 0.$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht verschwindet auch der Gradient des elektrostatischen Potentials, $\nabla\phi = 0$, daher muss laut Poisson-Gleichung auch die Gesamtladung verschwinden, $\rho = 0$. Diese Bedingung liefert eine Gleichung für das Potential im Gleichgewicht:

$$n_h - n_e + C = 0 = N_h F(\beta(-\mu_0 + E_v - e\phi_0)) - N_e F(\beta(\mu_0 - E_c + e\phi_0)) + C.$$

Für die Boltzmann-Statistik lässt sich diese Gleichung lösen und die Lösung lautet [120]

$$e\phi_0 + \mu_0 = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{1}{2\beta} \ln\left(\frac{N_e}{N_h}\right) + \frac{1}{\beta} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{C}{2n_{\text{int}}}\right),$$

mit der intrinsischen Ladungsträgerdichte

$$n_{\text{int}}^2 = N_e N_h e^{-\beta(E_c - E_v)}.$$

Diese Werte können dann in der Numerik zum Beispiel als Anfangswerte der iterativen Lösung dienen. Das elektrostatische Potential ist hier natürlich nur bis auf eine Konstante definiert, welche frei gewählt werden kann. In dieser Arbeit wird sie so bestimmt, dass im Gleichgewicht gilt:

$$\mu_0 = 0, \quad e\phi_0 = \frac{E_c - E_v}{2} - \frac{1}{2\beta} \ln\left(\frac{N_e}{N_h}\right) + \frac{1}{\beta} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{C}{2n_{\text{int}}}\right).$$

Außerdem wird angenommen, dass sich die Kontakte im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Wird an einem Kontakt eine Spannung U angelegt, gelten dort die Randbedingungen

$$\mu_0 = -eU, \quad e\phi_0 = eU + \frac{E_c - E_v}{2} - \frac{1}{2\beta} \ln\left(\frac{N_e}{N_h}\right) + \frac{1}{\beta} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{C}{2n_{\text{int}}}\right).$$

6.4 Statistische Funktionen

In diesem Unterkapitel soll kurz auf die statistischen Funktionen eingegangen werden, welche im Folgenden verwendet werden. Physikalisch gesehen sollte natürlich die Fermi-Dirac-Statistik die besten Ergebnisse liefern. Hier lautet die statistische Funktion

$$F(\eta) = F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \sqrt{x} \frac{1}{1 + e^{x-\eta}}.$$

Da dieses Integral aber keine einfache analytische Lösung hat, bereitet diese Form in der numerischen Simulation einige Probleme. Das ist beispielsweise anders bei der Boltzmann-Statistik. Hier lautet die statistische Funktion

$$F(\eta) = e^{\eta}.$$

In diesem Fall folgt für die Beziehung zwischen Mobilität und Diffusionskonstante aus Gl. (6.2) die Einstein-Beziehung:

$$\frac{D_{e,h}}{\mu_{e,h}^M} = \frac{F(\eta_{e,h})}{F'(\eta_{e,h})} \frac{1}{\beta e} = \frac{1}{\beta e}.$$

Diese statistische Funktion stimmt mit der Fermi-Dirac-Statistik aber nur bei kleinen Werten für η überein. Eine bessere Näherung wäre die statistische Funktion von Blakemore [120, 121]

$$F(\eta) = \frac{1}{e^{-\eta} + 0.27},$$

diese ist geringfügig komplizierter als die Boltzmann-Statistik, allerdings ist sie auch bei größeren Werten für η noch genau. In Abb. 6.1 werden die drei statistischen Funktionen miteinander verglichen.

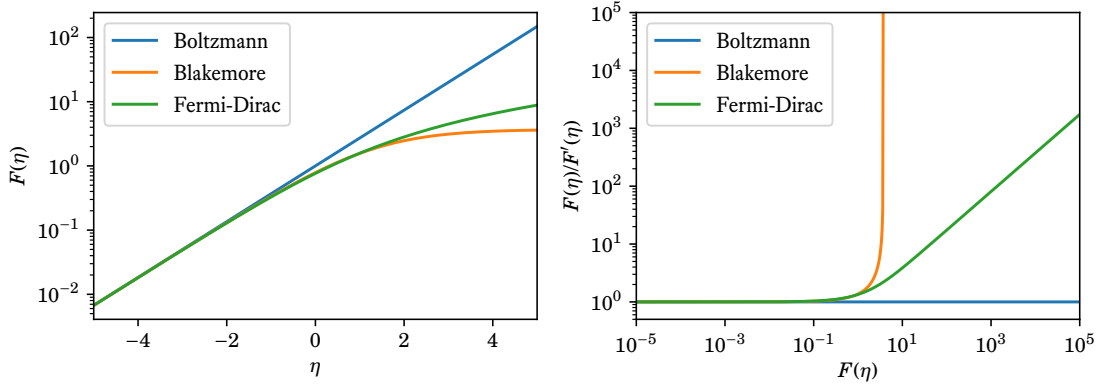


Abbildung 6.1: Vergleich der verschiedenen statistischen Funktionen. Im rechten Bild ist die Beziehung zwischen Mobilität und Diffusionskonstante aus Gl. (6.2) als Funktion der Ladungsträgerdichte $n \propto F(\eta)$ dargestellt.

6.5 Finite-Volumen-Verfahren

Eine Methode zur Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen (6.3) ist das Finite-Volumen-Verfahren [120]. Hier erfolgt eine Aufteilung des Simulations-Gebietes in kleinere Gebiete mit Index i , mit dazugehörigen Volumen Ω_i und Mittelpunkten \mathbf{r}_i . Mit dem Satz von Gauss gilt unter Annahme von konstanten Funktionen innerhalb eines Volumens

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} d^3\mathbf{r} n_{e,h} + \int_{\partial\Omega_i} d^2\mathbf{A} \cdot \mathbf{j}_{e,h} - \int_{\Omega_i} d^3\mathbf{r} R(n_e, n_h, \phi) \\ &\approx \Omega_i \frac{d}{dt} n_{e,h}^i + \sum_j A_{ij} j_{e,h}^{ij} - \Omega_i R_{e,h}(n_e^i, n_h^i, \phi^i) \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnen A_{ij} die Grenzflächen zwischen benachbarten Teilgebieten i und j , und $j_{e,h}^{ij}$ sind die dazugehörigen Stromdichten. Für nicht benachbarte Teilgebiete gilt entsprechend $A_{ij} = j_{e,h}^{ij} = 0$. Ein Problem ist nun die Bestimmung der Stromdichten abhängig von den chemischen Potentialen und den elektrostatischen Potentialen in den benachbarten Teilgebieten i und j . Eine einfache Möglichkeit ist die Verwendung einer numerischen Ableitung:

$$j_{e,h}^{ij} \approx -D_{e,h} \frac{n_{e,h}^j - n_{e,h}^i}{d_{ij}} \pm \frac{n_{e,h}^i + n_{e,h}^j}{2} \mu_{e,h}^M \frac{\phi_j - \phi_i}{d_{ij}},$$

mit dem Abstand der Mittelpunkte $d_{ij} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$. Diese numerische Ableitung ist allerdings numerisch instabil, was zum Beispiel daran liegt, dass sich die Ladungsträgerdichten $n_{e,h}$ zwischen benachbarten Teilgebieten um Größenordnungen ändern können. In diesem Fall wird die numerische Ableitung ungenau, da der Beitrag mit der wesentlich kleineren Ladungsträgerdichte keinen Einfluss auf das Ergebnis hat. Daher ist diese Methode in der Praxis nur sehr begrenzt anwendbar. Für eine genauere Diskussion siehe auch Ref. [120].

6.6 Scharfetter-Gummel-Methode

Die Scharfetter-Gummel-Methode [78, 120] stellt eine bessere Möglichkeit dar, die Stromdichten $j_{e,h}^{ij}$ zu berechnen. Dazu werden zunächst zwei Annahmen gemacht. Einmal soll das elektrische Feld auf der Linie zwischen den Mittelpunkten \mathbf{r}_i und \mathbf{r}_j zweier benachbarter Volumina konstant sein:

$$\mathbf{E}_{ij} = -\nabla\phi \approx -\frac{\phi_j - \phi_i}{d_{ij}} \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{d_{ij}}.$$

Außerdem soll sich auch die Stromdichte auf dieser Linie nicht ändern:

$$\nabla_{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i} \mathbf{j}_{e,h}(\mathbf{r} \in [\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j]) = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{d_{ij}} \nabla_{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i} j_{e,h}^{ij}(\mathbf{r} \in [\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j]) = 0.$$

Dies führt dann auf die eindimensionale Differentialgleichung für das chemische Potential

$$j_{e,h}^{ij} = -\frac{\mu_{e,h}^M}{e} n_{e,h} \frac{d}{dx} \mu_{e,h},$$

die Koordinate x bezeichnet hier die Punkte auf der Verbindungslinie und nimmt Werte zwischen 0 und d_{ij} an. Die Randbedingungen lauten

$$\mu_{e,h}(x=0) = \mu_{e,h}^i \quad \text{und} \quad \mu_{e,h}(x=d_{ij}) = \mu_{e,h}^j.$$

Für die Boltzmann-Statistik lässt sich die Gleichung umschreiben:

$$e^{\pm \Delta \phi \beta e x} j_{e,h}^{ij} = -\frac{\mu_{e,h}^M}{e \beta} \frac{d}{dx} \left(e^{\pm \Delta \phi \beta e x} n_{e,h} \right),$$

mit der Potentialdifferenz $\Delta \phi = \phi_j - \phi_i$. Die Lösung dieser Gleichung lautet dann

$$j_{e,h}^{ij} = \frac{\mu_{e,h}^M}{e \beta d_{ij}} \left[B(\mp \beta e \Delta \phi) n_{e,h}^i - B(\pm \beta e \Delta \phi) n_{e,h}^j \right] \quad (6.4)$$

mit der Bernoulli-Funktion

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1}.$$

Im Grenzfall sehr großer Potentialunterschiede $|\Delta \phi| \gg \frac{1}{\beta e}$ ergibt sich wie erwartet ein Strom proportional zum elektrischen Feld, zum Beispiel für die Elektronen:

$$j_e^{ij} = \begin{cases} \mu_{e,h}^M n_e^i \frac{\Delta \phi}{d_{ij}} & \text{für } \Delta \phi \gg \frac{1}{\beta e} \\ \mu_{e,h}^M n_e^j \frac{\Delta \phi}{d_{ij}} & \text{für } \Delta \phi \ll -\frac{1}{\beta e} \end{cases}$$

Für ein verschwindendes elektrisches Feld ($\Delta \phi = 0$) ergibt sich dann der erwartete Diffusionsstrom:

$$j_{e,h}^{ij} = \frac{\mu_{e,h}^M}{e \beta d_{ij}} \left[n_{e,h}^i - n_{e,h}^j \right] = -D_{e,h} \frac{n_{e,h}^j - n_{e,h}^i}{d_{ij}}.$$

Die Gleichung (6.4) gilt nur für die Boltzmann-Statistik, für andere statistische Funktionen lohnt es sich, die Gleichung für die Stromdichte zunächst umzuschreiben:

$$\frac{j_{e,h}^{ij}}{j_0} = -\beta d_{ij} F(\eta) \frac{d\mu_{e,h}}{dx}, \quad \text{mit } j_0 = \frac{\mu_{e,h}^M N_{e,h}}{e \beta d_{ij}}$$

Eine Integration liefert dann die Gleichung [122]

$$\int_{\eta_i}^{\eta_j} \frac{d\eta}{-\frac{j_{e,h}^{ij}}{j_0} \frac{1}{F(\eta)} \pm \beta e \Delta \phi} = 1, \quad (6.5)$$

welche zum Beispiel für die Fermi-Dirac-Statistik numerisch gelöst werden könnte, was sich aber numerisch aufwendig gestaltet. Für die Blakemore-Statistik ist es möglich, das Integral auszuführen. Dies führt auf eine nichtlineare Gleichung

$$\frac{j_{e,h}^{ij}}{j_0} = B \left(\mp \beta e \Delta \phi + \gamma \frac{j_{e,h}^{ij}}{j_0} \right) e^{\eta_i} - B \left(\pm \beta e \Delta \phi - \gamma \frac{j_{e,h}^{ij}}{j_0} \right) e^{\eta_j},$$

welche aber numerisch ähnlich einfach zu berechnen ist wie Gl. (6.4). Anstatt für die Fermi-Dirac-Statistik Gl. (6.5) direkt zu lösen, wird im Folgenden die generalisierte Scharfetter-Gummel-Methode aus Ref. [122] verwendet. Dabei wird die Stromdichte folgendermaßen berechnet:

$$j_{e,h}^{ij} = \bar{g}_{ij} \frac{\mu_{e,h}^M}{e \beta d_{ij}} \left[B \left(\mp \frac{\beta e \Delta \phi}{\bar{g}_{ij}} \right) n_{e,h}^i - B \left(\pm \frac{\beta e \Delta \phi}{\bar{g}_{ij}} \right) n_{e,h}^j \right],$$

$$\text{mit } \bar{g}_{ij} = \frac{\eta_j - \eta_i}{\log F(\eta_j) - \log F(\eta_i)}.$$

6.7 Kopplung mit dem Quantenfilm

Die bisher diskutierten Drift-Diffusions-Gleichungen beschreiben den Transport der Ladungsträger von den Kontakten zu den Quantenfilmen. Nun wird noch eine Beschreibung des optischen Feldes und der Ladungsträger in den Quantenfilmen benötigt. Dabei wird zunächst der Gleichgewichtszustand untersucht und die Vibrationen der Ladungsträgerdichten vernachlässigt. Die Ladungsträgerdichten hängen in diesem Fall nur von der lateralen Koordinate x ab. Die entsprechenden Bewegungsgleichungen lauten (5.5):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} = & -B(n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) - \frac{n_{e,h}^{\text{QW}}}{\tau_{\text{nr}}} + D_{e,h} \frac{\partial^2}{\partial x^2} n_{e,h}^{\text{QW}} + \left. \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} \right|_{\text{Pump}} \\ & + \sum_{np} |u_{np}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \omega_{np} S_{np} \text{Im} \chi(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}). \end{aligned}$$

Die Diffusion der Ladungsträger wird durch einen zusätzlichen Term mit der Diffusionskonstanten $D_{e,h}$ beschrieben. Die transversalen Moden werden mit n und die longitudinalen Moden mit p nummeriert. Mit Gl. (4.5) und Gl. (5.2) lautet die Bewegungsgleichung für die Photonenzahlen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_{np} = & -\omega_{np} S_{np} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_{np}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \\ & - \frac{S_{np}}{\tau_{\text{photon}}} + \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_{np}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}), \end{aligned}$$

dabei wurden die Moden-Wechselwirkungsterme vernachlässigt, weil zunächst nur der Gleichgewichtszustand untersucht werden soll. Die Bestimmung der Modenfunktionen $u_{np}(\mathbf{r})$ erfolgt durch die Lösung einer zweidimensionalen Eigenwertgleichung, siehe Kapitel 2. Um die Quantenfilme mit einzubeziehen, wird hierbei die Suszeptibilität bzw. die dielektrische Funktion im Quantenfilm bei einer Referenzdichte ausgewertet. Die Modenfunktionen haben die Form

$$u_{np}(\mathbf{r}) = t_n(x, z) g_p(y).$$

Weil die Ladungsträgerdichten nicht von y abhängen sollen und für das Betragsquadrat der longitudinalen Wellenfunktionen näherungsweise $|g_p(y)|^2 \approx 1/L$ gilt, haben die Differentialgleichungen die Form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} = & -B(n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) - \frac{n_{e,h}^{\text{QW}}}{\tau_{\text{nr}}} + D_{e,h} \frac{\partial^2}{\partial x^2} n_{e,h}^{\text{QW}} + \left. \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} \right|_{\text{Pump}} \\ & + \sum_{np} |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \omega_{np} \frac{S_{np}}{L} \text{Im} \chi(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}), \\ \frac{d}{dt} S_{np} = & -\omega_{np} S_{np} \int dx |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \\ & - \frac{S_{np}}{\tau_{\text{photon}}} + \int dx |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Nun bleibt noch die Frage, wie die Ladungsträger vom Volumen-Material in den Quantenfilm gelangen. Dazu wird ein Term verwendet, welcher dem Pump-Term aus Gl. (4.1) sehr ähnlich ist:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} n_e^{\text{QW}} \right|_{\text{Pump}} &= \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{e,\text{QW}} \right|_{\text{Pump}} \\ &= C_e \int_{\text{QW}} dz n_e \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{3\text{D}}} \left(1 - f_{\mathbf{k}}^{e,\text{QW}}\right) \frac{f_{\mathbf{k}_{3\text{D}}}^e}{n_e} = C_e \int_{\text{QW}} dz n_e \eta_e(n_e^{\text{QW}}, n_e), \end{aligned}$$

mit einer Einfang-Konstanten C_e . Der Pump-Term für die Löcher folgt analog, wobei hier über die relevanten Bänder summiert werden muss. Für die dreidimensionale Bandstruktur wird die Wurtzit- $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur für Bulk-GaN verwendet. In der Literatur sind auch andere andere Pump-Terme zu finden, zum Beispiel in Ref. [83]. Da zunächst nur der Gleichgewichts-Zustand betrachtet werden soll und nicht die Modendynamik, reicht es aus, nur eine longitudinale Mode pro transversale Mode mit einer bestimmten Frequenz ω_0 zu

betrachten. Im Gleichgewicht verschwinden die Zeitableitungen und zusätzlich zu den Drift-Diffusions-Gleichungen müssen die Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} = 0 &= -B(n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) - \frac{n_{e,h}^{\text{QW}}}{\tau_{\text{nr}}} + \int_{\text{QW}} dz C_{e,h} n_{e,h} \eta_{e,h} (n_{e,h}^{\text{QW}}, n_{e,h}) \\ &+ \sum_n |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \omega_0 \frac{S_n}{L} \text{Im} \chi(\omega_0, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) + D_{e,h} \frac{\partial^2}{\partial x^2} n_{e,h}^{\text{QW}} \\ \frac{d}{dt} S_n = 0 &= -\omega_0 S_n \int dx |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi(\omega_0, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \\ &- \frac{S_n}{\tau_{\text{photon}}} + \int dx |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_0, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \end{aligned}$$

gelöst werden. Die Elektronen, die in die Quantenfilme übergehen, müssen natürlich auch als Verluste in den Drift-Diffusions-Gleichungen berücksichtigt werden. Die Rekombinationsterme in Gl. (6.3) lauten dementsprechend

$$\begin{aligned} R_{e,h} &= -n_e n_h \left(1 - e^{\beta(\mu_e + \mu_h)}\right) \left(\frac{1}{\tau_e (n_e + n_e^0)} + \frac{1}{\tau_h (n_h + n_h^0)} + c_e n_e + c_h n_h + r_{\text{spont}} \right) \\ &- \begin{cases} C_{e,h} n_{e,h} \eta_{e,h} (n_{e,h}^{\text{QW}}, n_{e,h}) & \text{für } z_{\text{QW}} - \frac{d_{\text{QW}}}{2} \leq z \leq z_{\text{QW}} + \frac{d_{\text{QW}}}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \end{aligned}$$

hierbei wurden auch die anderen üblichen Verlustterme, wie zum Beispiel die spontane Emission, berücksichtigt [120]. Wird in der Simulation mehr als ein Quantenfilm verwendet, muss beim letzten Term entsprechend summiert werden. Die Ladungen der Elektronen und Löcher verschwinden beim Übergang in den Quantenfilm nicht, daher müssen diese auch in der Poisson-Gleichung berücksichtigt werden:

$$\rho_{\text{QW}}(x, z) = \begin{cases} \frac{e}{d_{\text{QW}}} (n_h^{\text{QW}}(x) - n_e^{\text{QW}}(x)) & \text{für } z_{\text{QW}} - \frac{d_{\text{QW}}}{2} \leq z \leq z_{\text{QW}} + \frac{d_{\text{QW}}}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Gelöst wird das Gleichungssystem mit dem Newton-Verfahren, dabei wird zunächst das Gleichungssystem für $U = 0$ gelöst und als Anfangszustand wird das thermodynamische Gleichgewicht verwendet. Danach wird die Spannung schrittweise erhöht und immer die Lösung von der vorherigen Spannung als Anfangszustand im Newton-Verfahren verwendet. Dies funktioniert gut, bis die Schwellspannung erreicht ist. Hier gibt es neben der physikalisch richtigen Lösung auch eine nicht-physikalische, instabile Lösung, wo die Photonenzahlen negativ sind. Um diese zu vermeiden, werden zunächst die Bewegungsgleichungen für den Quantenfilm gelöst. Im Vergleich zur vorherigen Spannung wird dabei der Pumpterm leicht erhöht und konstant gelassen. Die so erhaltenen Photonenzahlen und Quantenfilmdichten werden im Anfangszustand des Newton-Verfahrens eingesetzt.

6.8 Simulationsergebnisse für verschiedene Strukturen

In Abb. 6.3 sind die Strom-Spannungskurve und die Kennlinie für die schmale Laserdiode mit einem Quantenfilm und einer Stegbreite von $2\ \mu\text{m}$ (Struktur A) gezeigt. Dabei wurden die Rechnungen mit verschiedenen statistischen Funktionen durchgeführt, welche allerdings sehr ähnliche Ergebnisse liefern. Daher wird im Folgenden immer die Boltzmann-Statistik verwendet. Die Struktur-Parameter sind in Kapitel 9.7.1 im Anhang beschrieben, alle weiteren benötigten Parameter sind in Tabelle 9.17 angegeben. Für die Mobilität wird die Parametrisierung aus Kapitel 9.6 verwendet. Die Strom-Spannungs-Kurve zeigt den für eine Diode typischen Verlauf, bei dem die Stromstärke erst dann stark zunimmt, wenn eine bestimmte Spannung erreicht ist. Die Kennlinie zeigt das typische Verhalten, bei dem die Ausgangsleistung linear ansteigt, sobald die Stromstärke den Schwellstrom überschreitet. Für eine Spannung von $4\ \text{V}$ sind in Abb. 6.2 die Verluste und Teilchenstromdichten gezeigt. Wie erwartet, treffen sich Elektronen und Löcher am Quantenfilm. Die Löcher gelangen nur vom Steg aus in den Quantenfilm und die Elektronen reagieren auf die elektrostatische Anziehung der Löcher und laufen vom Kontakt am Rand der Diode in die Mitte. Für die hier gewählten Parameter sind die Verluste außerhalb des Quantenfilms gering und die meisten Ladungsträger rekombinieren im Quantenfilm.

Für die Laser-Simulationen sind vor allem die ortsabhängigen Stromdichten von Interesse, mit denen die Quantenfilme bei einer bestimmten Spannung gepumpt werden. Für verschiedene Spannungen sind diese in Abb. 6.4 gezeigt. Wie erwartet sind die Stromdichten nur unterhalb des Stegs groß und nehmen außerhalb stark ab. Die Ladungsträgerdichten für verschiedene Spannungen sind auch in Abb. 6.4 dargestellt. Interessanterweise ist die Ladungsträgerdichte an den Steg-Rändern größer. Dies liegt wohl daran, dass die transversalen Modenfunktionen in der Mitte am größten sind und oberhalb der Laserschwelle hier die Ladungsträgerverluste durch stimulierte Emission am höchsten sind. In Abb. 6.5 sind die Pump-Stromdichten für eine Spannung von $3.6\ \text{V}$, aber für verschiedene statistische Funktionen gezeigt. Genau wie in Abb. 6.3 sind nur sehr kleine Abweichungen erkennbar, das Ergebnis für die Fermi-Dirac-Statistik liegt hierbei zwischen den Ergebnissen der Boltzmann-Statistik und der Blakemore-Statistik.

Zum Vergleich sind Simulations-Ergebnisse für die gleiche Laserdiode mit zwei Quantenfilmen (Struktur B) in Abb. 6.6 bis Abb. 6.8 gezeigt. Hier sind nun die Einfang-Parameter C_e und C_h sehr wichtig. Um den Einfluss der Einfang-Parameter zu diskutieren, wird der Einfang-Parameter der Elektronen konstant gelassen, während der Einfang-Parameter der Löcher variiert wird. In Abb. 6.8 sind wieder die Stromdichten und die Ladungsträgerverluste in der Nähe der Quantenfilme dargestellt. Hier ist gut zu erkennen, wie sich die Ladungsträger gleichmäßig auf die beiden Quantenfilme verteilen, wenn die Einfang-Parameter gleich sind. Wird der Einfang-Parameter der Löcher wesentlich größer, wird wie erwartet der Quantenfilm auf der Loch-Seite wesentlich stärker gepumpt, was auch mit experimentellen Ergebnissen besser übereinstimmt [123, 124]. Dies ist auch in Abb. 6.8 gezeigt, wo der Unterschied in den Pump-Stromdichten für größere Verhältnisse C_h/C_e immer größer wird. Diese Unterschiede sind auch in den Ladungsträgerdichten zu beobachten, wie in Abb. 6.8 dargestellt ist. In der Strom-Spannungskurve in Abb. 6.7 sind keine großen Unterschiede zu erkennen, während in der Kennlinie das Verhältnis $C_h/C_e = 1$ die größte Photonenzahlen liefert.

Für eine Laserdiode mit einer größeren Stegbreite (Struktur C) sind Simulationsergebnisse in Abb. 6.9 bis Abb. 6.11 dargestellt, hier müssen nun wesentlich mehr transversale Moden in der Rechnung berücksichtigt werden. Die Parameter dieser Struktur sind in Kapitel 9.7.3 im Anhang angegeben. Interessant ist hier die Kennlinie in Abb. 6.10, wo die Beiträge der einzelnen transversalen Moden dargestellt sind. Hier ist zu sehen, wie oberhalb des Schwellstroms die gesamte Photonenzahl linear ansteigt, sich aber aus verschiedenen transversalen Moden zusammensetzt. Außerdem nimmt mit steigender Stromstärke die Anzahl der aktiven transversalen Moden zu. Die Stromdichten und Ladungsträgerdichten sind in Abb. 6.11 gezeigt. Interessanterweise sind hier die Stromdichten in der Mitte kleiner. Dies könnte daran liegen, dass die Elektronen nun eine wesentlich größere Strecke vom Rand zurücklegen müssen, um zum Steg zu gelangen. Die Löcher scheinen den Elektronen aufgrund der elektrostatischen Anziehung entgegenzukommen, sodass die Ladungsträger sich unterhalb der Stegränder beim Quantenfilm treffen.

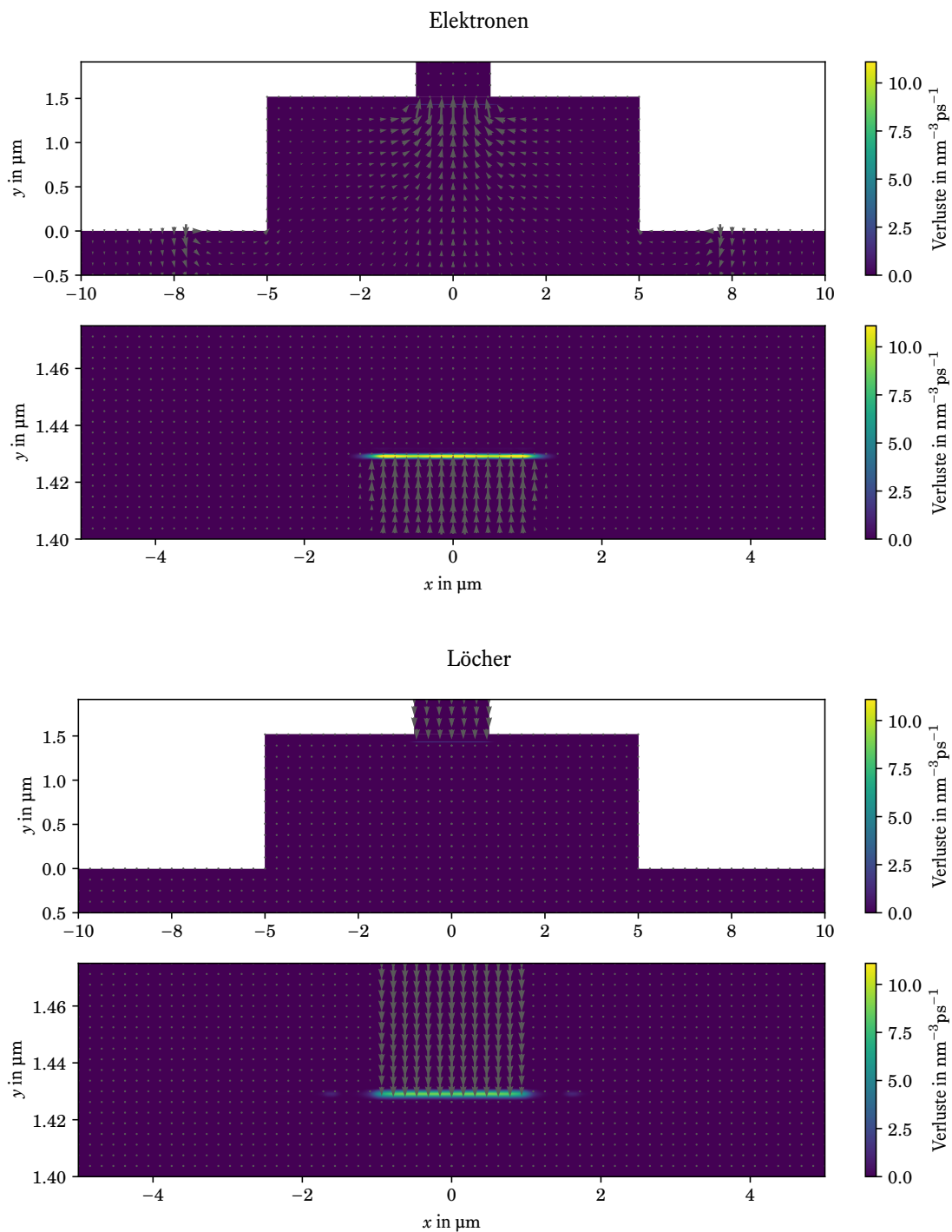


Abbildung 6.2: Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen für die Laserdiode mit einer Stegbreite von $2\ \mu\text{m}$ (Struktur A) für eine Spannung von 4 V. Die Pfeile stellen hierbei die Teilchenstromdichten dar und die Farben zeigen die Größe der Verlustterme. Unten ist jeweils die Region in der Nähe des Quantenfilms vergrößert dargestellt.

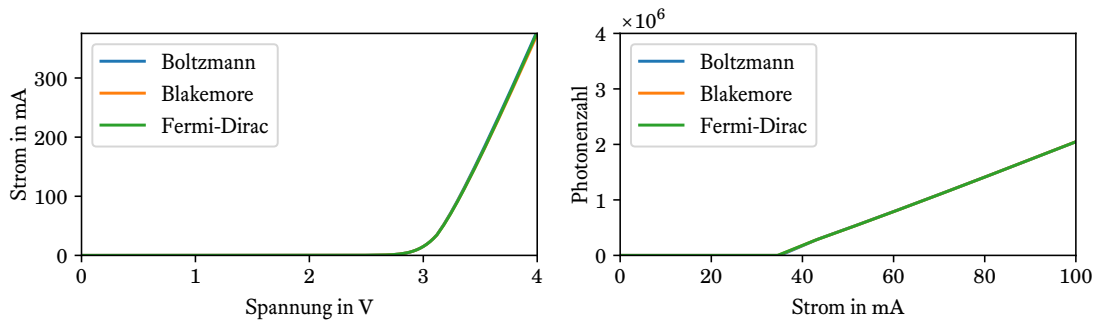


Abbildung 6.3: Links ist die Strom-Spannungskurve und rechts ist die Kennlinie für die schmale Laserdiode mit einem Quantenfilm (Struktur A) dargestellt. Dabei wurden die verschiedenen statistischen Funktionen aus Kapitel 6.4 verwendet. In beiden Fällen liegen alle drei Kurven übereinander.

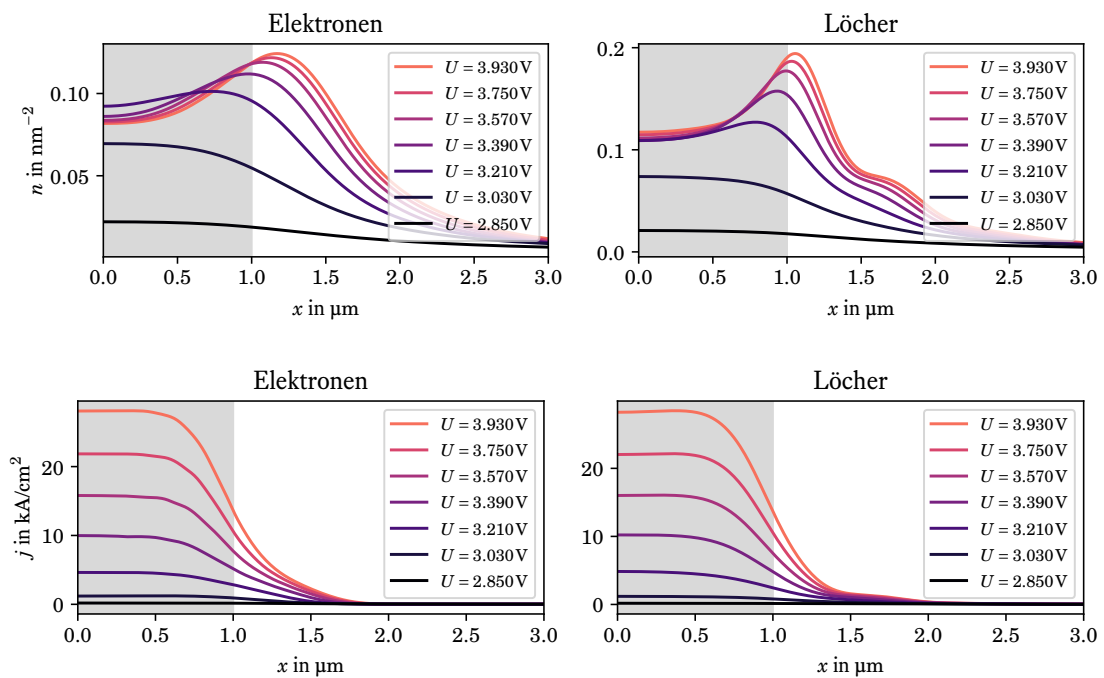


Abbildung 6.4: Für die schmale Laserdiode (Struktur A) sind oben die Ladungsträgerdichten im Quantenfilm und unten die Stromdichten, mit denen der Quantenfilm gepumpt wird, für verschiedene Spannungen gezeigt. Die Region unterhalb des Steps ist in grau eingezeichnet, hier sind die Pumpstromdichten besonders groß. Die Ladungsträgerdichten sind in der Mitte der Laserdiode vergleichsweise niedrig, da die Modenfunktion der ersten transversalen Mode hier ihr Maximum besitzt und durch stimulierte Emission hier die Ladungsträgerverluste überhalb der Laserschwelle besonders groß sind.

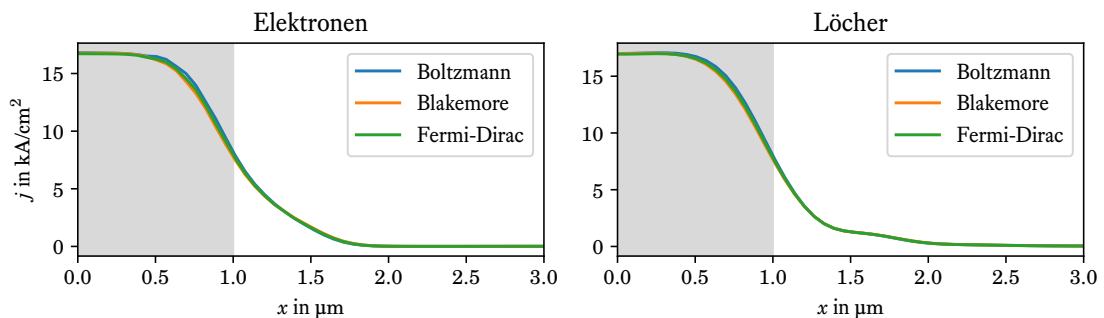


Abbildung 6.5: Für die schmale Laserdiode (Struktur A) sind die Stromdichten, mit denen der Quantenfilm gepumpt wird, für verschiedene statistische Funktionen und eine Spannung von 3.6 V dargestellt. Alle drei Kurven liegen übereinander.

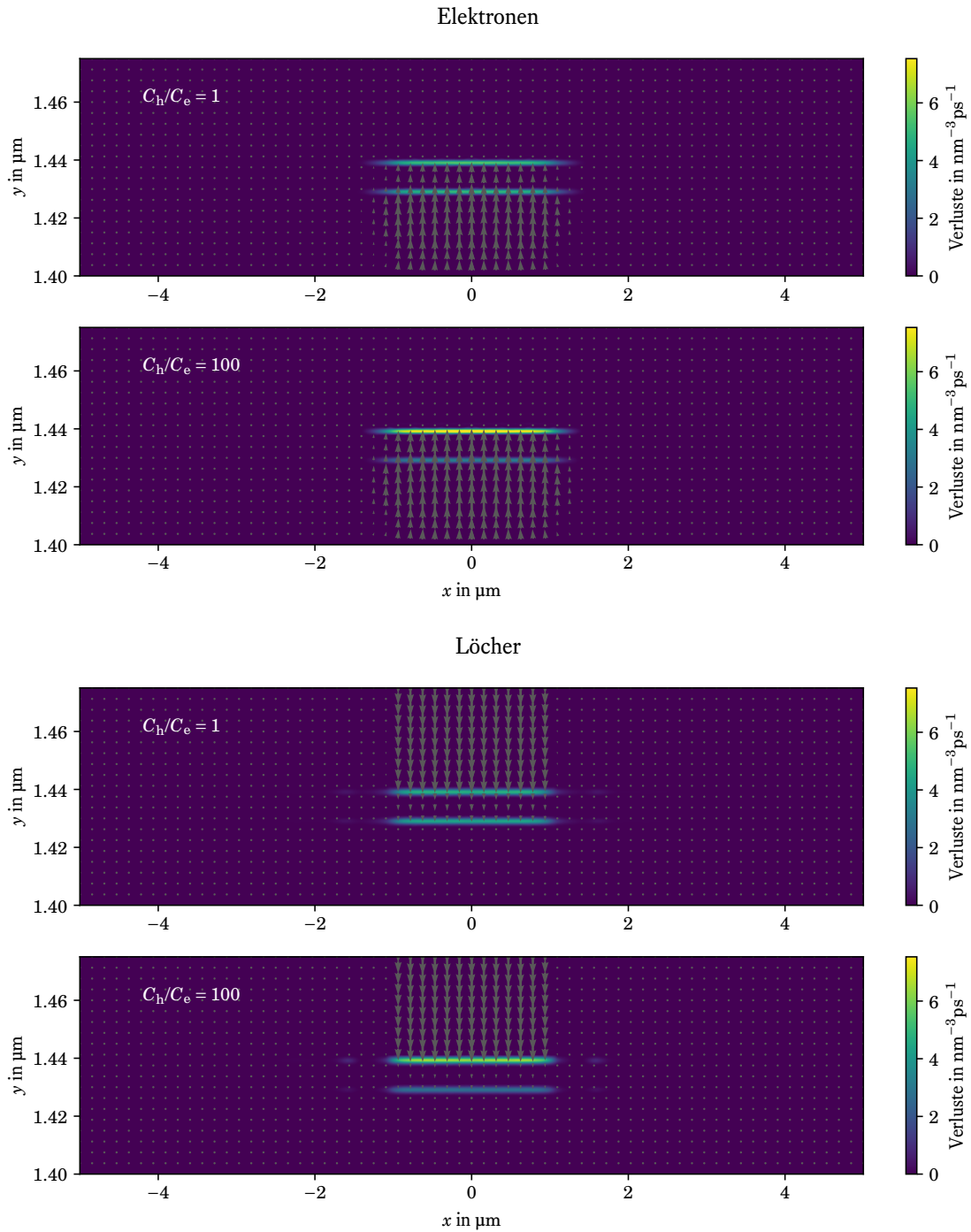


Abbildung 6.6: Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen für die schmale Laserdiode mit zwei Quantenfilmen (Struktur B) für eine Spannung von 4 V. Die Pfeile stellen hierbei die Teilchenstromdichten dar und die Farben zeigen die Größe der Verlustterme. Gezeigt ist die Region in der Nähe der Quantenfilme für verschiedene Verhältnisse der Einfang-Parameter. Während für $C_h/C_e = 1$ beide Quantenfilme gleich gepumpt werden, wird für $C_h \gg C_e$ wird der obere Quantenfilm bevorzugt.

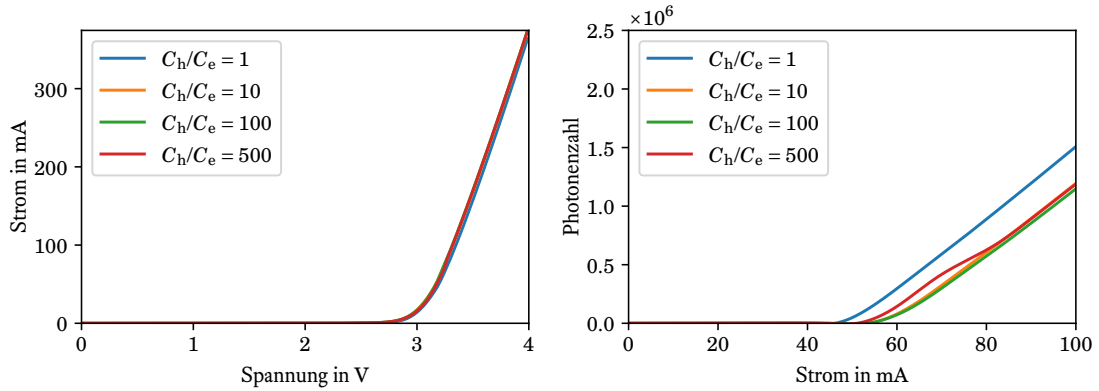


Abbildung 6.7: Links ist die Strom-Spannungskurve und rechts ist die Kennlinie für die schmale Laserdiode mit einer Stegbreite von $2\ \mu\text{m}$ und mit zwei Quantenfilmen (Struktur B) für verschiedene Verhältnisse der Einfang-Parameter gezeigt.

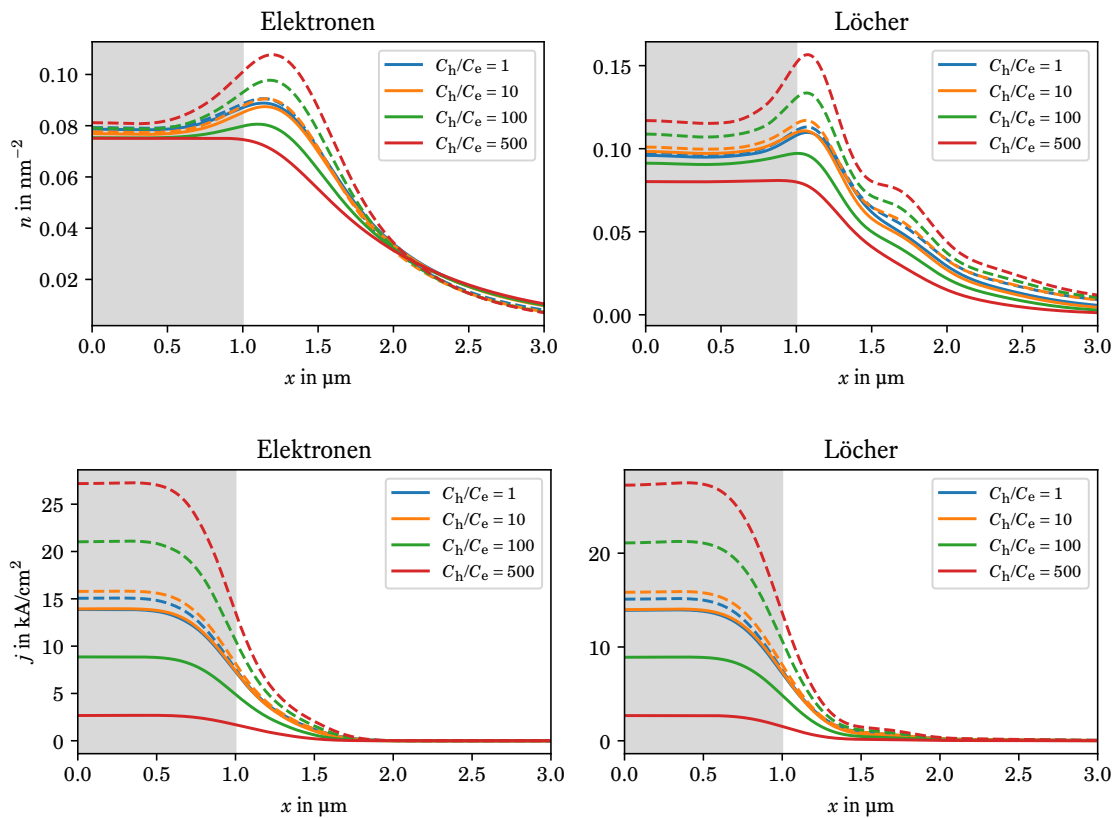


Abbildung 6.8: Für die schmale Laserdiode mit zwei Quantenfilmen (Struktur B) sind oben die Ladungsträgerdichten in den Quantenfilmen und unten die Stromdichten, mit denen die Quantenfilme gepumpt werden, für verschiedene Verhältnisse der Einfang-Parameter gezeigt. Wie erwartet, wächst der Unterschied zwischen den Quantenfilm mit dem Verhältnis C_h/C_e .

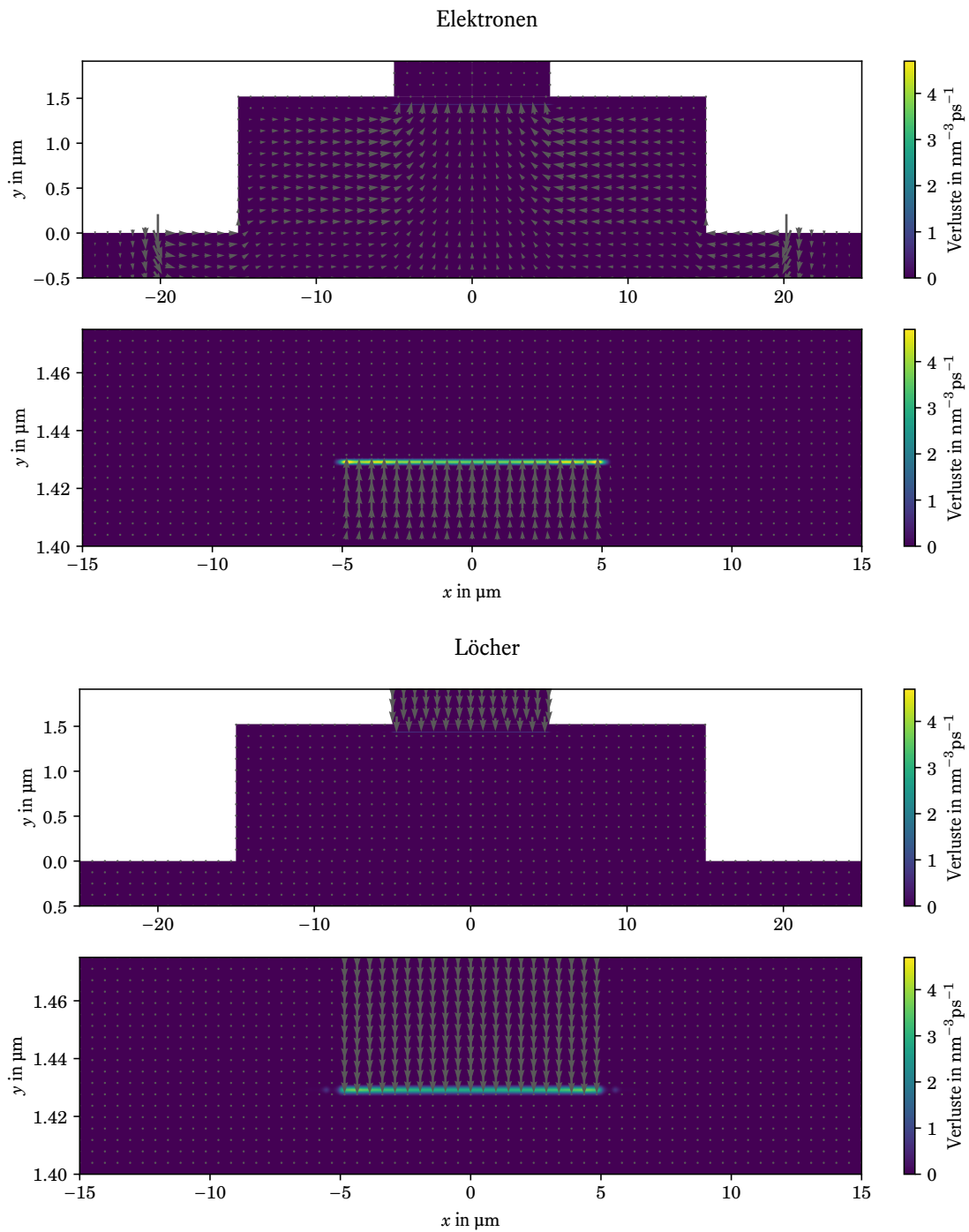


Abbildung 6.9: Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen für die Laserdiode mit einer Stegbreite von $10 \mu\text{m}$ (Struktur C) für eine Spannung von 4V . Die Pfeile stellen hierbei die Teilchenstromdichten dar und die Farben zeigen die Größe der Verlustterme. Unten ist jeweils die Region in der Nähe des Quantenfilms vergrößert dargestellt. Im Vergleich zu Abb. 6.2 ist hier gut zu erkennen, wie die Elektronen eine größere Strecke zur Mitte der Laserdiode zurücklegen müssen.

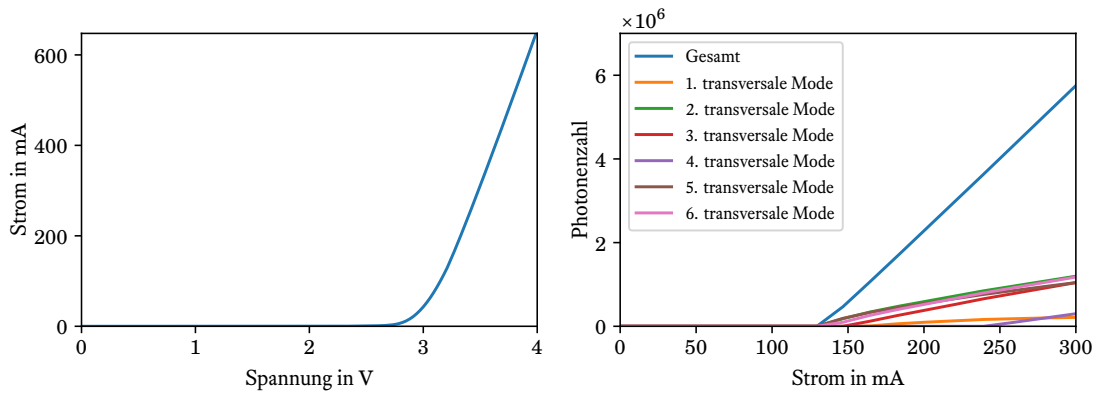


Abbildung 6.10: Links ist die Strom-Spannungskurve und rechts ist die Kennlinie für die breite Laserdiode (Struktur C) dargestellt. Rechts sind außerdem die Beiträge der einzelnen transversalen Moden gezeigt. Oberhalb des Schwellstroms steigt die gesamte Photonenzahl zwar linear an, setzt sich aber aus verschiedenen transversalen Moden zusammen.

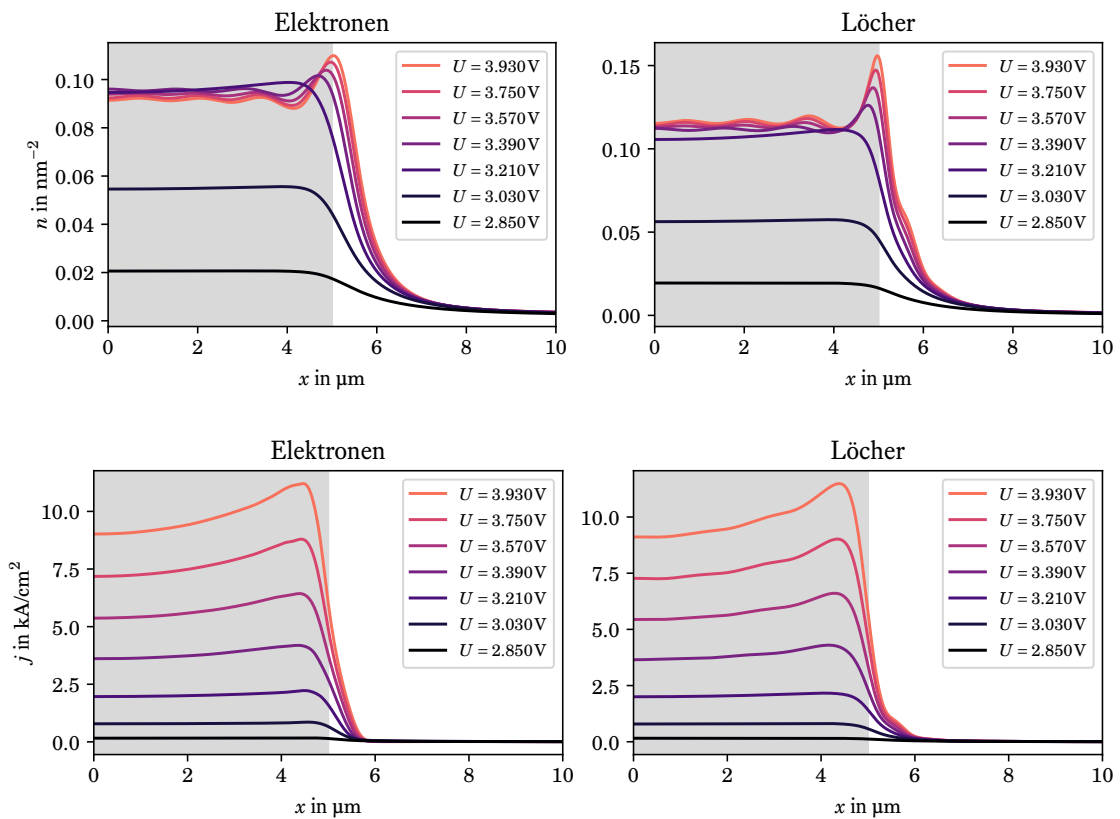


Abbildung 6.11: Für die Laserdiode mit einer Stegbreite von $10\ \mu\text{m}$ (Struktur C) sind oben die Ladungsträgerdichten im Quantenfilm und unten die Stromdichten, mit denen der Quantenfilm gepumpt wird, für verschiedene Spannungen gezeigt. Wie in Abb. 6.4 für die Laserdiode mit einer Stegbreite von $2\ \mu\text{m}$ sind die Ladungsträgerdichten am Rand des Stegs besonders groß, da die transversalen Modenfunktionen am Rand des Stegs stark abfallen und so oberhalb der Laserschwelle die Verluste durch stimulierte Emission hier kleiner sind.

6.9 Simulation der Modendynamik

Die Ergebnisse der Drift-Diffusions-Gleichungen sollen nun verwendet werden um die Modendynamik der Laserdiode zu untersuchen. Dazu werden wieder die Bewegungsgleichungen (6.6) verwendet, nur zu der Bewegungsgleichung für die Photonenzahlen wird ein effektiver Moden-Wechselwirkungsterm hinzugefügt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} &= -B(n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) - \frac{n_{e,h}^{\text{QW}}}{\tau_{\text{nr}}} + D_{e,h} \frac{\partial^2}{\partial x^2} n_{e,h}^{\text{QW}} + \left. \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} \right|_{\text{Pump}} \\ &\quad + \sum_{np} |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \omega_{np} \frac{S_{np}}{L} \text{Im} \chi(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \\ \frac{d}{dt} S_{np} &= -\omega_{np} S_{np} \int dx |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \\ &\quad - \frac{S_{np}}{\tau_{\text{photon}}} + \int dx |t_n(x, z_{\text{QW}})|^2 \text{Im} \chi_{\text{SE}}(\omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) + \left. \frac{d}{dt} S_{np} \right|_{\text{WW}}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Die Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen liefert für jede Spannung bzw. Stromstärke den Pumpterm

$$j_{e,h}^0 = \left. \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW},0} \right|_{\text{Pump}}$$

und die Ladungsträgerdichten $n_{e,h}^{\text{QW},0}$ im Gleichgewicht. Die dreidimensionale Ladungsträgerdichten $n_{e,h}^0$ werden so bestimmt, dass

$$j_{e,h}^0 = C_{e,h} d_{\text{QW}} n_{e,h}^0 \eta_{e,h} (n_{e,h}^{\text{QW},0}, n_{e,h}^0)$$

gilt. Der Pumpterm in Gl. (6.7) lautet dann

$$\left. \frac{d}{dt} n_{e,h}^{\text{QW}} \right|_{\text{Pump}} = C_{e,h} d_{\text{QW}} n_{e,h}^0 \eta_{e,h} (n_{e,h}^{\text{QW}}, n_{e,h}^0).$$

Die Änderung des Brechungsindex aufgrund der Quantenfilmdichten soll in den Modenfunktionen und Modenfrequenzen berücksichtigt werden. Dazu wird eine eindimensionale Eigenwertgleichung gelöst, wie in Kapitel 2.5 beschrieben. Die Änderung der dielektrischen Funktion lautet hier

$$\delta \varepsilon(x) = \frac{1}{d_{\text{QW}}} \left[\chi(\omega_0, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) - \chi(\omega_0, n_e^{\text{QW,ref}}, n_h^{\text{QW,ref}}) \right],$$

mit den Referenzladungsträgerdichten $n_e^{\text{QW,ref}}$ und $n_h^{\text{QW,ref}}$, welche für den zweidimensionalen Modensolver verwendet wurden. Die Normierung der eindimensionalen Eigenfunktionen $\tilde{t}_n(x)$ wird so gewählt, dass

$$\frac{1}{d_{\text{QW}}} \int_{\text{QW}} dx dz |u_p^x(x, z)|^2 = \int_{\text{QW}} dx |\tilde{t}_n^x(x)|^2.$$

gilt. Die Lösung der eindimensionalen Eigenwertgleichung liefert außerdem die effektiven Brechungsindizes und Gruppenbrechungsindizes. Damit können die Frequenzen der dazugehörigen longitudinalen Moden bestimmt werden, die lauten

$$\omega_{np} = \frac{c\pi}{n_{\text{eff}}^n(\omega_0)L} p_0 + \frac{c\pi}{n_{\text{gr}}^n(\omega_0)L} (p - p_0).$$

p_0 ist dabei die ganze Zahl, die durch Runden von

$$\frac{\omega_0 n_{\text{eff}}^n(\omega_0)L}{c\pi}$$

entsteht. Es fehlen noch die Wechselwirkungsterme der optischen Moden; diese sind für die Modendynamik sehr wichtig. Laut Gl. (5.7) gilt für diesen Wechselwirkungsterm

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} S_{np} \right|_{\text{WW}} &\approx \sum_{mq} \frac{S_{np} S_{mq}}{\omega_{np} \omega_{mq}} \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} |u_{np}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 |u_{mq}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}})|^2 A(\omega_{mq} - \omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}) \\ &= \sum_{mq} \frac{1}{2L} \frac{S_{np} S_{mq}}{\omega_{np} \omega_{mq}} \int dx |\tilde{t}_n(x)|^2 |\tilde{t}_m(x)|^2 A(\omega_{mq} - \omega_{np}, n_e^{\text{QW}}, n_h^{\text{QW}}). \end{aligned}$$

6.10 Modendynamik der Laserdiode mit kleiner Stegbreite

Bevor die Modendynamik einer größeren Laserdiode mit vielen relevanten transversalen Moden betrachtet wird, soll zunächst die Modendynamik der Laserdiode mit kleiner Stegbreite (Struktur A) untersucht werden. In Abb. 6.12 ist links die x -Abhängigkeit der transversalen Moden bei einer Zeit von $t=1$ ns gezeigt, welche mit der eindimensionalen Methode bestimmt wurden. In diesem Fall sind wie in Abb. 2.2, wo die Modenfunktionen mit einem zweidimensionalen Modensolver berechnet wurden, nur die ersten beiden transversalen Moden für die Modendynamik relevant. Die Zeitabhängigkeit der Wellenlängen der einzelnen Moden ist rechts in Abb. 6.12 gezeigt. Während die Ladungsträgerdichten zunächst zunehmen, nehmen die Wellenlängen leicht ab. Außerdem lässt sich eine größere Änderung beobachten, sobald die Schwelle erreicht ist. Außerdem wird in Abb. 6.13 gezeigt, wie sich die Ladungsträgerdichte beim Anschalten der Laserdiode verhält. Wie in Abb. 6.4 ist gut sichtbar, dass die Quantenfilme vor allem unterhalb des Stegs gepumpt werden. Aufgrund des Maximums der ersten transversalen Mode ist hier die Ladungsträgerdichte in der Mitte der Laserdiode leicht kleiner als an der Stelle, wo der Steg aufhört. Die Änderung der Ladungsträgerdichte bewirkt außerdem eine Änderung des Brechungsindex und damit wiederum eine Änderung der Moden-Frequenzen.

Die Modendynamik in der ersten Nanosekunde ist in Abb. 6.14 für eine Stromstärke von 100 mA dargestellt. Hier sind die Relaxationsoszillationen gut zu sehen und außerdem sind aufgrund der spontanen Emission zunächst viele longitudinale Moden gleichzeitig aktiv. Angesichts der geringen Anzahl an relevanten transversalen Moden ist es hier auch einfach, die verschiedenen longitudinalen Moden zu unterscheiden. Die Modendynamik für längere Zeitskalen ist in Abb. 6.15 gezeigt. Dabei lässt sich der Effekt des Modenrollens beobachten, dessen Frequenz durch größere Stromstärken erhöht wird.

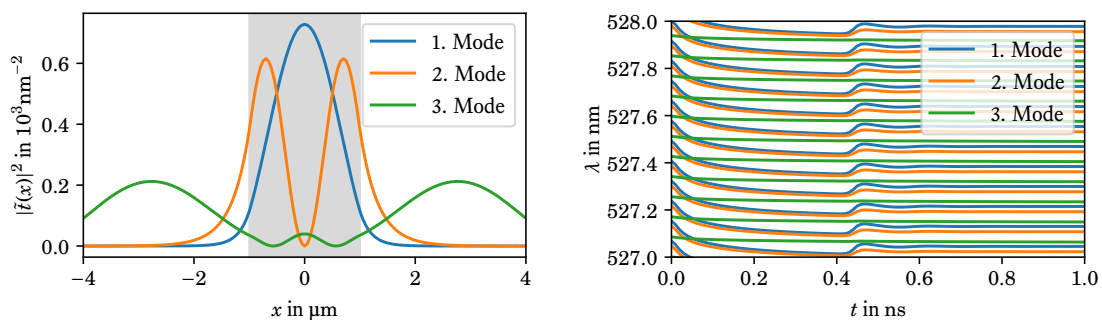


Abbildung 6.12: (Links) Ortsabhängigkeit der transversalen Moden der schmalen Laserdiode (Struktur A) bei einer Zeit von $t = 1$ ns für eine Stromstärke von 100 mA. (Rechts) Zeitabhängigkeit der Vakuumwellenlängen der einzelnen Moden, hierbei wird jede transversale Mode durch eine andere Farbe dargestellt.

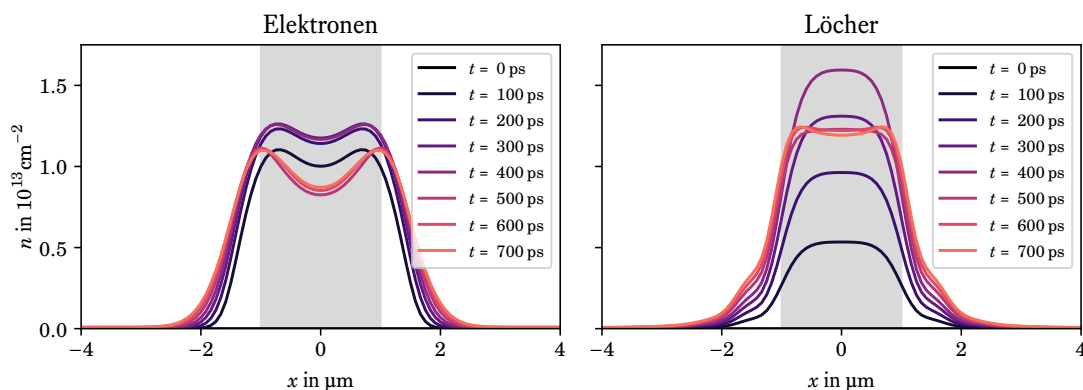


Abbildung 6.13: Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten im Quantenfilm für die schmale Laserdiode (Struktur A) für eine Stromstärke von 100 mA.

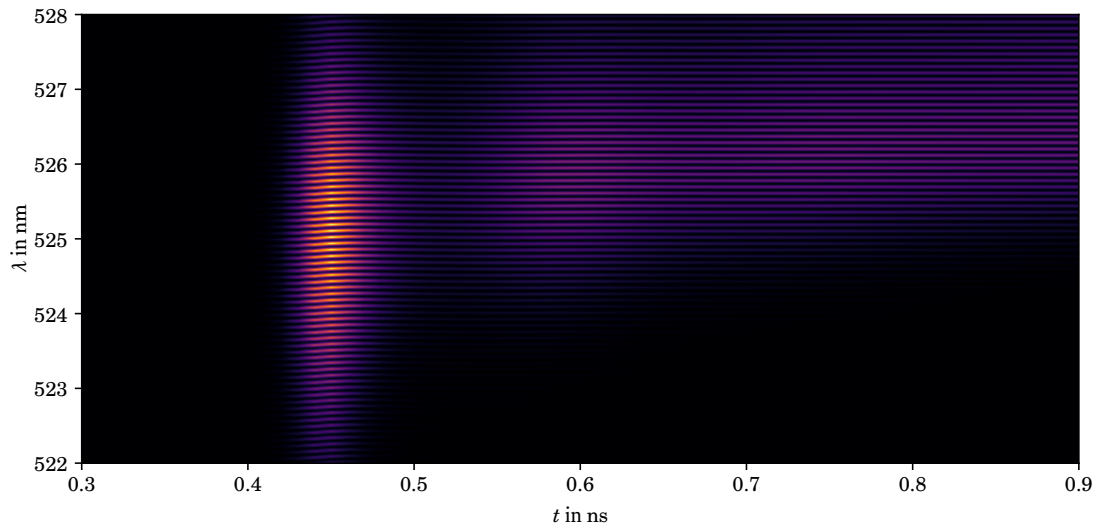


Abbildung 6.14: Modendynamik der schmalen Laserdiode (Struktur A) in der ersten Nanosekunde für eine Stromstärke von 100 mA.

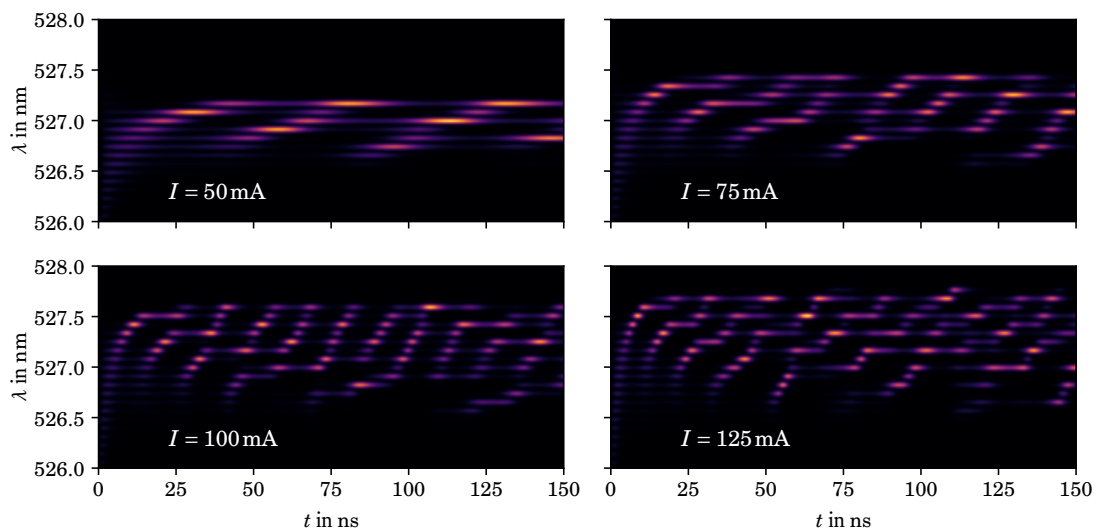


Abbildung 6.15: Modendynamik der schmalen Laserdiode (Struktur A) für verschiedene Stromstärken.

6.11 Modendynamik der Laserdiode mit zwei Quantenfilmen

In Abb. 6.16 ist die Modendynamik für die Laserdiode mit zwei Quantenfilmen (Struktur B) dargestellt. Die Modendynamik ist sehr ähnlich im Vergleich zu der von Struktur A in Abb. 6.15. Ein Unterschied ist der Wellenlängenbereich der aktiven Moden, dieser liegt näherungsweise 1.5 nm über dem von Struktur A. Dies lässt sich durch die verschiedenen Ladungsträgerdichten der beiden Quantenfilme erklären, siehe Abb. 6.8. Diese unterschiedlichen Ladungsträgerdichten führen zu unterschiedlichen Suszeptibilitäten. Die gesamte optische Verstärkung entspricht einer Summe über die Quantenfilme, damit ergibt sich eine kleine Verschiebung des Maximums um ≈ 1.5 nm im Vergleich zu der Simulation mit nur einem Quantenfilm.

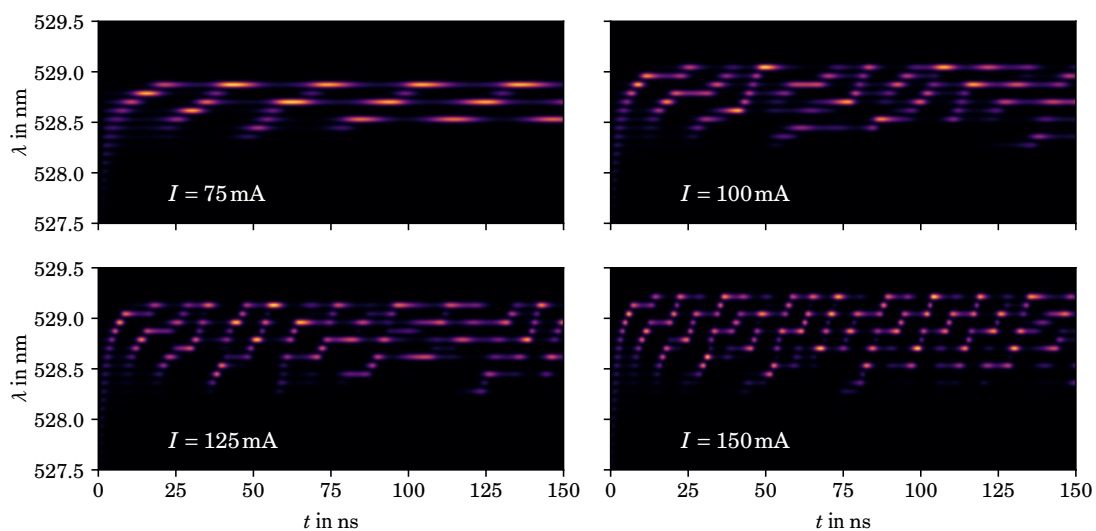


Abbildung 6.16: Modendynamik der Laserdiode mit zwei Quantenfilmen (Struktur B) für verschiedene Stromstärken. Das Verhältnis der Einfang-Parameter ist hierbei $C_h/C_e = 100$. Im Vergleich zu Abb. 6.15 wurde aufgrund der höheren Schwellstromstärke eine zusätzliche Stromstärke von 150 mA anstelle von 50 mA verwendet.

6.12 Modendynamik für die Laserdiode mit großer Stegbreite

Nun soll die Methode auf eine breitere Laserdiode mit einer Stegbreite von $10\ \mu\text{m}$ (Struktur C) angewendet werden. Mit den hier verwendeten Parameter sind 8 transversale Moden relevant, welche in Abb. 6.17 gezeigt sind. Wie erwartet entspricht die Ordnung der Mode der Anzahl der Extremstellen und die Modenfunktionen nehmen außerhalb der Stegbreite stark ab. In Abb. 6.18 ist wieder die Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten gezeigt, aufgrund der größeren Anzahl an transversalen Moden sind hier nun kleine Oszillationen zu beobachten. Die resultierende Modendynamik ist in Abb. 6.21 für verschiedene Stromstärken dargestellt. Weil viele transversale Moden für die Laserdynamik relevant sind, gibt es eine große Anzahl Moden mit sehr ähnlicher Frequenz, die gleichzeitig aktiv sein können. Daher ist es hier schwieriger, zwischen einzelnen longitudinalen Moden zu unterscheiden, allerdings ist hier das Modenrollen immer noch gut zu erkennen.

In Abb. 6.19 ist der zeitliche Verlauf der Photonenzahlen in den einzelnen transversalen Moden gezeigt, hierbei wurde jeweils über alle dazugehörigen longitudinalen Moden summiert. Die durchschnittlichen Anteile der verschiedenen transversalen Moden scheinen sich auf großen Zeitskalen nicht zu ändern, allerdings gibt es kleinere Änderungen im Bereich von 2 ns bis 3 ns nach Beginn der Simulation. Diese stammen von der Wechselwirkung der verschiedenen transversalen Moden miteinander und die Gesamtphotonenzahl bleibt zeitlich konstant.

Bisher wurde in der Modendynamik nur die gesamte Ausgangsleistung betrachtet, da hier immer die Photonenzahlen verwendet wurden. Es ist aber möglich, die Photonenzahlen mit der entsprechen transversalen Modenfunktion zu multiplizieren, um eine ortsaufgelöste Modendynamik zu erhalten, welche auch gemessen werden kann [125]. In Abb. 6.22 ist so die Modendynamik für verschiedene Orte gezeigt. In der Mitte der Diode unterhalb des Stegs ähnelt die Modendynamik noch dem vorherigen Ergebnis, allerdings gibt es kleinere Abweichungen, je nachdem, welche Werte die verschiedenen transversalen Modenfunktionen an dem jeweiligen Punkt annehmen. Weit außerhalb des Stegs fallen einige Moden schneller ab, damit sind hier nur wenige Moden relevant und die Unterscheidung der einzelnen longitudinalen Moden ist einfacher.

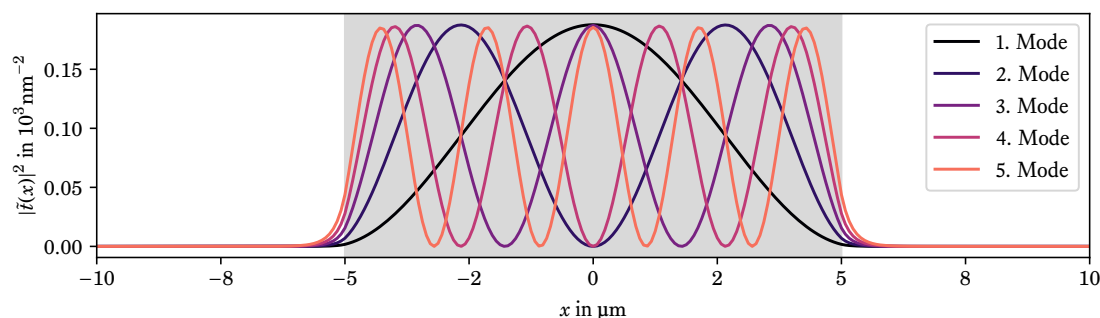


Abbildung 6.17: Ortsabhängigkeit der transversalen Moden der breiten Laserdiode (Struktur C) bei einer Zeit von $t = 3\ \text{ns}$ für eine Stromstärke von 200 mA. Zur besseren Übersicht sind hier nur die ersten fünf Moden dargestellt.

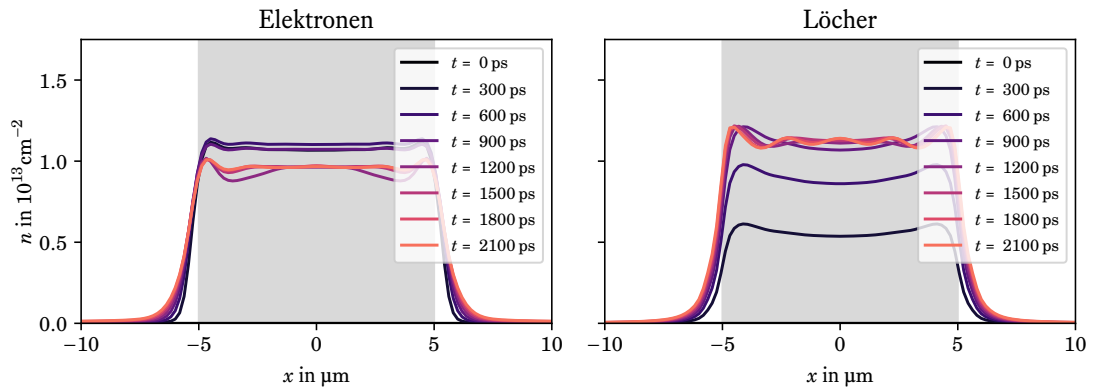


Abbildung 6.18: Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten im Quantenfilm für die breite Laserdiode (Struktur C).

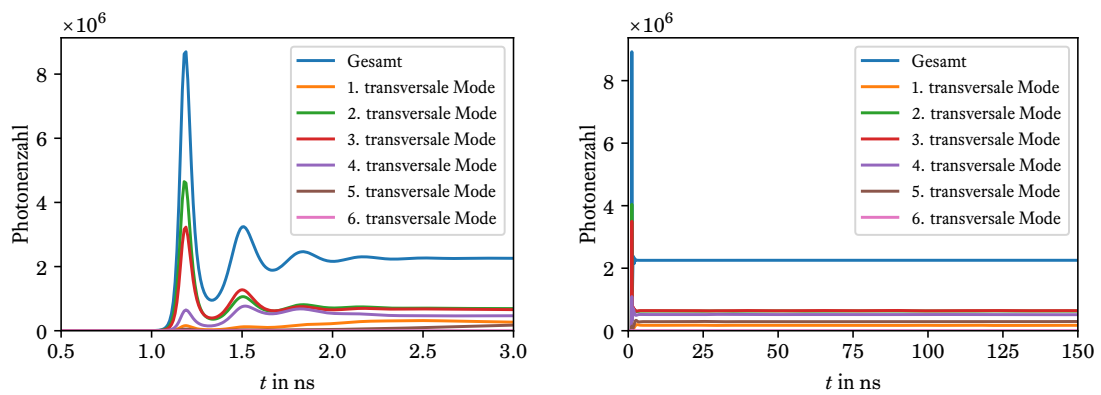


Abbildung 6.19: Zeitlicher Verlauf der Photonenzahlen in den verschiedenen transversalen Moden für eine Stromstärke von 200 mA für die breite Laserdiode (Struktur C).

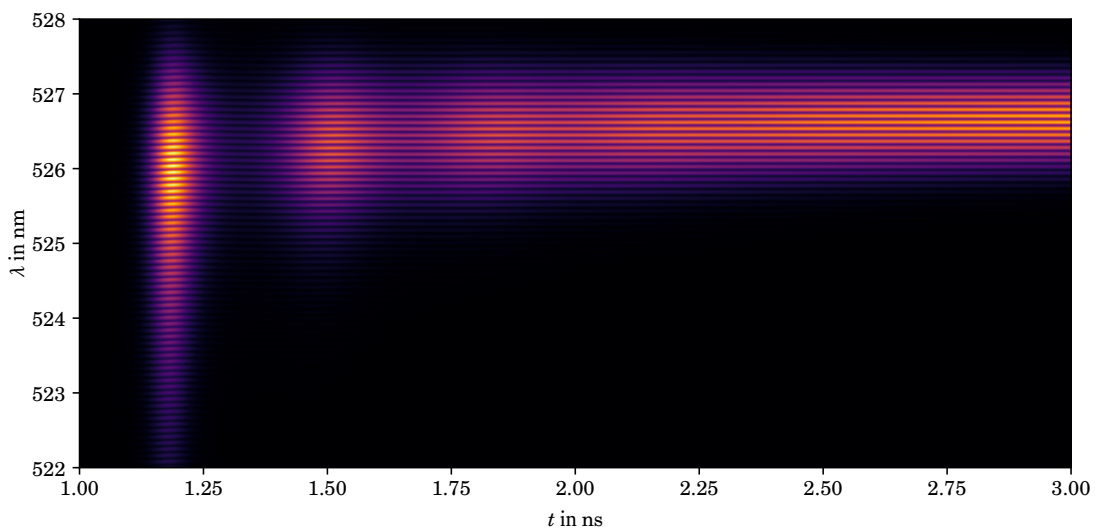


Abbildung 6.20: Modendynamik der breiten Laserdiode (Struktur C) in den ersten drei Nanosekunden für eine Stromstärke von 200 mA.

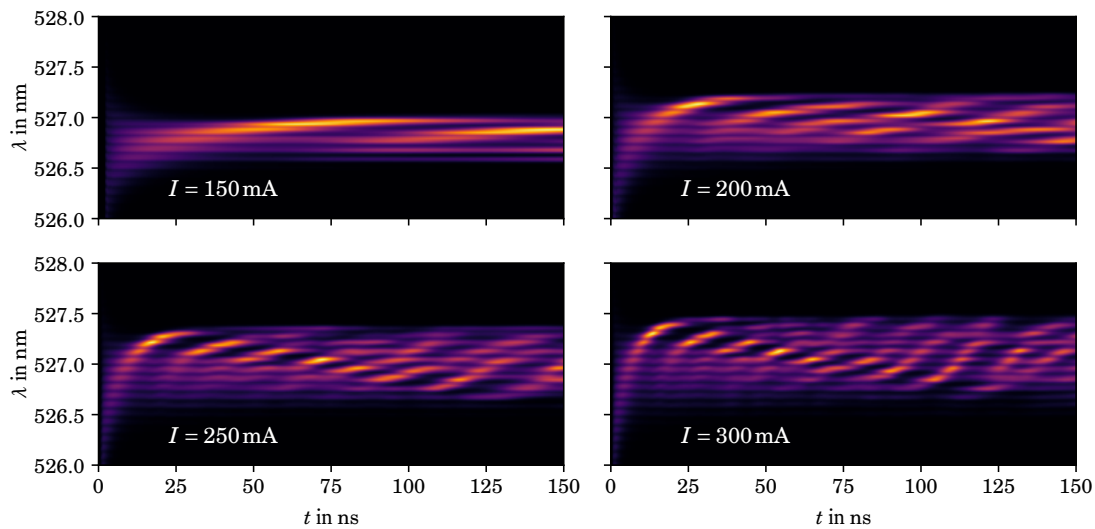


Abbildung 6.21: Modendynamik der breiten Laserdiode (Struktur C) für verschiedene Stromstärken. Weil viele transversale Moden an der Modendynamik beteiligt sind, ist es im Vergleich zu Abb. 6.15 schwieriger, die einzelnen Moden zu unterscheiden.

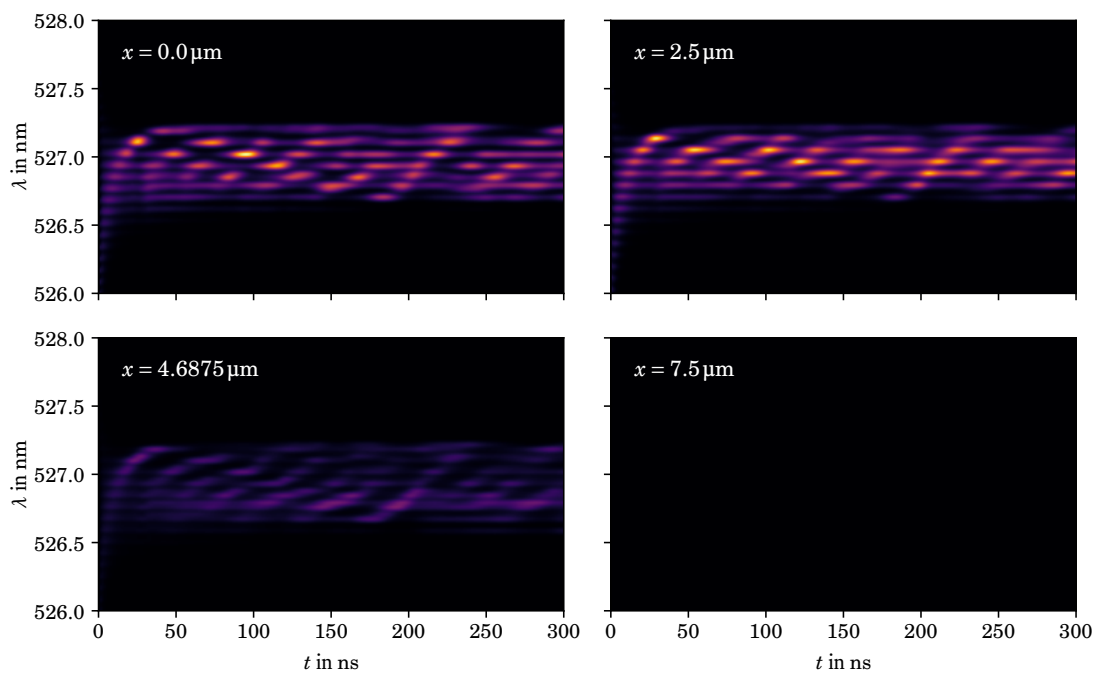


Abbildung 6.22: Die Modendynamik der breiten Laserdiode (Struktur C) für eine Stromstärke von 200 mA an verschiedenen Orten ausgewertet. Bei allen vier Bildern wurde die gleiche Skala verwendet. Um die Modendynamik kurz vor dem Ende des Stegs zu untersuchen, wurde im dritten Bild ein x -Wert von $4.6875 \mu\text{m}$ anstelle von $5 \mu\text{m}$ verwendet. Für $x = 5 \mu\text{m}$ ist wie für $x = 7.5 \mu\text{m}$ keine Dynamik zu erkennen, da hier die transversalen Modenfunktionen schon stark abgefallen sind, siehe Abb. 6.17.

6.13 Fazit

In diesem Kapitel wurden die Drift-Diffusions-Gleichungen verwendet, um den Transport der Ladungsträger von den Kontakten zu den Quantenfilmen zu beschreiben. Über einen Einfang-Term können die Bulk-Ladungsträger in der Nähe eines Quantenfilms in die Energie-Niveaus dieses Quantenfilms gelangen. Für die Ladungsträger im Quantenfilm und die Photonen in der Laserdiode wird die gleiche Theorie benutzt, wie sie in vorherigen Kapiteln hergeleitet und verwendet wurde. Für eine vorgegebene Struktur erlaubt es diese Methode, die Stromdichten, mit denen die einzelnen Quantenfilme gepumpt werden, für eine vorgegebene Spannung zu bestimmen.

Diese Pump-Stromdichten wurden im zweiten Teil dieses Kapitels verwendet, um die Modendynamik für zwei Laserdioden mit unterschiedlicher Breite zu untersuchen. Dabei ist es möglich, mehr als eine transversale Mode in der Laserdynamik zu betrachten. Bei der Laserdiode mit einer kleinen Stegbreite ist allerdings nur eine transversale Mode für die Modendynamik relevant und die Modendynamik entspricht den Ergebnissen aus den vorherigen Kapiteln. Bei der Laserdiode mit größerer Stegbreite hingegen nehmen mehrere transversale Moden an der Laserdynamik teil und in den simulierten Streak-Camera-Bildern ist es schwierig, die einzelnen Moden zu unterscheiden. Der Effekt des Modenrollen lässt sich hier allerdings immer noch beobachten.

Kapitel 7

Traveling-Wave-Modell

Bisher wurde die Heisenberg-Bewegungsgleichung verwendet, um die Bewegungsgleichungen des optischen Feldes herzuleiten. Beim *Traveling-Wave-Modell* [126–130] wird stattdessen ein klassisches Feld angenommen und das Feld wird nicht mehr in die verschiedenen Moden aufgeteilt. Dies ist bei sehr großen Laserdioden, wie zum Beispiel Breitstreifen-Laser [93, 94], von Vorteil, da hier sehr viele Moden an der Laserdynamik beteiligt sind und es zu aufwendig wäre, die Dynamik jeder einzelnen Mode zu behandeln. Bei der Traveling-Wave-Methode wird das optische Feld in zwei Anteile aufgespalten, welche jeweils laufende Wellen beschreiben, siehe Abb. 7.1. Die laufenden Wellen breiten sich in entgegengesetzte Richtungen aus und werden beim Erreichen der beiden teildurchlässigen Spiegel an den Enden des Wellenleiters reflektiert. Je nach Reflektivität der Spiegel verlässt dabei ein bestimmter Anteil die Laserdiode und der Rest läuft in entgegengesetzter Richtung weiter. Bei der Traveling-Wave-Methode werden das optische Feld und die Ladungsträgerdichte an allen Punkten im Wellenleiter ausgewertet, daher können Effekte, welche durch die Reflektion an den Spiegeln auftreten, bei dieser Methode berücksichtigt werden.

Die Methode hat allerdings auch Nachteile. Beispielsweise kann die Suszeptibilität keine beliebige Form haben, sondern sie muss durch eine Summe von einfachen Polstellen in der komplexen Ebene dargestellt werden. Außerdem können Quanteneffekte wie spontane Emission nur in Form von Näherungen berücksichtigt werden. Da es in dieser Arbeit hauptsächlich um die Beschreibung der Modendynamik geht, soll diese auch mit dem Traveling-Wave-Modell untersucht werden. Dazu wird eine zeitliche Fourier-Transformation des optischen Feldes nach dem Verlassen der Diode durchgeführt, um eine Aufspaltung in die einzelnen longitudinalen Moden zu erhalten. Weil viele Effekte der Modendynamik auf Vibrationen der Ladungsträgerdichte zurückgeführt werden können und bei der Traveling-Wave-Methode die Ortsabhängigkeit in Ausbreitungsrichtung direkt enthalten ist, liegt hier die Hoffnung darin, die Modendynamik gut beschreiben zu können ohne auf effektive Kopplungsterme zurückgreifen zu müssen.

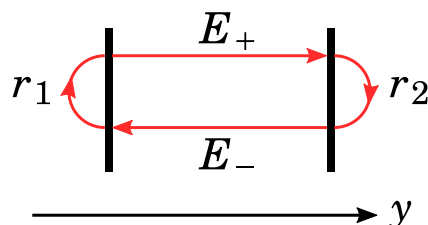


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung des Traveling-Wave-Modells mit zwei Spiegeln

7.1 Ansatz für das optische Feld

Da beim Traveling-Wave-Modell angenommen wird, dass das Feld klassisch ist, werden die Maxwell-Gleichungen verwendet, um die Dynamik des Feldes zu beschreiben. Die Wellengleichung, die aus diesen Gleichungen folgt, lautet

$$\Delta \mathbf{E} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mu_0 \mathbf{D} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P}.$$

Eine Fourier-Transformation bezüglich der Zeit ergibt die Gleichung

$$-\frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{E}(\omega) - \Delta\mathbf{E}(\omega) = \frac{\omega^2}{\epsilon_0 c^2}\mathbf{P}(\omega).$$

Im linearen Fall lässt sich die Polarisation wieder mithilfe der Suszeptibilität durch das elektrische Feld ausdrücken:

$$\mathbf{P}(\omega) = \epsilon_0(\chi_b + \tilde{\chi}(\omega))\mathbf{E}(\omega) = \epsilon_0\chi_b\mathbf{E}(\omega) + \tilde{\mathbf{P}}(\omega),$$

hier enthält $\tilde{\chi}$ die Beiträge der freien Ladungsträger und χ_b alle anderen Beiträge zur Suszeptibilität. Für diese Beiträge wird angenommen, dass sie nicht von der Frequenz abhängen. Für das elektrische Feld wird der folgende Ansatz benutzt:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \approx \sum_{\pm} \Phi^{\pm}(x, y, \omega) \mathbf{Z}(z) e^{\pm i\beta_0 y} \mathbf{e}_x. \quad (7.1)$$

Weil nur TE-Moden betrachtet werden sollen, wurde angenommen, dass das Feld in x -Richtung polarisiert ist. Die z -Abhängigkeit des Feldes wird allein durch die Funktion $\mathbf{Z}(z)$ beschrieben und das Feld wurde in zwei Anteile $+$ und $-$ aufgespalten. Diese beschreiben laufende Wellen, welche sich jeweils in $+y$ und $-y$ -Richtung bewegen. Dabei ist β_0 eine Wellenzahl, welche so gewählt wird, dass sie der tatsächlichen Wellenzahl der Wellen möglichst ähnlich ist. Dadurch besitzen die Funktionen Φ^{\pm} nur noch eine schwache y -Abhängigkeit. Wird dieser Ansatz in die Wellengleichung eingesetzt, folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x \Phi^{\pm}(x, y, \omega) e^{\pm i\beta_0 y} \left[-\frac{\omega^2}{c^2} (1 + \chi_b) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \mathbf{Z}(z) \\ - \mathbf{e}_x \mathbf{Z}(z) e^{\pm i\beta_0 y} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \pm 2i\beta_0 \frac{\partial}{\partial y} - \beta_0^2 \right] \Phi^{\pm}(x, y, \omega) = \frac{\omega^2}{\epsilon_0 c^2} \tilde{\mathbf{P}}^{\pm}(\mathbf{r}, \omega). \end{aligned} \quad (7.2)$$

Auch die Polarisation $\tilde{\mathbf{P}}$ wurde hier in zwei Teile aufgespalten, welche von den jeweiligen Feldkomponenten erzeugt werden und ähnliche Ortsabhängigkeiten besitzen. Da die Wellenzahl β_0 sehr groß ist, würden bei einer räumlichen Mittelung über einen kleinen y -Bereich Terme mit $e^{2i\beta_0 y}$ und $e^{-2i\beta_0 y}$ entfallen. Dadurch folgt die obige Gleichung, bei der zum Beispiel immer nur die Größen Φ^+ und $\tilde{\mathbf{P}}^+$ zusammen vorkommen. Für die Funktion $\mathbf{Z}(z)$, welche die Ortsabhängigkeit senkrecht zum Quantenfilm beschreibt, wird angenommen, dass sie die Lösung einer Eigenwertgleichung ist. Diese Eigenwertgleichung folgt aus der ersten Zeile von Gl. (7.2) und lautet

$$\left[-\frac{\omega^2}{c^2} (1 + \chi_b) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \mathbf{Z}(z) = -\frac{\omega^2 n_{\text{eff}}^2(\omega)}{c^2} \mathbf{Z}(z),$$

mit der Normierung

$$\int dz |\mathbf{Z}(z)|^2 = 1.$$

Da die Funktionen Φ^{\pm} nur schwach von y abhängen sollen, sollte die folgende Näherung gut erfüllt sein:

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Phi^{\pm}(x, y) \right| \ll \left| 2i\beta_0 \frac{\partial}{\partial y} \Phi^{\pm}(x, y) \right|.$$

Für die Polarisation der freien Ladungsträger wird nun angenommen, dass sie nur an der Position des Quantenfilms von Null verschieden ist und der Ausrichtung des elektrischen Feldes folgt. Zur weiteren Vereinfachung werden weitere Faktoren eingeführt, die neudefinierten Größen lauten

$$\begin{aligned} \Phi^{\pm}(x, y, \omega) &= \frac{1}{e} \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0) \\ \tilde{\mathbf{P}}^{\pm}(\mathbf{r}, \omega) &\approx \delta(z - z_{\text{QW}}) \mathbf{Z}(z_{\text{QW}}) d_{\text{QW}} \mathbf{e}_x \tilde{\mathbf{P}}^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0) \frac{\epsilon_0}{e} e^{\pm i\beta_0 y}, \end{aligned} \quad (7.3)$$

z_{QW} bezeichnet dabei die Position des Quantenfilms. Die Frequenz ω_0 hängt mit der Wellenzahl β_0 über den effektiven Brechungsindex zusammen:

$$\omega_0 = \frac{c}{n_{\text{eff}}(\omega_0)} \beta_0.$$

Wird der Ansatz für die Polarisation in Gl. (7.2) eingesetzt und anschließend in z -Richtung integriert, folgt

$$-\frac{\omega^2 n_{\text{eff}}^2(\omega)}{c^2} \tilde{\Phi}^\pm(x, y, \omega - \omega_0) - \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \pm 2i\beta_0 \frac{\partial}{\partial y} - \beta_0^2 \right] \tilde{\Phi}^\pm(x, y, \omega - \omega_0) = \frac{\omega^2}{c^2} \Gamma \bar{P}^\pm(x, y, \omega - \omega_0). \quad (7.4)$$

Der Confinement-Faktor entspricht einem Integral der Modenfunktion über den Quantenfilm und lautet

$$\Gamma = \int_{\text{QW}} dz |Z(z)|^2 \approx d_{\text{QW}} |Z(z_{\text{QW}})|^2,$$

dabei wurde ausgenutzt, dass sich das optische Feld in z -Richtung über die Ausdehnung des Quantenfilms nur wenig ändert. Um in Gl. (7.4) eine Fourier-Transformation durchzuführen, ist sie noch zu kompliziert, da beispielsweise der effektive Brechungsindex noch von der Frequenz abhängt. Daher wird zunächst in Gl. (7.4) noch eine Taylor-Entwicklung bezüglich der Frequenz um ω_0 durchgeführt:

$$-\frac{2}{c^2}(\omega - \omega_0) \left[\omega_0 n_{\text{eff}}^2(\omega_0) + \omega_0^2 n_{\text{eff}}(\omega_0) \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_0} \right] \tilde{\Phi}^\pm(x, y, \omega - \omega_0) + \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mp 2i\beta_0 \frac{\partial}{\partial y} \right] \tilde{\Phi}^\pm(x, y, \omega - \omega_0) \approx \frac{\omega_0^2}{c^2} \Gamma \bar{P}^\pm(x, y, \omega - \omega_0).$$

Mit dem Gruppenbrechungsindex

$$n_{\text{gr}}(\omega_0) = n_{\text{eff}}(\omega_0) + \omega_0 \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_0}$$

folgt

$$-\frac{2}{c^2}(\omega - \omega_0) \omega_0 n_{\text{eff}}(\omega_0) n_{\text{gr}}(\omega_0) \tilde{\Phi}^\pm(x, y, \omega - \omega_0) + \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mp 2i\beta_0 \frac{\partial}{\partial y} \right] \tilde{\Phi}^\pm(x, y, \omega - \omega_0) \approx \frac{\omega_0^2}{c^2} \Gamma \bar{P}^\pm(x, y, \omega - \omega_0).$$

Nun kann die Fourier-Transformation ohne Probleme durchgeführt werden und das Ergebnis lautet

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mp 2i\beta_0 \frac{\partial}{\partial y} \right] \tilde{\Phi}^\pm(x, y, t) - i \frac{2}{c^2} \omega_0 n_{\text{eff}}(\omega_0) n_{\text{gr}}(\omega_0) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^\pm(x, y, t) \approx \frac{\omega_0^2}{c^2} \Gamma \bar{P}^\pm(x, y, t).$$

Ein paar Umformungen ergeben

$$\frac{n_{\text{gr}}}{c} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^\pm \pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^\pm - \frac{i}{2\beta_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Phi}^\pm = \frac{i\beta_0 \Gamma}{2n_{\text{eff}}^2} \bar{P}^\pm,$$

hier wurden die Ortsabhängigkeiten und Zeitabhängigkeiten nicht mehr explizit aufgeführt. Dies ist die Gleichung, welche das Traveling-Wave-Modell auszeichnet. Wichtig sind hier die ersten beiden Terme, welche die Ausbreitung der Einhüllenden eines Wellenpaketes in $\pm y$ -Richtung mit der Gruppengeschwindigkeit beschreiben. Um eine Laserdiode zu beschreiben, ist auch die Dynamik der Ladungsträgerdichten im Quantenfilm wichtig. Die Änderung der Ladungsträgerdichten aufgrund des Feldes lautet (vergleiche mit Gl. (4.5)):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n \Big|_{\text{Feld}} &= \frac{1}{\hbar} \int_{\text{QW}} dy \text{Im} [\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)] \\ &\approx \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{\epsilon_0}{e^2} \sum_{\pm} \text{Im} [(\tilde{\Phi}^\pm)^* \bar{P}^\pm]. \end{aligned}$$

Hierbei fällt auf, dass im Vergleich zu Gl. (4.5) der Faktor 2 fehlt. Dies rührt daher, dass bei der Herleitung von Gl. (4.5) die Rabi-Frequenz die folgende Form besitzt (hier ohne Hartree-Fock-Korrekturen):

$$\hbar\Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda} = -\frac{ep_{\lambda}^*}{m_0} \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p \epsilon_0}} B_p u_p(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}).$$

Das vollständige Vektorpotential lautet aber

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_p \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p \epsilon_0}} [B_p \mathbf{u}_p(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_p^*(\mathbf{r}) B_p^*],$$

daher enthält die Rabi-Frequenz nur den Beitrag mit der Zeitabhängigkeit $B_p \propto e^{-i\omega_p t}$. Der andere Beitrag mit der Zeitabhängigkeit $B_p^* \propto e^{i\omega_p t}$ trägt natürlich in gleicher Weise bei und wird daher in dem Faktor 2 berücksichtigt. Beim Traveling-Wave-Modell ist das gesamte Feld in den $\tilde{\Phi}^{\pm}$ enthalten, daher wäre der Faktor 2 an dieser Stelle zuviel.

Als Letztes wird noch eine Bewegungsgleichung für die Polarisationen \bar{P}^{\pm} benötigt. Im Frequenzraum lässt sich die Polarisation mithilfe der Suszeptibilität durch das elektrische Feld ausdrücken:

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega).$$

Mit den Definitionen aus diesem Kapitel folgt

$$\bar{P}^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0) = \chi(\omega) \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0).$$

Hier ist eine Rücktransformation schwierig, da die Funktion $\chi(\omega)$ im Allgemeinen nicht bekannt ist. Um eine Rücktransformation möglich zu machen, wird die Funktion $\chi(\omega)$ nun als eine Summe von komplexen Polstellen erster Ordnung dargestellt:

$$\bar{P}^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0) = \sum_j \frac{i\gamma_j \chi_j^0}{\omega - \omega_0 - \Delta\omega_j + i\gamma_j} \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0) = \sum_j \bar{P}_j^{\pm}(x, y, \omega - \omega_0).$$

Hier wurde die Polarisation in die einzelnen Beiträge der Polstellen aufgeteilt. Die Rücktransformation kann nun einfach durchgeführt werden und liefert die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_j^{\pm} = -\gamma_j \bar{P}_j^{\pm} - i\Delta\omega_j \bar{P}_j^{\pm} + \gamma_j \chi_j^0 \tilde{\Phi}^{\pm}. \quad (7.5)$$

Um die Rechenzeit klein zu halten, ist es von Interesse, die Anzahl der Polstellen möglich gering zu halten, da für jede Polstelle eine eigene Differentialgleichung gelöst werden muss. In diesem Kapitel werden daher eine Polstelle und ein frequenzunabhängiger Beitrag verwendet. Dementsprechend hat die Suszeptibilität die Form

$$\chi(\omega) \approx \chi_0 + \frac{i\gamma\chi_1}{\omega - \omega_0 - \Delta\omega + i\gamma}. \quad (7.6)$$

Die Parameter $\chi_0, \chi_1, \gamma, \omega_0$ und $\Delta\omega$ hängen hier natürlich von der Ladungsträgerdichte n ab. Daher werden diese Parameter für eine Referenzdichte n_0 mithilfe einer Kurvenanpassung für eine bestimmte Bandstruktur bestimmt, ein Beispiel ist in Abb. 7.2 gezeigt. Außerdem wird die Ableitung der Parameter χ_1 und χ_0 numerisch bestimmt, um Änderungen der Ladungsträgerdichte zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} \chi_0(n) &= \chi_0(n_0) + (n - n_0) \chi_0'(n_0), \\ \chi_1(n) &= \chi_1(n_0) + (n - n_0) \chi_1'(n_0). \end{aligned}$$

7.2 Das vollständige Modell

Neben der direkten Kopplung mit dem optischen Feld müssen in der Bewegungsgleichung der Ladungsträgerdichten natürlich noch andere Terme berücksichtigt werden. Die vollständigen Bewegungsgleichungen lauten

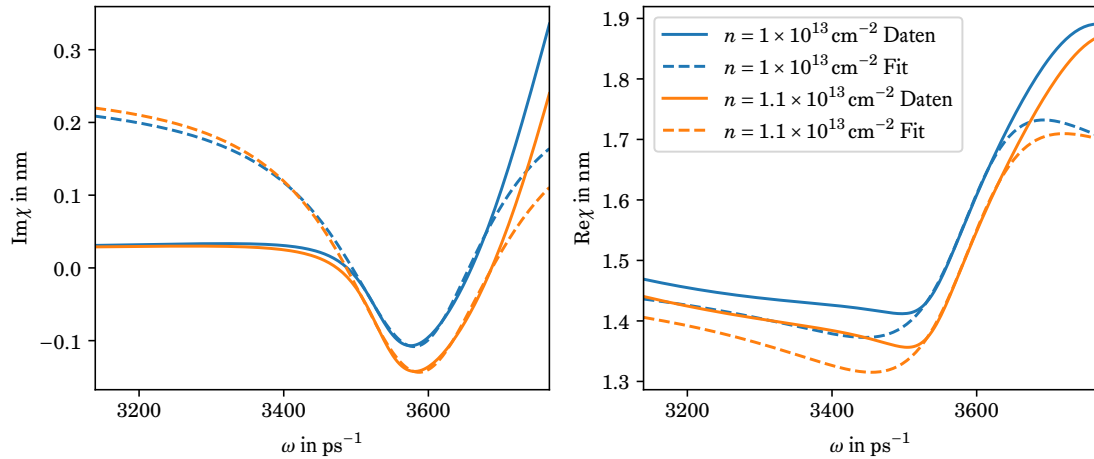


Abbildung 7.2: Kurvenanpassung durchgeführt für die Suszeptibilität mit der Funktion aus Gl. (7.6). Die Daten für die Suszeptibilität wurden für eine $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur mit den Parametern aus Tabelle 9.18 im Anhang bestimmt.

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{e,h} = \frac{\eta_{inj} j}{e} - D_{e,h} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) n_{e,h} + \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{\epsilon_0}{e^2} \sum_{\pm} \text{Im} [(\tilde{\Phi}^{\pm})^* \tilde{P}^{\pm}] - \frac{n_{e,h}}{\tau_{nr}} - B(n_e, n_h), \quad (7.7)$$

dabei wurden verschiedene Verlustterme, ein Diffusionsterm und ein Pumpterme hinzugenommen.

Außerdem müssen in der Differentialgleichung für das optische Feld Effekte wie interne Verluste und spontane Emission berücksichtigt werden. Zu diesem Zweck wird die zeitliche Änderung der Energiedichte des Feldes betrachtet. Dazu wird noch das magnetische Feld benötigt, dieses lautet näherungsweise

$$-\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}^{\pm} \approx i\omega_0 \mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{E}^{\pm} \approx \pm i\beta_0 \frac{1}{e} \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y) \mathbf{Z}(z) e^{\pm i\beta_0 y} \mathbf{e}_z.$$

Die Energiedichte des optischen Feldes lautet [96]

$$\begin{aligned} w^{\pm} &= \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_0 \left(\epsilon_r |\mathbf{E}^{\pm}|^2 + \frac{1}{\epsilon_0} \mu_0 |\mathbf{B}^{\pm}|^2 \right) \\ &\approx \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0}{e^2} |Z(z)|^2 |\Phi^{\pm}|^2 \left[n_{\text{eff}}^2 + c^2 \frac{\beta_0^2}{\omega_0^2} \right] \\ &= \frac{\epsilon_0}{e^2} |Z(z)|^2 |\Phi^{\pm}|^2 n_{\text{eff}}^2. \end{aligned}$$

Die zeitliche Änderung der Energiedichte in der Nähe des Quantenfilms lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} E^{\pm} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\text{QW}} dz w^{\pm} \approx \Gamma \frac{\epsilon_0}{e^2} n_{\text{eff}}^2 \frac{\partial}{\partial t} |\Phi^{\pm}|^2.$$

Die zeitliche Änderung der Ladungsträgerenergie durch spontane Emission entspricht näherungsweise

$$\left. \frac{d}{dt} E^{\text{QW}} \right|_{\text{SE}} \approx -B(n_e, n_h) \hbar \omega_0.$$

Unter der Annahme, dass davon ein Anteil β in das optische Feld übergeht, folgt der Beitrag der spontanen Emission zur zeitlichen Änderung des Betragsquadrates des optischen Feldes:

$$\left. \frac{d}{dt} |\Phi^{\pm}|^2 \right|_{\text{SE}} = \frac{\beta \hbar \omega_0 e^2}{\Gamma \epsilon_0 n_{\text{eff}}^2} B(n_e, n_h).$$

Die Änderung des komplexen Feldes ist dadurch nicht eindeutig definiert, da der Einfluss auf die Phase des Feldes in der obigen Gleichung nicht enthalten ist. Eine Möglichkeit für die Änderung des komplexen Feldes lautet

$$\frac{d}{dt} \Phi^\pm \Big|_{SE} = \frac{d}{dt} |\Phi^\pm|^2 \Big|_{SE} \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Phi}^\pm}{|\tilde{\Phi}^\pm|^2} e^{i\phi_0}, \quad (7.8)$$

mit beliebiger Phase ϕ_0 . Bei der Laserdynamik ist die spontane Emission vor allem beim Anschaltprozess wichtig und spielt in der Modendynamik nur noch eine untergeordnete Rolle. Daher wird im Folgenden $\phi_0 = 0$ angenommen. Zusammen mit den internen Verlusten α_{int} folgt die Gleichung

$$\frac{n_{\text{gr}}}{c} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^\pm \pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^\pm - \frac{i}{2\beta_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Phi}^\pm = \frac{i\beta_0\Gamma}{2n_{\text{eff}}^2} \tilde{P}^\pm - \frac{\alpha_{\text{int}}}{2} \tilde{\Phi}^\pm + \frac{\beta\hbar\omega_0 e^2}{\Gamma\epsilon_0 n_{\text{eff}}^2} B(n_e, n_h) \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Phi}^\pm}{|\tilde{\Phi}^\pm|^2}. \quad (7.9)$$

Bisher wurde der Einfluss der Spiegel noch nicht diskutiert. Im Traveling-Wave-Modell koppeln sie die Komponenten $\tilde{\Phi}^+$ und $\tilde{\Phi}^-$ an den Rändern miteinander, da die Wellen an den Spiegeln teilweise in entgegengesetzte Richtung reflektiert werden. Damit lauten die Randbedingungen

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}^+(y=0) &= r_1 \tilde{\Phi}^-(y=0) \\ \tilde{\Phi}^-(y=L) &= r_2 \tilde{\Phi}^+(y=L). \end{aligned} \quad (7.10)$$

Die Betragquadrate der Faktoren r_1 und r_2 sind die Reflektivitäten der beiden Spiegel:

$$R_1 = |r_1|^2 \quad \text{und} \quad R_2 = |r_2|^2.$$

Im Folgenden sind die Reflektivitäten Parameter der Simulation und die Faktoren r_1 und r_2 sind reell:

$$r_1 = \sqrt{R_1} \quad \text{und} \quad r_2 = \sqrt{R_2}.$$

Wichtig bei der Diskussion von Laserdioden ist die Ausgangsleistung. Diese entspricht der Energie des Lichts, welches die Diode auf einer Seite des Resonators in einem Zeitintervall verlässt. Um diesen Energiefluss zu bestimmen, wird zunächst der Poynting-Vektor benötigt [96]:

$$\mathbf{S}^\pm = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}^* \times \mathbf{B} \approx \pm \mathbf{e}_y = \pm \mathbf{e}_y \frac{c^2 \beta_0}{\omega_0} \frac{\epsilon_0}{e^2} |\tilde{\Phi}^\pm(x, y)|^2 |Z(z)|^2 = \pm \mathbf{e}_y c n_{\text{eff}} \frac{\epsilon_0}{e^2} |\tilde{\Phi}^\pm(x, y)|^2 |Z(z)|^2.$$

Die zeitabhängige Ausgangsleistung entspricht dem Integral des Poynting-Vektors über die Grenzfläche zu einer Zeit t , multipliziert mit der Transmittivität des entsprechenden Spiegels. Für den Spiegel bei $y = L$ folgt:

$$P(t) = (1 - R_2) \int dx \int dz \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{S}^+(x, y = L, z, t) = (1 - R_2) c n_{\text{eff}} \frac{\epsilon_0}{e^2} \int dx |\tilde{\Phi}^+(x, y = L, t)|^2.$$

7.3 Numerische Implementierung

Aufgrund des Aufbaus der Traveling-Wave-Gleichungen ist eine numerische Lösung mithilfe von Standard-Methoden wie beispielsweise der Methode der finiten Elemente schwierig. Es gibt allerdings spezielle Methoden, die auf dieses Problem zugeschnitten sind. Eine davon ist in Ref. [131] beschrieben; diese wird im Folgenden verwendet und hier kurz erläutert. Die x -Abhängigkeit wird zunächst vernachlässigt, sodass alle Größen nur von der y -Koordinate abhängen. Außerdem wird angenommen, dass Elektron- und Lochdichte gleich sind: $n_e = n_h = n$. Das Hauptproblem in den Differentialgleichungen sind hier die Ableitungen

$$\frac{n_{\text{gr}}}{c} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^\pm \pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^\pm = \frac{1}{v_{\text{gr}}} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^\pm \pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^\pm.$$

Dabei kommen nur einfache Ableitungen vor, was zusammen mit den Randbedingungen aus Gl. (7.10) eine Diskretisierung in y - und t -Richtung erschwert. Daher wird zunächst die Koordinaten-Transformation

$$\tilde{t}_{\pm} = t \pm \frac{y}{v_{gr}}$$

durchgeführt. Für die Ableitungen folgt

$$\frac{n_{gr}}{c} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^{\pm} \pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^{\pm} = \frac{2}{v_{gr}} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}_{\pm}} \tilde{\Phi}^{\pm}.$$

Diese Ableitungen können nun mit finiten Differenzen angenähert werden. Dazu muss zunächst das numerische Gitter angegeben werden. Hier werden jeweils äquidistante Gitter in y - und in t -Richtung verwendet. Die y -Punkte werden mit i nummeriert und der Abstand benachbarter Punkte ist Δy . Für die t -Punkte ist der Abstand Δt und die Nummerierung erfolgt mit j . Das Feld auf diesen Punkten wird mit $\tilde{\Phi}_{i,j}^{\pm} = \tilde{\Phi}^{\pm}(i\Delta y, j\Delta t)$ bezeichnet. Um die Ableitung mit finiten Differenzen näherungsweise zu berechnen, ist es auch wichtig, dass

$$\Delta t = \frac{\Delta y}{v_{gr}}$$

gilt. Die Näherung für die Ableitung in der Mitte einer Gitterzelle lautet

$$\begin{aligned} \frac{2}{v_{gr}} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}_{+}} \tilde{\Phi}_{i+0.5,j+0.5}^{+} &\approx \frac{1}{v_{gr}\Delta t} \left(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^{+} - \tilde{\Phi}_{i,j}^{+} \right), \\ \frac{2}{v_{gr}} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}_{-}} \tilde{\Phi}_{i+0.5,j+0.5}^{-} &\approx \frac{1}{v_{gr}\Delta t} \left(\tilde{\Phi}_{i,j+1}^{-} - \tilde{\Phi}_{i+1,j}^{-} \right), \end{aligned}$$

siehe auch Abb. 7.3. Die Polarisierungen und Ladungsträgerdichten werden an unterschiedlichen Punkten gespeichert, wie in Abb. 7.3 gezeigt. So gilt

$$n_{i,j} = n((i+0.5)\Delta y, (j+0.5)\Delta t) \quad \text{und} \quad \bar{P}_{i,j}^{\pm} = \bar{P}^{\pm}((i+0.5)\Delta y, j\Delta t).$$

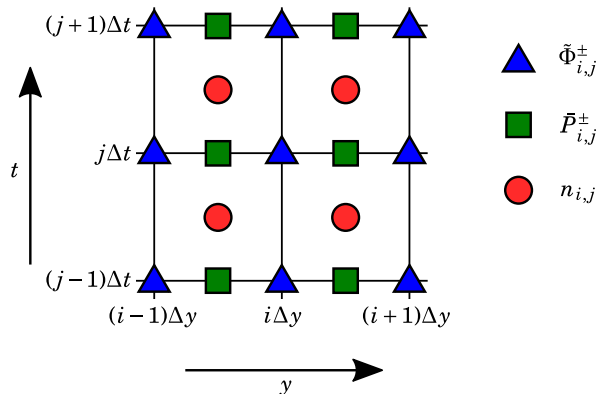


Abbildung 7.3: Verwendete Diskretisierung der Traveling-Wave-Gleichungen, siehe auch Ref. [131]

Auf der rechten Seite von Gl. (7.9) muss zum Beispiel die Polarisation in der Mitte einer Zelle ausgewertet werden. Dies wird hier durch eine Mittelung gewährleistet:

$$\bar{P}_{i,j+0.5}^{\pm} \approx \frac{1}{2} \left(\bar{P}_{i,j+1}^{\pm} + \bar{P}_{i,j}^{\pm} \right).$$

Ähnlich muss auch das Feld gemittelt werden, hier allerdings in \tilde{t}_{\pm} -Richtung:

$$\tilde{\Phi}_{i+0.5,j+0.5}^{+} \approx \frac{1}{2} \left(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^{+} + \tilde{\Phi}_{i,j}^{+} \right), \quad \tilde{\Phi}_{i+0.5,j+0.5}^{-} \approx \frac{1}{2} \left(\tilde{\Phi}_{i,j+1}^{-} + \tilde{\Phi}_{i+1,j}^{-} \right).$$

Die Anwendung dieser Näherungen liefert für das Feld

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_{\text{gr}}\Delta t} \left(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^+ - \tilde{\Phi}_{i,j}^+ \right) &= \frac{i\beta_0\Gamma}{4n_{\text{eff}}^2} \left(\bar{P}_{i,j+1}^+ + \bar{P}_{i,j}^+ \right) \\ &\quad - \frac{\alpha_{\text{int}}}{4} \left(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^+ + \tilde{\Phi}_{i,j}^+ \right) + \frac{\beta\hbar\omega_0 e^2}{\Gamma\epsilon_0 n_{\text{eff}}^2} B(n_{i,j}) \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Phi}_{i,j}^+}{|\tilde{\Phi}_{i,j}^+|^2}, \\ \frac{1}{v_{\text{gr}}\Delta t} \left(\tilde{\Phi}_{i,j+1}^- - \tilde{\Phi}_{i+1,j}^- \right) &= \frac{i\beta_0\Gamma}{4n_{\text{eff}}^2} \left(\bar{P}_{i,j+1}^- + \bar{P}_{i,j}^- \right) \\ &\quad - \frac{\alpha_{\text{int}}}{4} \left(\tilde{\Phi}_{i,j+1}^- + \tilde{\Phi}_{i+1,j}^- \right) + \frac{\beta\hbar\omega_0 e^2}{\Gamma\epsilon_0 n_{\text{eff}}^2} B(n_{i,j}) \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Phi}_{i+1,j}^-}{|\tilde{\Phi}_{i+1,j}^-|^2}. \end{aligned}$$

Zusammen mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{0,j+1}^+ &= r_1 \tilde{\Phi}_{0,j+1}^-, \\ \tilde{\Phi}_{N,j+1}^- &= r_2 \tilde{\Phi}_{N,j+1}^+ \end{aligned}$$

kann das Feld nach einem Zeitschritt bestimmt werden. Dabei bezeichnet N die Anzahl der Stützstellen in y -Richtung. Es werden natürlich noch entsprechende Gleichungen für die Ladungsträgerdichte und die Polarisierungen benötigt. Bei der Ladungsträgerdichte wird die Diffusion zunächst vernachlässigt und eine Annäherung der zeitlichen Ableitung in Gl. (7.7) ergibt:

$$\frac{1}{\Delta t} (n_{i,j+1} - n_{i,j}) \approx \frac{\eta_{\text{inj}} j}{e} + \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{\epsilon_0}{e^2} \sum_{\pm} \text{Im} \left[\left(\tilde{\Phi}_{i+0.5,j+1}^{\pm} \right)^* \bar{P}_{i,j+1}^{\pm} \right] - \frac{n_{i,j+0.5}}{\tau_{\text{nr}}} - B(n_{i,j+0.5}). \quad (7.11)$$

Das Feld muss hierbei in y -Richtung gemittelt werden:

$$\tilde{\Phi}_{i+0.5,j+1}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(\tilde{\Phi}_{i,j+1}^{\pm} + \tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^{\pm} \right).$$

Eine weitere Mittelung ist hier bei der Ladungsträgerdichte notwendig, diese lautet

$$n_{i,j+0.5} = \frac{1}{2} (n_{i,j+1} + n_{i,j})$$

Diese Mittelung ist auch bei den Verlusten durch spontane Emission nötig, was zu einer nichtlinearen Gleichung für $n_{i,j+1}$ führen würde. Da dieser Term in der Laserdynamik keinen großen Einfluss auf die Modendynamik hat, wird er hier durch eine Funktion

$$B(n) \approx bn^{1.5} \quad (7.12)$$

dargestellt, siehe auch Abb. 3.8. Die Bestimmung des Parameters b erfolgt durch eine Kurvenanpassung, ein Beispiel ist in Abb. 7.4 gezeigt. Um wieder eine lineare Gleichung zu erhalten, wird der Term linearisiert:

$$B(n_{i,j+0.5}) \approx b n_{i,j}^{1.5} + 1.5b n_{i,j}^{0.5} \frac{n_{i,j+1} - n_{i,j}}{2} = 0.25b n_{i,j}^{1.5} + 0.75b n_{i,j+1} n_{i,j}^{0.5}.$$

Nun wird noch eine Gleichung für die Polarisation benötigt. Eine erste Möglichkeit ist hier wieder die Annäherung der Ableitung durch finite Differenzen. In der Simulation würde dies allerdings zu sehr kleinen Zeitschritten führen, da die Oszillationen der Polarisation korrekt abgebildet werden müssen. Weil bei der hier vorgestellten Methode die örtliche Auflösung mit der zeitlichen Auflösung zusammenhängt, müsste auch die örtliche Auflösung immer entsprechend angepasst werden, was zu einer starken Erhöhung der Rechenzeit führen würde. Eine bessere Möglichkeit ist eine Annäherung des Integrals, welches aus Gl. (7.5) folgt:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \gamma + i\Delta\omega \right] \bar{P}^{\pm} &= \gamma\chi^1 \tilde{\Phi}^{\pm} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{t(\gamma+i\Delta\omega)} \bar{P}^{\pm} \right) &= e^{t(\gamma+i\Delta\omega)} \gamma\chi^1 \tilde{\Phi}^{\pm} \\ \Rightarrow e^{(t_j+\Delta t)(\gamma+i\Delta\omega)} \bar{P}_{i,j+1}^{\pm} - e^{t_j(\gamma+i\Delta\omega)} \bar{P}_{i,j}^{\pm} &= \int_{t_j}^{t_j+\Delta t} dt \gamma\chi^1 \tilde{\Phi}^{\pm}(y_i + 0.5\Delta y, t) e^{t(\gamma+i\Delta\omega)} \\ &\approx \frac{\gamma\chi^1}{\gamma + i\Delta\omega} \tilde{\Phi}_{i+0.5,j+0.5}^{\pm} \left[e^{(t_j+\Delta t)(\gamma+i\Delta\omega)} - e^{t_j(\gamma+i\Delta\omega)} \right] \end{aligned}$$

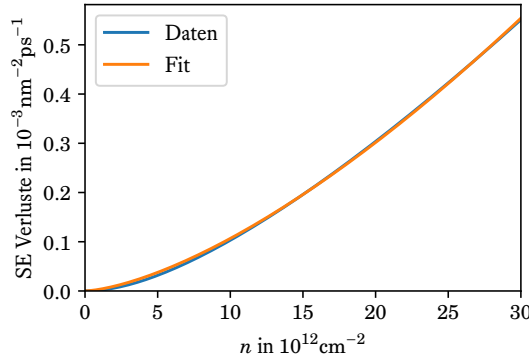


Abbildung 7.4: Kurvenanpassung für die Verluste durch spontane Emission mit der Funktion aus Gl. (7.12). Die Daten wurden für eine $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur mit Gl. (3.38) und den Parametern aus Tabelle 9.18 im Anhang bestimmt.

Mit $\tilde{\gamma} = \gamma + i\Delta\omega$ lautet das Endergebnis

$$\begin{aligned}\bar{P}_{i,j+1}^+ &= e^{-\Delta t \tilde{\gamma}} \bar{P}_{i,j}^+ + \frac{\gamma \chi^1}{2\tilde{\gamma}} \left(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^+ + \tilde{\Phi}_{i,j}^+ \right) [1 - e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}], \\ \bar{P}_{i,j+1}^- &= e^{-\Delta t \tilde{\gamma}} \bar{P}_{i,j}^- + \frac{\gamma \chi^1}{2\tilde{\gamma}} \left(\tilde{\Phi}_{i,j+1}^- + \tilde{\Phi}_{i+1,j}^- \right) [1 - e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}].\end{aligned}\quad (7.13)$$

Das letzte Problem ist die Tatsache, dass zum Beispiel $\bar{P}_{i,j+1}^+$ von $\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^+$ abhängt und in der Gleichung für $\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^+$ wieder $\bar{P}_{i,j+1}^+$ vorkommt. Die Gleichungen stellen daher ein lineares Gleichungssystem dar, welches in jedem Zeitschritt gelöst werden muss. Mit den hier gemachten Annahmen, wie die Vernachlässigung der x -Abhängigkeit, lässt sich die Gleichung für die Polarisation in die Gleichung des Feldes einsetzen und für die Suszeptibilität aus Gl. (7.6) folgt:

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{v_{\text{gr}} \Delta t} + \frac{\alpha_{\text{int}}}{4} - \frac{i\beta_0 \Gamma \chi_0}{4n_{\text{eff}}^2} - \frac{i\beta_0 \Gamma \gamma \chi^1}{8n_{\text{eff}}^2 \tilde{\gamma}} (1 - e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}) \right] \tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^+ &= \\ \left[\frac{1}{v_{\text{gr}} \Delta t} - \frac{\alpha_{\text{int}}}{4} + \frac{i\beta_0 \Gamma \chi_0}{4n_{\text{eff}}^2} + \frac{i\beta_0 \Gamma \gamma \chi^1}{8n_{\text{eff}}^2 \tilde{\gamma}} (1 - e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}) \right] \tilde{\Phi}_{i,j}^+ &+ \\ + \frac{i\beta_0 \Gamma}{4n_{\text{eff}}^2} \bar{P}_{i,j}^+ (1 + e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}) + \frac{\beta \hbar \omega_0 e^2}{\Gamma \epsilon_0 n_{\text{eff}}^2} B(n_{i,j}) \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Phi}_{i,j}^+}{|\tilde{\Phi}_{i,j}^+|^2}, & \\ \left[\frac{1}{v_{\text{gr}} \Delta t} + \frac{\alpha_{\text{int}}}{4} - \frac{i\beta_0 \Gamma \chi_0}{4n_{\text{eff}}^2} - \frac{i\beta_0 \Gamma \gamma \chi^1}{8n_{\text{eff}}^2 \tilde{\gamma}} (1 - e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}) \right] \tilde{\Phi}_{i,j+1}^- &= \\ \left[\frac{1}{v_{\text{gr}} \Delta t} - \frac{\alpha_{\text{int}}}{4} + \frac{i\beta_0 \Gamma \chi_0}{4n_{\text{eff}}^2} + \frac{i\beta_0 \Gamma \gamma \chi^1}{8n_{\text{eff}}^2 \tilde{\gamma}} (1 - e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}) \right] \tilde{\Phi}_{i+1,j}^- &+ \\ + \frac{i\beta_0 \Gamma}{4n_{\text{eff}}^2} \bar{P}_{i,j}^- (1 + e^{-\Delta t \tilde{\gamma}}) + \frac{\beta \hbar \omega_0 e^2}{\Gamma \epsilon_0 n_{\text{eff}}^2} B(n_{i,j}) \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Phi}_{i+1,j}^-}{|\tilde{\Phi}_{i+1,j}^-|^2}, &\end{aligned}$$

Anschließend kann die neue Polarisation über Gl. (7.13) berechnet werden. Am Ende eines Zeitschritts muss noch die neue Ladungsträgerdichte bestimmt werden, für die Suszeptibilität aus Gl. (7.6) folgt aus Gl. (7.11)

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{2\tau_{\text{nr}}} + 0.75b n_{i,j}^{0.5} \right] n_{i,j+1} &= \left[\frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{2\tau_{\text{nr}}} \right] n_{i,j} - 0.25b n_{i,j}^{1.5} + \frac{\eta_{\text{inj}} j}{e} \\ + \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{\epsilon_0}{2e^2} \sum_{\pm} \text{Im} \left[\left(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^{\pm} + \tilde{\Phi}_{i,j+1}^{\pm} \right)^* \bar{P}_{i,j+1}^{\pm} + \frac{\chi_0}{2} \left| \tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^{\pm} + \tilde{\Phi}_{i,j+1}^{\pm} \right|^2 \right].\end{aligned}$$

Nun bleibt noch die Frage nach den Anfangsbedingungen. Es ist naheliegend, alle Größen zur Zeit $t = 0$ auf Null zu setzen, wie dies in den vorherigen Simulation immer der Fall war. Allerdings ist dies nicht möglich für

das elektrische Feld, siehe Gl. (7.9). So wird bei der spontanen Emission die Phase des Feldes benötigt und für ein verschwindendes Feld gibt es auch keine stimulierte Emission. In diesem Sinne wird das elektrische Feld in den folgenden Simulationen zur Zeit $t = 0$ auf einen kleinen reellen Wert gesetzt:

$$\tilde{\Phi}^{\pm}(\mathbf{r}, t = 0) = \tilde{\Phi}_0.$$

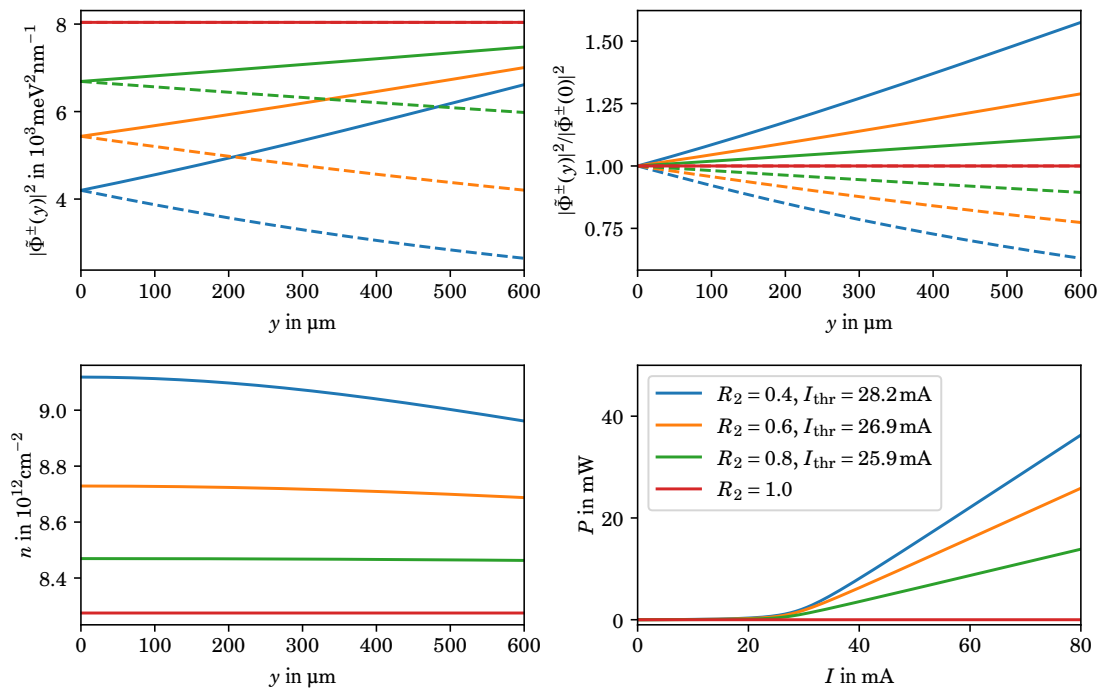
Der genaue Einfluss der Anfangsbedingungen wird in Kapitel (7.6) genauer diskutiert.

7.4 Ortsabhängigkeit des Feldes

Zunächst sollen typische Simulationsergebnisse an einem einfachen Beispiel gezeigt werden. Dazu wird zunächst für eine $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur die entsprechenden Parameter der Suszeptibilität aus Gl. (7.6) durch Kurvenanpassung bestimmt. Die Kurvenanpassung ist in Abb. 7.2 gezeigt. Die Anpassung der Verluste durch spontane Emission ist in Abb. 7.4 dargestellt. Die gesamten Parameter sind in Tabelle 9.18 im Anhang gegeben.

Es werden zunächst die Realteile von χ_0 und χ_1 vernachlässigt, damit sich nach kurzer Zeit ein Gleichgewichtszustand einstellt. Der Einfluss der Realteile wird im nächsten Unterkapitel genauer diskutiert. Den größten Einfluss auf die Ortsabhängigkeit haben die Reflektivitäten der beiden Spiegel, daher sind in Abb. 7.5 Simulationsergebnisse dargestellt, wo diese Parameter variiert wurden. Untersucht wurden hier zwei Fälle: Einmal wurde nur die Reflektivität des rechten Spiegel variiert und einmal wurden beide Reflektivitäten gleichzeitig verändert. Hier ist bei kleineren Reflektivitäten gut zu sehen, wie das Feld an den Rändern reflektiert wird. Eine Verringerung der Reflektivität führt in beiden Fällen außerdem zu einer Verringerung des Feldes und einer Erhöhung der Ladungsträgerdichten. Dies liegt an den größeren Photonverlusten, wodurch auch eine größere optische Verstärkung benötigt wird, um diese zu kompensieren. Eine Verringerung der Reflektivität für den Spiegel auf der rechten Seite führt außerdem einer größeren Steigung in der Kennlinie, allerdings werden auch die Schwellstromstärken größer. In den vorherigen Kapiteln wurde immer angenommen, dass sich die Ladungsträgerdichten in y -Richtung nicht ändern. Dies ist bei größeren Reflektivitäten näherungsweise gut erfüllt, allerdings gibt es bei kleineren Reflektivitäten wie zum Beispiel 0.4 größere Abweichungen. Auch gezeigt sind die Kennlinien, hier ist bei kleineren Reflektivitäten die Leistung überhalb des Schwellstroms größer, aufgrund der großen Photonverluste ist dafür aber der Schwellstrom auch leicht erhöht. Wie erwartet sind bei Reflektivitäten von 1 alle Größen ortsunabhängig und es gibt keine Ausgangsleistung, da das gesamte Licht reflektiert wird.

Änderung der Spiegel-Reflektivität auf einer Seite (rechts)



Änderung der Spiegel-Reflektivitäten auf beiden Seiten

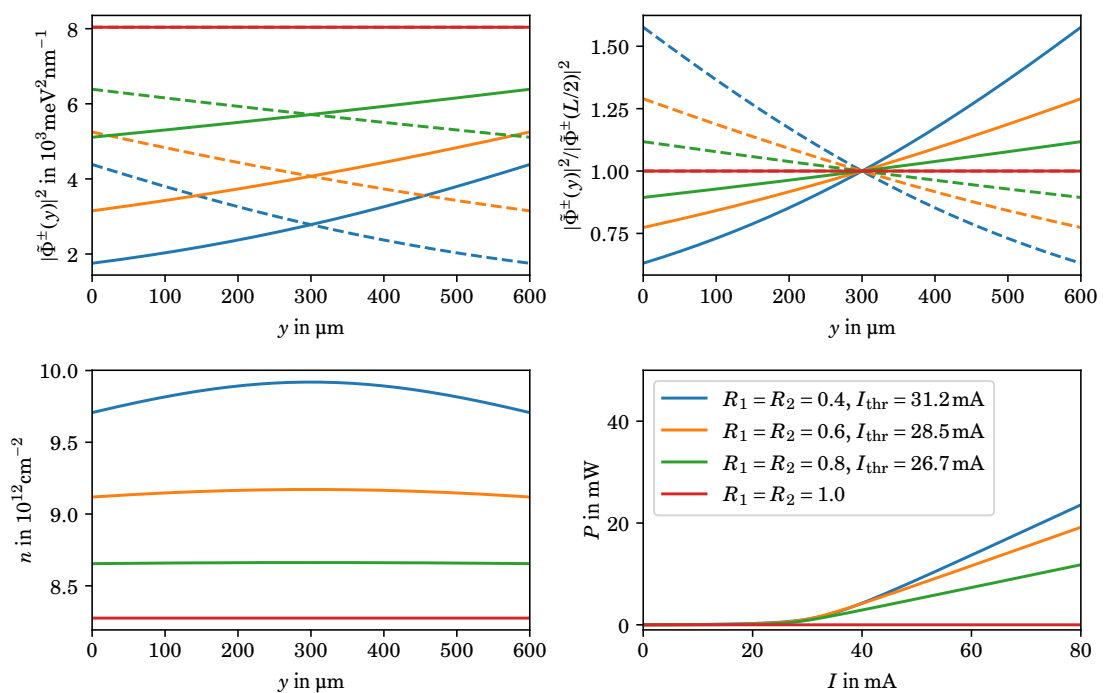


Abbildung 7.5: Simulationsergebnisse mit den Parametern aus Tabelle 9.18 und einer Stromstärke von 100 mA. Hier wurde der Realteil von χ_0 und χ_1 nicht berücksichtigt, damit sich nach kurzer Simulationsdauer ein Gleichgewichtszustand einstellt. Gezeigt sind hier neben den Kennlinien die Ortsabhängigkeit des optischen Feldes und der Ladungsträgerdichten. Beim Feld stellen die durchgezogenen Linien die $+$ -Komponenten und die gestrichelten Linien die $-$ -Komponenten dar. In den oberen vier Bildern wurde die Spiegelreflektivität auf der rechten Seite variiert und in den unteren vier Bildern auf beiden Seiten. Die Schwellstromstärken I_{thr} wurden mithilfe einer linearen Kurvenanpassung bestimmt.

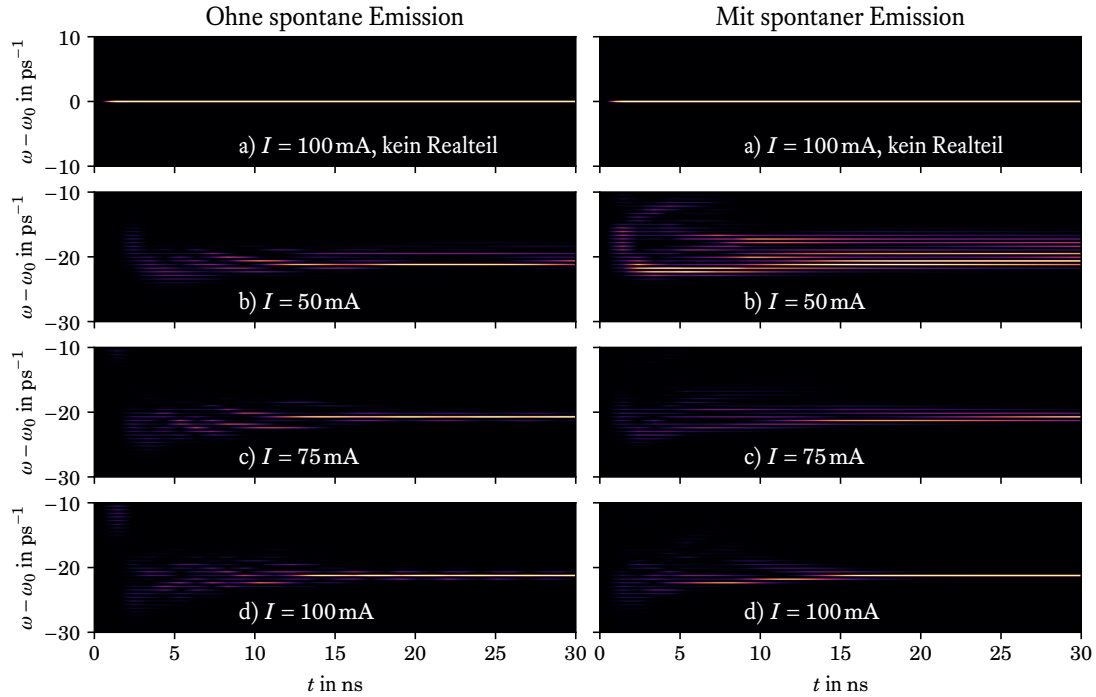


Abbildung 7.6: Modendynamik für verschiedene Stromstärken mit den Parametern aus Tabelle 9.18. In a) wurde der Realteil von χ_0 und χ_1 nicht berücksichtigt. In der linken Spalte wurde der Term der spontane Emission aus Gl. (7.8) vernachlässigt.

7.5 Modendynamik

Für das Beispiel aus dem letzten Unterkapitel soll nun die Modendynamik untersucht werden. Eine erste Schwierigkeit ist die Aufschlüsselung des Feldes nach den einzelnen longitudinalen Moden, da im Traveling-Wave-Modell nur das Feld vor dem rechten Spiegel $\tilde{\Phi}(y = L, t)$ bekannt. Eine Möglichkeit ist eine Fourier-Transformation in der Zeit:

$$I(\omega, t) = \left| \int dt' e^{i\omega t'} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(t-t')^2}{2\sigma^2}} \tilde{\Phi}(y = L, t') \right|^2.$$

Hier wird eine Gauss-Funktion benutzt, um die Fourier-Transformation nur in der Nähe von t durchzuführen und so die zeitliche Dynamik betrachten zu können. Die Verbreiterung σ muss so gewählt werden, dass sowohl die zeitliche als auch die spektrale Auflösung gut genug sind. Im Folgenden wird hierfür der Wert 10 ps verwendet. In Abb. 7.6 ist die Modendynamik für verschiedene Stromstärken gezeigt, außerdem wird der Einfluss des Terms, welcher die Beiträge der spontanen Emission beschreibt, dargestellt. Dabei wird in einer Spalte der Beitrag aus Gl. (7.8) berücksichtigt und einmal vernachlässigt.

In Abb. 7.6 a) wurde wie im vorherigen Kapitel nur der Imaginärteil von χ_0 und χ_1 berücksichtigt. In diesem Fall ist das Feld nach wenigen Nanosekunden zeitlich konstant und nur die Mode am Maximum der optischen Verstärkung ist aktiv. In Abb. 7.6 b) bis Abb. 7.6 d) ist die Modendynamik für verschiedene Stromstärken dargestellt und der Realteil von χ_0 und χ_1 wurde auch berücksichtigt. In diesem Fall ist die Modendynamik komplizierter und es ist gut möglich, die einzelnen longitudinalen Moden zu unterscheiden. Der Frequenzabstand der verschiedenen Moden entspricht hier dem erwarteten Wert von $\Delta\omega = \pi c / (Ln_{gr}) \approx 0.56 \text{ ps}^{-1}$. Bei einer Stromstärke $I = 50 \text{ mA}$ und ohne spontane Emission ist die Modendynamik ähnlich zu der in Abb. 4.11 c) aus Kapitel 4. Dabei lässt sich beobachten, wie sich die aktive Mode von größeren Frequenzen zu kleineren Frequenzen bewegt. Bei höheren Stromstärken ist dieser Effekt aber nicht mehr so leicht zu erkennen.

Wird außerdem die spontane Emission berücksichtigt, ist selbst bei kleineren Stromstärken kein Modenrollen sichtbar. Dies deutet daraufhin, dass die einfache Näherung aus Gl. (7.8) zur Beschreibung der Modendynamik nicht ausreicht. Allerdings ist es schwierig, eine bessere Alternative zu finden, da in der

Traveling-Wave-Methode das Feld klassisch beschrieben wird. Daher scheint es hier zunächst sinnvoller zu sein, die spontane Emission zu vernachlässigen und mit einem sehr kleinen Feld zur Zeit $t = 0$ zu starten.

In allen Fällen stellt sich nach ungefähr 20 ns ein Gleichgewichtszustand ein, bei dem nur eine longitudinale Mode aktiv ist. Dies stimmt qualitativ nicht mit den Simulationen der letzten Kapitel oder experimentellen Beobachtungen überein. Ein Grund hierfür könnte sein, dass bei der Traveling-Wave-Methode nur die Dynamik der Dichte betrachtet wird und nicht die Dynamik der Besetzungsfunktionen. Dementsprechend fehlt hier ein symmetrischer Modenkopplungsterm, wie das auch schon in Kapitel 4 diskutiert wurde. Um daher eine Modendynamik zu erhalten, welche experimentellen Ergebnissen ähnlich sieht, müsste dieser symmetrische Modenkopplungsterm auch berücksichtigt werden, dies wird in den nächsten Unterkapiteln genauer diskutiert.

Interessant ist auch die Ortsabhängigkeit der verschiedenen Größen, diese ist in Abb. 7.7 gezeigt. Hier kann beobachtet werden, dass sich kein Gleichgewicht einstellt, stattdessen gibt es beim optischen Feld Wellenpakete welche sich in der Laserdiode zwischen den Spiegeln bewegen. Die Ladungsträgerdichte reagiert auf diese Wellenpakete und zeigt dementsprechend auch kleinere zeitliche Abweichungen von einer größeren zeitunabhängigen Ladungsträgerdichte. Die Periode dieser kleinen zeitlichen Abweichungen ist durch die Zeit gegeben, welche die Wellenpakete benötigen, um die Länge des Resonators zweimal zurückzulegen, jeweils einmal in $+y$ - und einmal in $-y$ -Richtung. In Abb. 7.8 ist das Verhalten dieser Abweichungen in einem kleinen Zeitfenster dargestellt. Wie oben schon diskutiert, liegt die Periode bei $T = \frac{2L}{v_{gr}} = 11.2 \text{ ps} = \frac{2\pi}{\Delta\omega}$ und hängt mit dem Frequenzabstand $\Delta\omega$ der longitudinalen Moden zusammen. In Abb. 4.13 in Kapitel 4 wurden die Abweichungen der Ladungsträgerdichte mit einer anderen Methode untersucht und sie zeigen ein ähnliches Verhalten.

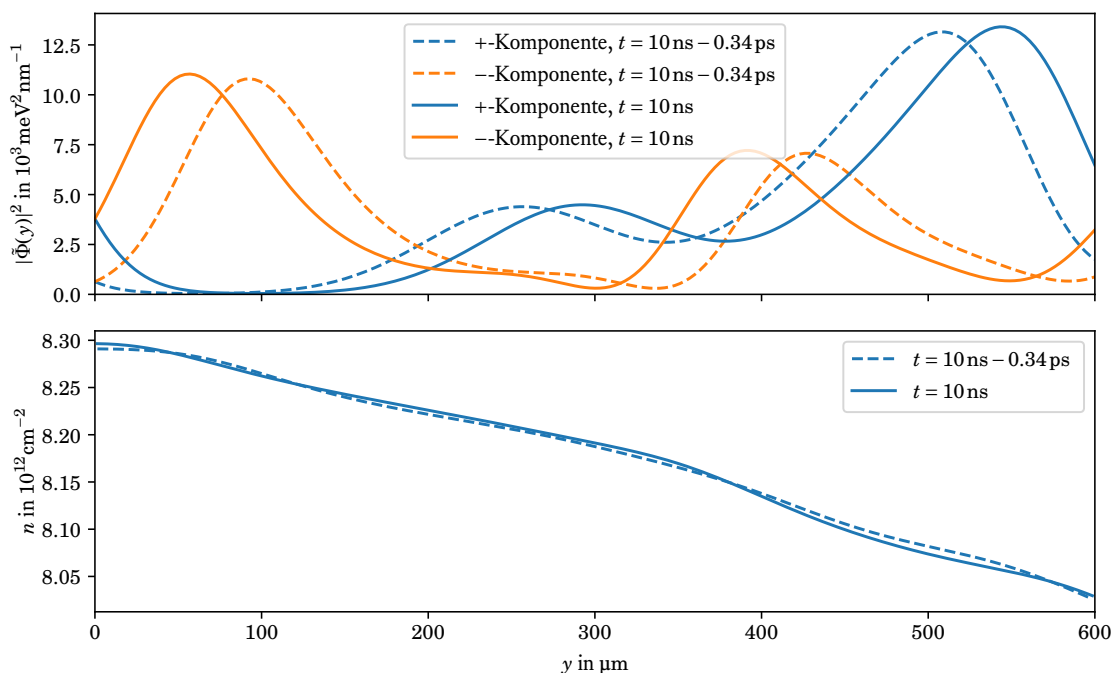


Abbildung 7.7: Ortsabhängigkeit des Feldes und der Ladungsträgerdichte bei einer Stromstärke von 100 mA für zwei verschiedenen Zeiten und ohne Berücksichtigung der spontanen Emission.

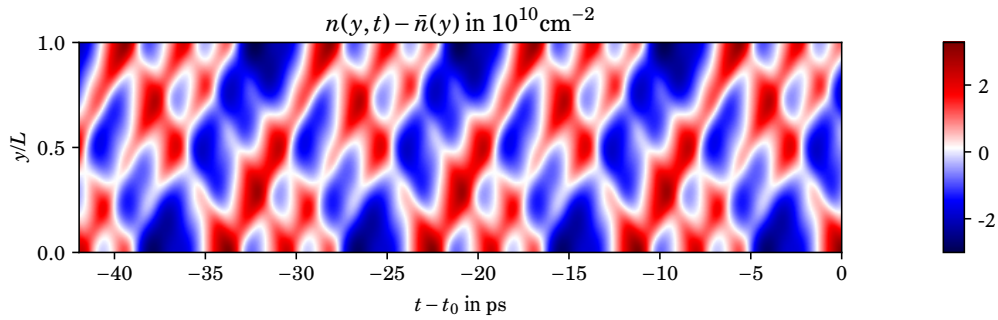


Abbildung 7.8: Abweichungen der Ladungsträgerdichte von ihrem zeitlichen Mittelwert für eine Stromstärke von 100 mA in der Nähe von $t_0 = 10$ ns unter Vernachlässigung der spontanen Emission.

7.6 Einfluss der Anfangsbedingungen

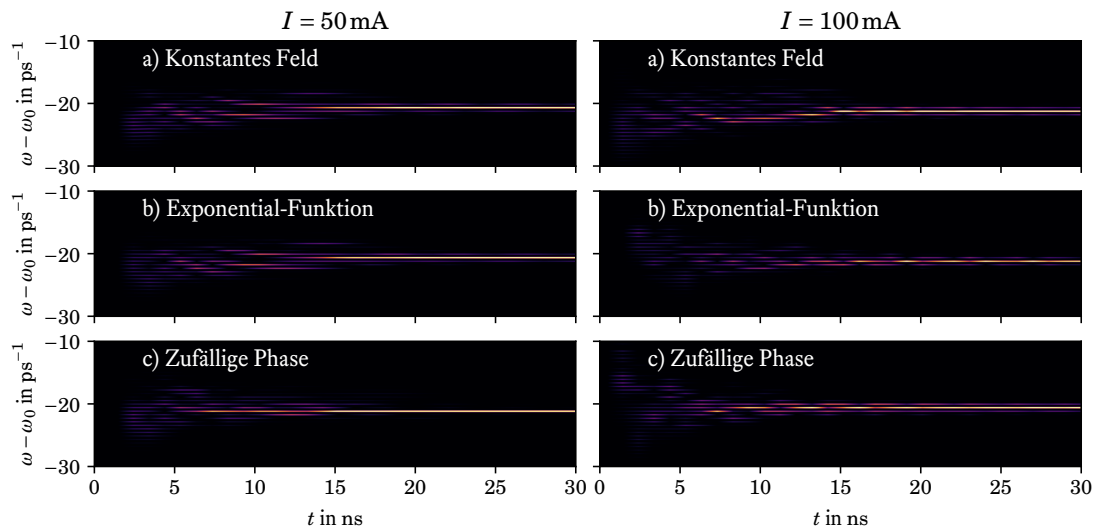


Abbildung 7.9: Modendynamik des Traveling-Wave-Modells für zwei verschiedene Stromstärken und verschiedene Anfangsbedingungen für das optische Feld mit den Parametern aus Tabelle 9.18 im Anhang.

Bevor das Modell erweitert wird, um den Einfluss einer symmetrischen Modenwechselwirkung zu berücksichtigen, soll zunächst untersucht werden, wie sich die Anfangsbedingungen des optischen Feldes auf die Modendynamik auswirken. In den Simulationen des vorherigen Unterkapitels wurde dazu das optische Feld zur Zeit $t = 0$ auf eine reelle Konstante $\tilde{\Phi}_0$ gesetzt:

$$\tilde{\Phi}^{\pm}(y, t = 0) = \tilde{\Phi}_0.$$

Eine andere Möglichkeit ist ein exponentieller Verlauf, wie er bei konstanter optischer Verstärkung in der Laserdiode auftreten würde. In diesem Fall lautet im Gleichgewicht die Differentialgleichung aus Gl. (7.9) unter Vernachlässigung der x -Abhängigkeit und der spontanen Emission näherungsweise

$$\pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^{\pm}(y) = g \tilde{\Phi}^{\pm}(y),$$

mit einer Konstanten g , welche die Lösung

$$\tilde{\Phi}^{\pm}(y) \propto e^{\pm g y}$$

besitzt. Sollen die Felder zur Zeit $t = 0$ außerdem die Randbedingungen aus Gl. (7.10) erfüllen, dann lauten die Anfangsbedingungen:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}^+(y, t=0) &= \tilde{\Phi}_0 e^{gy}, & \tilde{\Phi}^-(y, t=0) &= \frac{\tilde{\Phi}_0}{r_1} e^{-gy} \\ \text{mit } r_1 r_2 e^{2gL} &= 1 & \Rightarrow & g = -\frac{1}{2L} \ln(r_1 r_2). \end{aligned}$$

Die letzte Möglichkeit, welche hier diskutiert werden soll, ist, den Betrag des Feldes zur Zeit $t = 0$ auf eine Konstante zu setzen, allerdings die Phase für jeden Gitterpunkt y_i zufällig zu wählen:

$$\tilde{\Phi}^\pm(y_i, t=0) = \tilde{\Phi}_0 e^{i\phi_i^\pm} \quad \text{mit } \phi_i^\pm \text{ zufällig und } 0 \leq \phi_i^\pm < 2\pi.$$

In Abb. 7.9 wird die Modendynamik für diese drei verschiedenen Anfangsbedingungen bei zwei verschiedenen Stromstärken miteinander verglichen. Hierbei wurden die gleichen Parameter wie im vorherigen Unterkapitel verwendet. Die Modendynamik ist grundsätzlich in allen drei Fällen sehr ähnlich, sogar bei der Anfangsbedingung mit den zufällig gewählten Phasen sind die Abweichungen nicht allzu groß. Außerdem stellt sich in allen Fällen ein Gleichgewichtszustand ein, wo nur eine longitudinale Mode aktiv ist. Daher erscheint es an dieser Stelle nicht möglich, die qualitativen Abweichungen zu experimentellen Ergebnissen durch eine bestimmte Wahl von Anfangsbedingungen zu beheben.

7.7 Symmetrischer Modenkopplungsterm

Die Modendynamik für das Traveling-Wave-Modell aus dem letzten Kapitel zeigt zwar qualitative Ähnlichkeiten mit experimentellen Ergebnissen, allerdings gibt es auch starke Abweichungen, vor allem für größere Zeiten. Eine Erklärung hierfür könnte die fehlende symmetrische Wechselwirkung zwischen den longitudinalen Moden sein, da nur die Ladungsträgerdichten betrachtet werden und nicht die Besetzungsfunktionen. In diesem Kapitel soll nun versucht werden, einen zusätzlichen symmetrischen Wechselwirkungsterm in die Bewegungsgleichungen einzubauen, wie er in Kapitel 5 für die Photonenzahlen hergeleitet wurde. Dieser hat in der Regel die Form

$$\frac{d}{dt} S_p \Big|_{\text{Symm}} = \sum_{q \neq p} B_{\text{Symm}} S_p S_q.$$

Um diesen Term zu verwenden, müssen zunächst die Photonenzahlen S_p bestimmt werden. Für die Modenfunktionen wird hier der Ansatz von laufenden Wellen verwendet, dabei muss zwischen vorwärts- und rückwärts laufenden Wellen unterschieden werden:

$$\mathbf{u}_p^\pm(\mathbf{r}) = \frac{Z(z)}{\sqrt{\epsilon(z)}} \frac{1}{\sqrt{Lw}} e^{\pm i\beta_0 y + ip \frac{2\pi}{L} y} \mathbf{e}_x.$$

Die Funktion $Z(z)$ ist hier die Gleiche wie in Gl. (7.1). Der Faktor $\sqrt{\epsilon(z)}$ sorgt für die korrekte Normierung:

$$\int_{-w/2}^{w/2} dx \int_0^L dy \int dz \epsilon(z) (\mathbf{u}_p^\pm(\mathbf{r}))^* \mathbf{u}_q^\pm(\mathbf{r}) = \delta_{pq}.$$

Die Modenentwicklung für das elektrische Feld lautet

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\sum_{\pm} \sum_p \sqrt{\frac{2\hbar\omega_p^\pm}{\epsilon_0}} \text{Im} \{ B_p^\pm \mathbf{u}_p^\pm(\mathbf{r}) \} = \sum_p \sum_{\pm} \sqrt{\frac{2\hbar\omega_p^\pm}{\epsilon_0}} \text{Re} \{ i B_p \mathbf{u}_p^\pm(\mathbf{r}) \}.$$

Im eindimensionalen Traveling-Wave-Modell lautet die Entwicklung

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \sum_{\pm} \text{Re} \left\{ \frac{1}{e} \tilde{\Phi}^\pm(y) Z(z) e^{\pm i\beta_0 y} \mathbf{e}_x \right\}.$$

Die Modenkoeffizienten können dementsprechend folgendermaßen berechnet werden:

$$\begin{aligned} i \sqrt{\frac{2\hbar\omega_p^\pm}{\epsilon_0}} B_p^\pm &= \frac{1}{e} \int dz |Z(z)|^2 \sqrt{\epsilon(z)} \int_{-w/2}^{w/2} dx \frac{1}{\sqrt{Lw}} \int_0^L dy \tilde{\Phi}^\pm(y) e^{-ip \frac{2\pi}{L} y} \\ &\approx \frac{\sqrt{Lw}}{e} n_{\text{eff}} \frac{1}{L} \int_0^L dy \tilde{\Phi}^\pm(y) e^{-ip \frac{2\pi}{L} y}. \end{aligned}$$

Die Photonenzahlen lauten hiermit

$$S_p^\pm = L\omega n_{\text{eff}}^2 \frac{\epsilon_0}{2e^2 \hbar \omega_p^\pm} \left| \frac{1}{L} \int_0^L dy \tilde{\Phi}^\pm(y) e^{-ip \frac{2\pi}{L} y} \right|^2.$$

Die zeitliche Änderung der Photonenzahlen aufgrund der effektiven symmetrischen Wechselwirkung folgt aus Gl. (5.7) mit den oben definierten Modenfunktionen. Da der symmetrische Kopplungsterm unter Verwendung einfacher Streuterme nicht sehr stark von der Frequenzdifferenz abhängt, wird der symmetrische Term bei $\Delta\omega = 0$ ausgewertet und hängt nicht mehr von $\Delta\omega$ ab:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_p^\pm \Big|_{\text{Symm}} &\approx \sum_{q \neq p} \frac{S_p^\pm S_q^\pm}{\omega_p^\pm \omega_q^\pm} A_{\text{Symm}} \int_{-w/2}^{w/2} dx \int_0^L dy \left| \mathbf{u}_p^\pm(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right|^2 \left| \mathbf{u}_q^\pm(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}) \right|^2 \\ &\approx \sum_{q \neq p} \frac{S_p^\pm S_q^\pm}{\omega_p^\pm \omega_q^\pm} A_{\text{Symm}} \frac{|Z(z_{\text{QW}})|^4}{L\omega n_{\text{eff}}^4} \approx \sum_{q \neq p} S_p^\pm S_q^\pm \frac{A_{\text{Symm}}}{\omega_0^2} \frac{\Gamma^2}{L\omega n_{\text{eff}}^4} \end{aligned}$$

Dabei wird nur die Wechselwirkung zwischen Moden mit der gleichen Ausbreitungsrichtung berücksichtigt. Zwei Moden mit entgegengesetzten Ausbreitungsrichtungen würden Ladungsträgerdichte-Vibrationen mit der Wellenzahl $2\beta_0$ erzeugen, welche aber durch Diffusion sehr schnell abgebaut werden, siehe die Diskussion in Kapitel 4.8. Die Größe der Wechselwirkung wird durch A_{Symm} bestimmt, hier wird die Definition aus Gl. (5.10) verwendet, ausgewertet bei der Referenzdichte n_0 :

$$\begin{aligned} A_{\text{Symm}}^0 = A_{\text{Symm}}(\Delta\omega = 0) &= - \sum_{\lambda\lambda'} C_\lambda C_{\lambda'} \tau_s (1 + \delta_{\lambda\lambda'}) \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{Im} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1}(\omega_0) \text{Im} \chi_{\mathbf{k}'}^{\lambda', 0}(\omega_0) \\ &\quad + \omega_0^4 \text{Im} \chi(\omega_0) \text{Im} \chi'(\omega_0) \tau_s. \end{aligned}$$

Die Referenzdichte n_0 geht als Parameter in die Simulation ein und im Folgenden wird der Wert verwendet, der zur Berechnung der Daten für die Kurvenanpassung der Suszeptibilität benutzt wurde, siehe Abb. 7.2. Um die Dichteabhängigkeit zu berücksichtigen, wird die Ladungsträgerdichte über den Ort gemittelt und der Wechselwirkungsterm entsprechend skaliert:

$$A_{\text{Symm}} = A_{\text{Symm}}^0 \frac{1}{L} \int_0^L dy \frac{n(y)}{n_0}.$$

Aus der Änderung der Photonenzahl muss die Änderung der Modenkoeffizienten bestimmt werden. Hier wird die gleiche Näherung wie für den spontanen Emissionsterm in Gl. (7.8) verwendet:

$$\frac{d}{dt} B_p^\pm \Big|_{\text{Symm}} \approx \frac{1}{2} \frac{B_p^\pm}{S_p^\pm} \frac{d}{dt} S_p^\pm \Big|_{\text{Symm}}.$$

Eine Rücktransformation liefert die Änderung des elektrischen Feldes:

$$\frac{d}{dt} \tilde{\Phi}^\pm(y) \Big|_{\text{Symm}} = \sum_p i \sqrt{\frac{2\hbar\omega_p^\pm}{\epsilon_0}} \frac{e}{n_{\text{eff}}} \frac{1}{\sqrt{L\omega}} \frac{d}{dt} B_p^\pm \Big|_{\text{Symm}}.$$

In Abb. 7.10 ist die Modendynamik mit und ohne diesen zusätzlichen Wechselwirkungsterm für verschiedene Stromstärken dargestellt. In allen Fällen ist kein großer Unterschied sichtbar, dies deutet daraufhin, dass das Modell in grundlegender Weise verändert werden muss, um die Modendynamik richtig abzubilden. Eine Möglichkeit ist anstelle der Dynamik der Ladungsträgerdichten die Dynamik der Besetzungsfunktionen zu berücksichtigen. Dies ist numerisch aber in hohem Maße aufwendiger, da nun die Besetzungsfunktionen für jeden Ort und jeden Wellenvektor ausgewertet müssen. Eine Möglichkeit zur Implementation wird im nächsten Unterkapitel beschrieben.

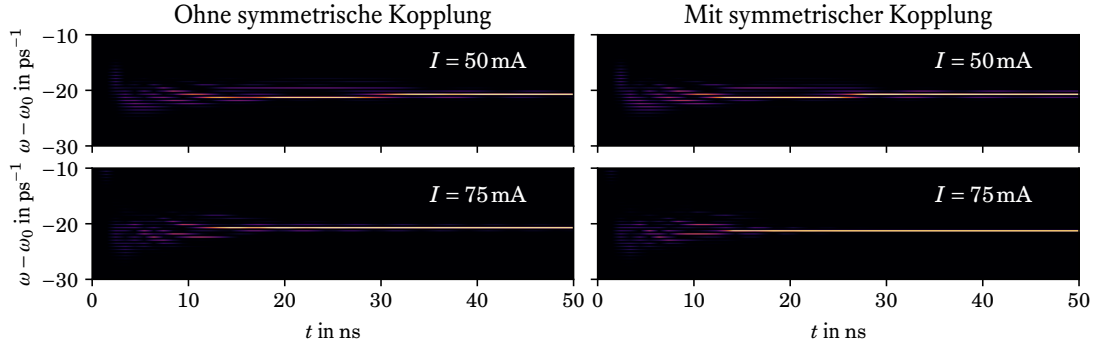


Abbildung 7.10: Modendynamik für verschiedene Stromstärken mit den Parametern aus Tabelle 9.18 im Anhang. In den Abbildungen auf der rechten Seite wurde hierbei ein symmetrischer Kopplungsterm verwendet, wie in Kapitel 7.7 beschrieben.

7.8 Mikroskopisches Traveling-Wave-Modell

In diesem Kapitel soll ein letzter Versuch unternommen werden, das Traveling-Wave-Modell so zu modifizieren, dass die Modendynamik qualitativ mit experimentellen Ergebnissen wie in Kapitel 5.8 übereinstimmt. Dazu soll die Dynamik der Besetzungsfunktionen anstatt der Dynamik der Ladungsträgerdichten betrachtet werden.

Zu diesem Zweck wird zunächst die Bewegungsgleichung der mikroskopischen Polarisation aus Gl. (4.5) untersucht:

$$\frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} = i \Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^e) - \frac{i}{\hbar} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} + \left. \frac{d}{dt} \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} \right|_{\text{Streu}}$$

Wie bei der makroskopischen Polarisation werden hier die beiden Ausbreitungsrichtungen getrennt behandelt. In den vorherigen Kapiteln wurde bisher immer mit den Impuls-Matrixelementen p_{λ} und dem Vektorpotential \mathbf{A} gearbeitet. Beim Traveling-Wave-Modell hingegen spielt das elektrische Feld die wichtigere Rolle, daher soll in der Rabi-Frequenz das Vektorpotential durch das elektrische Feld ersetzt werden, siehe die Diskussion in Kapitel 3.9. Dort wurde ein ω -abhängiges Dipol-Moment $d_{\lambda}(\omega)$ verwendet, an dieser Stelle wird nun die Frequenz durch den Energie-Abstand von Leitungs- und Valenzband ersetzt und es folgt ein \mathbf{k} -abhängiges Dipol-Matrixelement:

$$d_{\mathbf{k}}^{\lambda} = -\frac{ie}{m_0 \omega_{\mathbf{k}}} \mathbf{p}_{\lambda}, \quad \text{mit} \quad \omega_{\mathbf{k}} = \frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\hbar}.$$

Die Rabi-Frequenz ohne den Hartree-Fock-Anteil lautet, siehe Gl. (3.12):

$$\hbar \Omega_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} = (d_{\mathbf{k}}^{\lambda})^* E^{\pm}(\mathbf{r}_{\parallel}, z_{\text{QW}}, t).$$

Mit dem elektrischen Feld aus Gl. (7.1)

$$E^{\pm}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{e} Z(z) \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y, t) e^{-i\omega_0 t \pm i\beta_0 y}$$

erscheint es sinnvoll, die mikroskopischen Polarisationen umzuschreiben:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} = Z(z_{\text{QW}}) \frac{e}{d_{\mathbf{k}}^{\lambda}} e^{-i\omega_0 t \pm i\beta_0 y} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm}.$$

Die Bewegungsgleichung aus Gl. (4.5) für die undefinierten mikroskopischen Polarisationen lautet nun

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} &= -i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0) \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}}{\hbar} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \pm} + \frac{i}{\hbar} \frac{|d_{\mathbf{k}}^{\lambda}|^2}{e^2} \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y, t) (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^e) \\ &= -i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0) \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}}{\hbar} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \pm} + \frac{i}{\hbar} \frac{|d_{\mathbf{k}}^{\lambda}|^2}{e^2} \tilde{\Phi}^{\pm}(x, y, t) (1 - f_{\mathbf{k}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^e). \end{aligned}$$

Diese Gleichung hat die gleiche Form wie Gl. 7.5, nur dass anstelle einer Abklingkonstanten γ_j die Dephasierungsmatrix $\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ verwendet wird, welche die Bewegungsgleichungen der einzelnen Komponenten miteinander koppelt.

Die Bewegungsgleichung des elektrischen Feldes Gl. (7.9) ändert sich nicht, es muss nur die makroskopische Polarisation bestimmt werden. Diese lautet (vergleiche mit Gl. (4.5)):

$$P^\pm(\mathbf{r}, t) = \delta(z - z_{\text{QW}}) \frac{2}{A} \sum_{\lambda \mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^\lambda \psi_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} = \delta(z - z_{\text{QW}}) Z(z_{\text{QW}}) e \frac{2}{A} \sum_{\lambda \mathbf{k}} e^{-i\omega_0 t \pm i\beta_0 y} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm}.$$

Ein Vergleich mit Gl. (7.3) ergibt

$$\bar{P}^\pm = \frac{1}{d_{\text{QW}}} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{2}{A} \sum_{\lambda \mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm}.$$

Dementsprechend lautet die Bewegungsgleichung für das elektrische Feld ohne spontane Emission

$$\frac{n_{\text{gr}}}{c} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Phi}^\pm \pm \frac{\partial}{\partial y} \tilde{\Phi}^\pm - \frac{i}{2\beta_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Phi}^\pm = \frac{i\beta_0 \Gamma}{2n_{\text{eff}}^2} \frac{1}{d_{\text{QW}}} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{2}{A} \sum_{\lambda \mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} - \frac{\alpha_{\text{int}}}{2} \tilde{\Phi}^\pm.$$

Einsetzen der obigen Definitionen in die Bewegungsgleichungen der Besetzungsfunktionen aus Gl. (4.5) ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda &= \text{Im} \left\{ \psi_{\mathbf{k}}^\lambda (\Omega_{\mathbf{k}}^\lambda)^* \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{f_{\mathbf{k}}^\lambda}{\tau_{\text{nr}}} + D_\lambda \Delta f_{\mathbf{k}}^\lambda + \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\Gamma}{d_{\text{QW}}} \sum_{\pm} \text{Im} \left\{ \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm} (\Phi^\pm(x, y, t))^* \right\} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^\lambda (1 - f_{\mathbf{k}}^\lambda) \\ &\quad - B_{\mathbf{k}}^\lambda f_{\mathbf{k}}^e f_{\mathbf{k}}^\lambda + D_\lambda \Delta f_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{f_{\mathbf{k}}^\lambda}{\tau_{\text{nr}}} + \left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^\lambda \right|_{\text{Streu}}, \end{aligned}$$

dabei wurde zusätzlich die Diffusion der Ladungsträger mit einem einfachen Diffusionsterm berücksichtigt. Wie in Kapitel 7.1 schon diskutiert wurde, wird der Faktor 2 aus Gl. (4.5) hier nicht berücksichtigt, da in Gl. (4.5) vom Betrag aus gesehen nur die Hälfte des elektrischen Feldes in der Rabi-Frequenz enthalten ist. Im Pumpterm wird die Effizienz aus Gl. (4.3) verwendet, sodass die Elektronen- und Loch-Ladungsträgerdichten im Quantenfilm immer gleich sind.

Bei der numerischen Lösung kann die gleiche Methode verwendet werden, der einzige Unterschied liegt bei den mikroskopischen Polarisationen, wo nun mit Matrizen gerechnet werden muss:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm, j+1} &\approx \sum_{\mathbf{k}'} \left(e^{-\Lambda^\lambda \Delta t} \right)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \pm, j} + \frac{i}{\hbar} \tilde{\Phi}_{j+0.5}^\pm(x, y) \\ &\quad \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \left(1 - e^{-\Lambda^\lambda \Delta t} \right)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}^{\lambda, -1} \frac{|d_{\mathbf{k}'}^\lambda|^2}{e^2} \left(1 - f_{\mathbf{k}''}^\lambda - f_{\mathbf{k}''}^e \right). \end{aligned}$$

Die Matrix $\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda$ lautet hierbei

$$\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\lambda = \frac{\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{\hbar} + i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.$$

Falls die Dephasierungsmatrix von den Besetzungsfunktionen abhängt, müsste sie in jedem Zeitschritt neu bestimmt werden. Mit einer \mathbf{k} -abhängigen Suszeptibilität

$$\chi_{\mathbf{k}}^\lambda = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda, -1} \frac{|d_{\mathbf{k}'}^\lambda|^2}{e^2} \left(1 - f_{\mathbf{k}'}^\lambda - f_{\mathbf{k}'}^e \right)$$

lautet die Gleichung für die Polarisation

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{\lambda, \pm, j+1} \approx \sum_{\mathbf{k}'} \left(e^{-\Lambda^\lambda \Delta t} \right)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\lambda, \pm, j} + \tilde{\Phi}_{j+0.5}^\pm(x, y) \sum_{\mathbf{k}'} \left(1 - e^{-\Lambda^\lambda \Delta t} \right)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \chi_{\mathbf{k}'}^\lambda.$$

Bei der Implementierung fällt auf, dass der Realteil der Suszeptibilität die numerische Lösung schwierig gestaltet. Dies liegt daran, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wellen sich durch den Realteil der Suszeptibilität und die damit verbundene Änderung des Brechungsindex stark ändert. Eine Möglichkeit zur Behebung dieses Problems ist anzunehmen, dass der effektive Brechungsindex n_{eff} und der Gruppenbrechungsindex n_{gr} den Quantenfilm ohne Ladungsträger schon berücksichtigt haben. In der Suszeptibilität muss der Realteil für den leeren Quantenfilm wieder abgezogen werden:

$$\chi_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1} \frac{|d_{\mathbf{k}'}^{\lambda}|^2}{e^2} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}'}^e) - \text{Re} \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda,-1} \frac{|d_{\mathbf{k}'}^{\lambda}|^2}{e^2} \right\}.$$

Für die Streuung der Ladungsträger wird der lineare Streuterm aus Gl. (3.24) verwendet, dieser lautet

$$\left. \frac{d}{dt} f_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right|_{\text{Streu}} = - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} (f_{\mathbf{k}'}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}),$$

dabei bezeichnet $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda}$ die Streumatrix und $f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}$ die Fermi-Dirac-Verteilung mit der Gittertemperatur und der gleichen Ladungsträgerdichte wie die Verteilung $f_{\mathbf{k}}^{\lambda}$. Eine naheliegende Möglichkeit für die numerische Berechnung der Loch-Besetzungen im nächsten Zeitschritt lautet

$$\left[\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{2\tau_{\text{nr}}} + \frac{B_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2} f_{\mathbf{k},i,j}^e + \frac{j}{2e} \eta_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right] f_{\mathbf{k},i,j+1}^{\lambda} = \left[\frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{2\tau_{\text{nr}}} - \frac{B_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2} f_{\mathbf{k},i,j}^e - \frac{j}{2e} \eta_{\mathbf{k}}^{\lambda} \right] f_{\mathbf{k},i,j}^{\lambda} + \frac{j}{e} \eta_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} (f_{\mathbf{k}'}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}'}^{\lambda,\text{FD}}) + \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{\epsilon_0}{2e^2} \sum_{\pm} \text{Im} \left[(\tilde{\Phi}_{i+1,j+1}^{\pm} + \tilde{\Phi}_{i,j+1}^{\pm})^* \tilde{\psi}_{\mathbf{k},i,j+1}^{\lambda,\pm} \right],$$

hierbei wurde wieder nur der eindimensionale Fall betrachtet und der Diffusionsterm wieder vernachlässigt. Die Besetzungen werden auf dem gleichen Gitter wie die Ladungsträgerdichten im konventionellen Traveling-Wave-Modell ausgewertet, siehe Abb. 7.3.

Für ein möglichst einfaches Beispiel mit effektiven Massen ist in Abb. 7.11 die Modendynamik für ein paar Beispiele mit den Parametern aus Tabelle 9.19 im Anhang dargestellt. Damit sich der numerische Aufwand in Grenzen hält, wurde dabei ein möglichst einfacher Streuterm

$$J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{\tau_s}$$

mit einer Streuzeit τ_s und ein möglichst einfacher Dephasierungsterm

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Gamma$$

mit einer Dephasierungskonstante Γ verwendet.

Mit einer Diskretisierung \mathbf{k}_i des Wellenvektors entspricht dies dem konventionellen Traveling-Wave-Modell mit einer großen Anzahl von Polstellen, wobei jede Polstelle einem Wellenvektor der Diskretisierung entspricht. Der Unterschied liegt dementsprechend nur in der Behandlung der Ladungsträger, wo beim mikroskopischen Modell zum Beispiel der Pumpterm und die Streuterme genauer beschrieben werden können. In den Simulationen aus Kapitel 4 wurden zwar sehr ähnliche Parameter wie in Abb. 7.11 verwendet, allerdings gibt es große qualitative Unterschiede in der Modendynamik. Zum Beispiel stellt sich in der Modendynamik in Abb. 7.11 ein Gleichgewichtszustand ein, wie das in den bisherigen Simulation mithilfe der Traveling-Wave-Methode auch immer der Fall ist. Dieses Verhalten ist in Kapitel 4 für ortsabhängige Besetzungsfunktionen nicht beobachtbar, stattdessen ist der Effekt des Modenrollens gut zu erkennen. In diesem Sinne führt auch die mikroskopische Behandlung der Ladungsträger im Quantenfilm zu keiner großen Verbesserung. Für die verwendete Streuzeit von 100 fs unterscheiden sich die Besetzungsfunktionen nur schwach von Fermi-Dirac-Verteilungen, siehe Abb. 7.12.

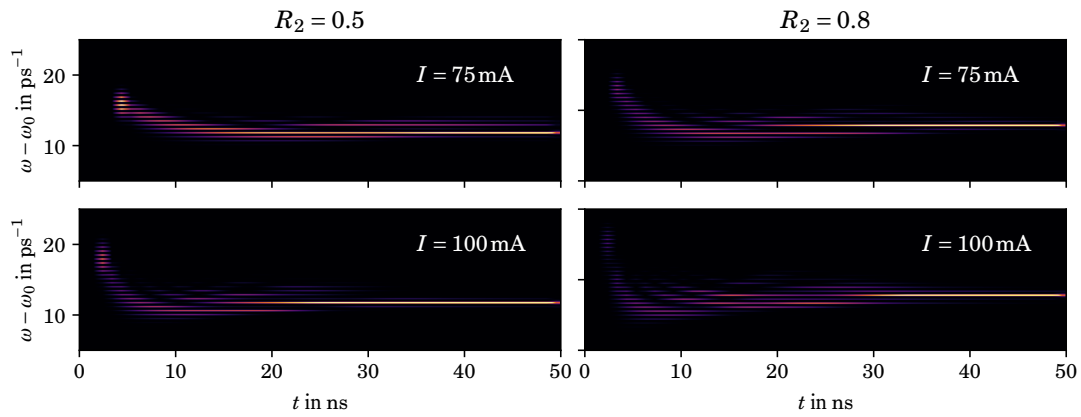


Abbildung 7.11: Modendynamik des mikroskopischen Traveling-Wave-Modells für zwei verschiedene Stromstärken und Spiegelreflektivitäten mit den Parametern aus Tabelle 9.19 im Anhang.

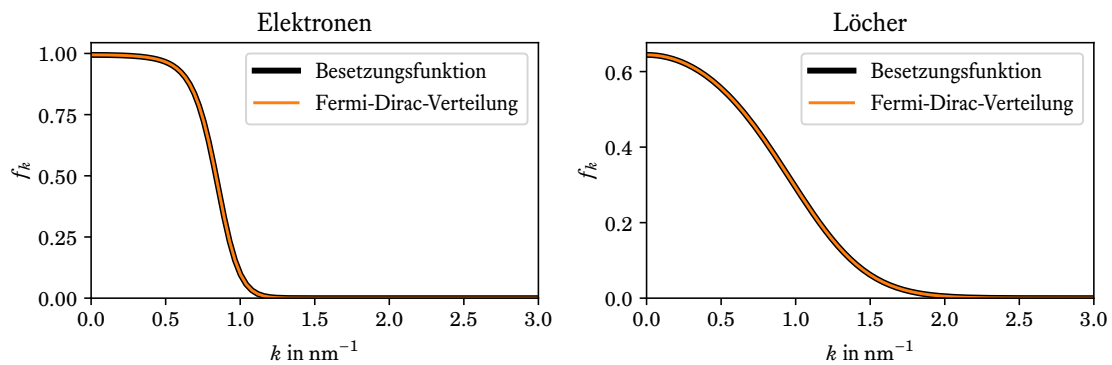


Abbildung 7.12: Elektron- und Loch-Besetzungsfunktionen bei $y = 300 \mu\text{m}$ für $t = 10 \text{ ns}$ und eine Stromstärke von 75 mA . Zum Vergleich sind die Fermi-Dirac-Verteilungen für die gleiche Ladungsträgerdichte und der Gittertemperatur dargestellt.

7.9 Fazit

Während in vorherigen Kapiteln die Dynamik des Feldes mithilfe der Bewegungsgleichungen der Modenkoeffizienten untersucht wurde, wurde in diesem Kapitel die Traveling-Wave-Methode verwendet. Dabei wird das Feld als klassisch angenommen und eine Wellengleichung numerisch gelöst. In den Simulationen stellte sich heraus, dass der Gleichgewichtszustand gut abgebildet wird. Zum Beispiel kann der Einfluss der Spiegelreflektivitäten auf die Ortsabhängigkeiten von Feld und Ladungsträgerdichten untersucht werden. Allerdings gibt es bei der Simulation der Modendynamik große qualitative Unterschiede zu bisherigen Ergebnissen. So stellt sich bei Traveling-Wave-Methode ein Gleichgewichtszustand ein, während bei anderen Methoden der Effekt des Modenrollens beobachtet wird. Anschließend wurde mithilfe von verschiedenen Erweiterungen der Traveling-Wave-Methode versucht, die Modendynamik besser abzubilden. Beispielsweise wurde ein zusätzlicher symmetrischer Modenwechselwirkungsterm verwendet oder es wurde die Dynamik der Besetzungsfunktionen berücksichtigt. In beiden Fällen gab es hinsichtlich der Modendynamik keine große Verbesserung. Es ist daher notwendig die Traveling-Wave-Methode noch weiter zu untersuchen, um festzustellen, ob es möglich ist, die Modendynamik besser darzustellen. Dies würde es erlauben, auf die Vorteile der Methode zurückzugreifen, wie zum Beispiel die Möglichkeit, den Einfluss der Spiegelreflektivitäten zu diskutieren.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Das Thema dieser Arbeit war die Simulation von Laserdioden, vor allem die Beschreibung der Modendynamik in diesen Laserdioden. Die Methoden dieser Arbeit sind zwar prinzipiell auf Halbleiter-Dioden anwendbar, bei den Simulationen wurden aber nur Galliumnitrid-basierte Laserdioden berücksichtigt, da es hierzu viele experimentelle Ergebnisse sowie eine intensive Forschung vor Ort gibt [53–55, 119]. Bei experimentellen Streak-Camera-Aufnahmen lässt sich beispielsweise der Effekt des Modenrollens beobachten, bei dem verschiedene longitudinale Moden zur Ausgangsleistung des Lasers beitragen und sich periodisch gegenseitig abwechseln. Eine wichtige Größe bei der Beschreibung der Modendynamik ist die Periodendauer beziehungsweise die Frequenz des Modenrollens, welche in der Größenordnung von 10 Megahertz liegt.

Um die Modendynamik simulieren zu können, wurde in Kapitel 2 zunächst die Form der optischen Moden in der Laserdiode diskutiert. Dazu wurde eine Eigenwert-Gleichung numerisch gelöst, welche aus den Maxwell-Gleichungen hergeleitet werden kann und benutzt wird, um die Moden in Wellenleitern zu untersuchen. Die Lösung liefert die Modenfunktionen, welche die Ortsabhängigkeit der Moden im Wellenleiter beschreiben, und die Beziehung zwischen den Modenfrequenzen und der Wellenlängen der Moden innerhalb der Diode.

Bei der Beschreibung der Laserdynamik spielt das Verhalten der Ladungsträger in den Quantenfilmen eine wichtige Rolle, dies wird in Kapitel 3 genauer diskutiert. Unter Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten wie der Coulomb-Wechselwirkung oder der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist das quantenmechanische Problem nicht mehr analytisch lösbar und es müssen bestimmte Näherungen verwendet werden. In dieser Arbeit wurden die Hartree-Fock-Korrekturen sowie die Beiträge verschiedener Streuterme berücksichtigt. Dies erlaubt es, Größen wie die elektrische Suszeptibilität zu berechnen. Diese spielt in der Laserdynamik eine wichtige Rolle, da sie zum Beispiel die optische Verstärkung innerhalb der Laserdiode bestimmt und damit die Zunahme des optischen Feldes im Resonator durch stimulierte Emission beschreibt.

Um zunächst die Modendynamik an einem möglichst einfachen Beispiel zu diskutieren, wurden in Kapitel 4 die komplizierten Streuterme durch stark vereinfachte Terme ersetzt. In diesem Fall ist es möglich, die Bewegungsgleichung der Besetzungsfunktionen der Ladungsträger in den Quantenfilmen ortsabhängig zu lösen. Dies liefert eine Modendynamik, welche qualitativ mit experimentellen Streak-Camera-Messungen übereinstimmt. Für kompliziertere Streuterme gestaltet sich die Lösung der Besetzungsfunktionen aber auf langen Zeitskalen numerisch als schwierig. Daher wurde in Kapitel 4 auch untersucht, ob es möglich ist, anstelle der Dynamik der Besetzungsfunktionen nur noch die Dynamik der Ladungsträgerdichten zu berücksichtigen und anzunehmen, dass die Besetzungsfunktionen durch Fermi-Dirac-Verteilungen beschrieben werden können. Es stellt sich heraus, dass durch diese Näherung verschiedene Effekte vernachlässigt werden, die allerdings für die Modendynamik sehr wichtig sind. Um dennoch eine gute Übereinstimmung zu erhalten, ist es notwendig in den Bewegungsgleichungen zusätzliche Terme zu verwenden, die eine effektive Wechselwirkung der Moden beschreiben.

Diese effektiven Modenwechselwirkungsterme wurden in Kapitel 5 für kompliziertere Streuterme hergeleitet. Im Spezialfall der vereinfachten Streuterme ergeben sich hierbei Modenwechselwirkungsterme, wie sie auch in der Literatur zu finden sind [56–59]. Aufgrund der Eigenschaften der realistischeren Streuterme zeigen sich aber starke Abweichungen bei genauerer Berücksichtigung der Coulomb-Streuung und der Elektron-Phonon-Streuung. Beispielsweise hängen hier die Modenwechselwirkungsterme stark von der Photonendichte in der Laserdiode ab, was bei den vereinfachten Streutermen nicht der Fall ist. Während dieser Effekt für die Modendynamik wichtig sein kann, spielt er für andere Größen wie die Ausgangsleistung des Lasers keine Rolle, da hier vor allem die optische Verstärkung entscheidend ist. Außerdem wurden

in Kapitel 5 Abweichungen von der Fermi-Dirac-Verteilung untersucht, der Einfluss dieser Terme auf die Laserdynamik im Vergleich zu den anderen effektiven Wechselwirkungsterm erweist sich aber als gering.

In Kapitel 6 wurde die Laserdynamik mittels Drift-Diffusions-Gleichungen untersucht. Dies ist zum Beispiel wichtig, wenn mehrere Quantenfilme an der Laserdynamik teilnehmen. Die Drift-Diffusions-Gleichungen können dann verwendet werden, um zu bestimmen, wie stark die einzelnen Quantenfilme gepumpt werden. Die Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen wurde dann verwendet, um die Modendynamik zu untersuchen. Bei einer Laserdiode mit einer kleinen Stegbreite von $2\ \mu\text{m}$, wo nur sehr wenige transversale Moden an der Laserdynamik teilnehmen, zeigte sich eine ähnliche Modendynamik wie in den vorherigen Kapiteln. Außerdem wurde das Verhalten einer Laserdiode mit einer höheren Stegbreite von $10\ \mu\text{m}$ untersucht. Da hier mehr transversale Moden an der Laserdynamik teilnehmen, ist es bei den simulierten Streak-Camera-Bildern schwieriger, die einzelnen Moden zu unterscheiden.

Die Wechselwirkung der Moden hängt mit der Ortsabhängigkeit der Ladungsträger in Ausbreitungsrichtung der Moden zusammen. Daher wurde in Kapitel 7 die Modendynamik mit einer anderen Methode ermittelt, dem Traveling-Wave-Modell. Hier wird das Feld nicht in die einzelnen Moden aufgespalten, sondern als klassisch angenommen und mithilfe der Wellengleichung untersucht. Dies hat den Vorteil, dass zum Beispiel der Einfluss der Spiegel an den beiden Enden des Resonators direkt berücksichtigt werden kann, allerdings ist es schwierig, quantenoptische Effekte wie spontane Emission zu beachten. Da die Ortsabhängigkeit der Ladungsträgerdichten auch im Modell enthalten ist, wurde hier vermutet, dass die resultierende Modendynamik, ohne effektive Wechselwirkungsterme zu benutzen, qualitativ mit experimentellen Ergebnissen übereinstimmt. Es stellte sich aber heraus, dass die Modendynamik des Traveling-Wave-Modells wesentlich von dem zu erwartenden Verhalten abweicht. So lässt sich der Effekt des Modenrollens hier nur ansatzweise und nur bei kleineren Stromstärken beobachten, außerdem stellt sich nach kurzer Zeit ein Gleichgewichtszustand ein, wo nur eine longitudinale Mode aktiv ist. Um dieses Problem zu lösen, wurden verschiedene Erweiterungen der Traveling-Wave-Methode untersucht. Beispielsweise wurde ein zusätzlicher symmetrischer Modenwechselwirkungsterm verwendet oder es wurde die Dynamik der Besetzungsfunktionen berücksichtigt. In beiden Fällen gab es hinsichtlich der Modendynamik keine große Verbesserung. Ein Thema künftiger Arbeiten könnte es daher sein, zu versuchen, die Modendynamik mit entsprechenden Erweiterungen des Traveling-Wave-Modells besser darzustellen. Dies würde es erlauben, auf die Vorteile der Methode zurückzugreifen, wie zum Beispiel die Möglichkeit, den Einfluss der Spiegelreflektivitäten zu diskutieren.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass in dieser Arbeit verschiedene Methoden verwendet wurden, um die Modendynamik in Fabry-Pérot-Laserdioden zu simulieren. Diese Methoden lassen sich in zwei Arten aufteilen, je nachdem wie das optische Feld behandelt wird. Die erste Möglichkeit ist, das optische Feld in die einzelnen Moden aufzuteilen und zu untersuchen, wie viele Photonen sich jeder Mode zuordnen lassen. In den Bewegungsgleichungen dieser Photonenzahlen lässt sich die Wechselwirkung der Moden in verschiedener Weise umsetzen und die resultierende Modendynamik stimmt mit experimentellen Ergebnissen überein. Die zweite Möglichkeit ist, das optische Feld als klassisch zu betrachten und die Wellengleichung zu lösen. Dies führt auf die Traveling-Wave-Methode, wo partielle Differentialgleichungen für das Feld gelöst werden müssen. Im Gegensatz zum Ansatz mit den Photonenzahlen, wird das Feld nicht in die einzelnen Moden aufgespalten. Dies könnte bei sehr großen Laserdioden von Vorteil sein, wo sehr viele Moden an der Laserdynamik beteiligt sind und es numerisch zu aufwendig wäre, die Dynamik jeder einzelnen Photonenzahl zu berücksichtigen. In dieser Arbeit ist es allerdings nicht gelungen eine qualitative Übereinstimmung der resultierenden Modendynamik mit experimentellen Ergebnissen herzustellen. Für beide Arten von Methoden ist es wichtig zu wissen, wie die Quantenfilme gepumpt werden. Eine Möglichkeit zur Berechnung dieser Pumpstromdichten stellen die Drift-Diffusions-Gleichungen dar.

Für die Zukunft ergeben sich noch viele interessante Themenstellungen. Ein weiteres Thema könnte beispielsweise die Berücksichtigung der Temperatur-Dynamik in der Laserdiode sein. So wurde in dieser Arbeit für die Gitter-Temperatur sowie die Temperatur der Ladungsträger immer eine konstante und gleiche Temperatur angenommen. Bei längerer Inbetriebnahme der Laserdiode führen die hohen Stromdichten zu einer Erwärmung und damit beispielsweise auch zu Änderungen der optischen Verstärkung, des Brechungsindex und der effektiven Modenwechselwirkungsterme. Eine Möglichkeit könnte hier sein, die Drift-Diffusions-Gleichungen nicht mehr stationär, sondern zeitabhängig zu betrachten und mit einer Wärmeleitungsgleichung zu koppeln. Der so erhaltene zeitliche Temperaturverlauf in der Nähe der Quantenfilme könnte in einer weiteren Simulation verwendet werden, um den Einfluss auf die Modendynamik zu untersuchen.

Ein anderes Thema könnte sein, den Einfluss der Schwankungen des Indium-Anteils in den Quantenfilmen in den Rechnungen zu berücksichtigen. Diese Schwankungen können experimentell bestimmt werden [132, 133] und führen lokal zu einer Änderung der Bandstruktur und der optischen Eigenschaften. Dies könnte

mit den gleichen Methoden simuliert werden, die in dieser Arbeit vorgestellt wurden. Der Indium-Anteil würde allerdings als ortsabhängige Funktion in die Simulation eingehen und auch die Besetzungsfunktionen müssten über den gesamten Quantenfilm als ortsabhängig betrachtet werden. An jedem Punkt im Quantenfilm könnte die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur für den vorgegebenen Indium-Anteil berechnet werden, welche dann bei der Kopplung der Ladungsträger mit dem optischen Feld verwendet wird. Außerdem könnte die Diffusion im Quantenfilm auch eine große Rolle spielen, da die Ladungsträger dazu tendieren werden, sich an den Punkten mit minimaler Bandlücke zu sammeln. Diese Näherung funktioniert, solange die Bandlückenänderungen nicht zu groß sind oder die ortsabhängigen Schwankungen des Indium-Anteils zu groß sind. In diesem Fall könnten lokalisierte Zustände auftreten, die separat von den delokalisierten Zuständen behandelt werden müssten.

Kapitel 9

Anhang

9.1 Software

Bei der Implementation der in dieser Arbeit vorgestellten Methoden wurden verschiedene Programmiersprachen verwendet, vor allem *Rust*, *C++* und *Python*. Dabei erwiesen sich bestimmte numerische Bibliotheken als sehr nützlich. Beispielsweise wurden die BLAS/LAPACK-Bibliotheken [134] für lineare Algebra verwendet, UMFPACK [135] für die Lösung dünnbesetzter Gleichungssysteme und ARPACK für die Lösung dünnbesetzter Eigenwertprobleme. Die Darstellung der Ergebnisse erfolgte mit der Matplotlib-Bibliothek [136].

9.2 Dynamische Abschirmung

In diesem Kapitel soll für einen Quantenfilm die Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung hergeleitet werden. Im einfachsten Fall ist das Ergebnis die Lindhard-Formel. Für eine ausführlichere Herleitung und eine Diskussion für verschiedene Dimensionen siehe Ref. [62]. Die dynamische Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung zweier Ladungsträger kann auch mit der Vielteilchen-Keldysh-Theorie diskutiert werden, dabei wird die abgeschirmte Wechselwirkung W^R durch [106]

$$W^R(1,2) = V(1,2) + \int d3 \int d4 V(1,3)P^R(3,4)W^R(4,2)$$

definiert. V bezeichnet die nicht-abgeschirmte Wechselwirkung und P^R ist die Polarisation. Mit dem Superskript R werden in dieser Theorie retardierte Größen bezeichnet, und mit A entsprechend avancierte Größen. Die Zahlen representieren hierbei Variablen wie Zeit, Ort und Spin, zum Beispiel ist "1" eine Abkürzung für (t_1, \mathbf{r}_1, s_1) . Der Spin wird im Folgenden aber nicht explizit mitgeführt. Die nichtabgeschirmte Wechselwirkung hängt nur vom Ortsabstand ab und ist instantan:

$$V(t_1, t_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(t_2 - t_1, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = \delta(t_2 - t_1) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_b} \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} = \delta(t_2 - t_1)V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1).$$

Damit lautet die Gleichung für die abgeschirmte Wechselwirkung

$$W^R(t_1, t_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \int dt_3 \int d^3\mathbf{r}_3 \int dt_4 \int d^3\mathbf{r}_4 V(t_1 - t_3, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)P^R(t_3, t_4, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)W^R(t_4, t_2, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2).$$

Wird angenommen, dass das System sich in einem Gleichgewichtszustand befindet, hängen die anderen Größen auch nur von der Zeitdifferenz ab. Dementsprechend kann eine Fourier-Transformation bezüglich der Zeit durchgeführt werden und das Ergebnis lautet

$$W^R(\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \int d^3\mathbf{r}_3 \int d^3\mathbf{r}_4 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)P^R(\omega, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)W^R(\omega, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2).$$

Bei Quantenfilmen kann wieder die Periodizität in x - und y -Richtung ausgenutzt werden, eine weitere Fourier-Transformation in diesen beiden Richtungen liefert

$$W_{\mathbf{q}}(\omega, z_1, z_2) = V_{\mathbf{q}}(z_1 - z_2) + \int dz_3 \int dz_4 V(z_1 - z_3)P_{\mathbf{q}}(\omega, z_3, z_4)W_{\mathbf{q}}(\omega, z_4, z_2),$$

ab hier wird das R-Superskript weggelassen. Für die nichtabgeschirmte Wechselwirkung ergibt diese Fourier-Transformation

$$V_{\mathbf{q}}(z) = \int d^2 \mathbf{r}_{\parallel} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_b} \frac{1}{|\mathbf{q}|} e^{-|\mathbf{q}||z|} = V_{\mathbf{q}}^{2D} e^{-|\mathbf{q}||z|},$$

$V_{\mathbf{q}}^{2D}$ ist hierbei die gewöhnliche zweidimensionale Coulomb-Wechselwirkung. Nun wird noch die Polarisation $P_{\mathbf{q}}(\omega, z_3, z_4)$ benötigt, in der Vielteilchen-Theorie lautet die einfachste Näherung hierfür

$$P^{\mathbf{R}}(1, 2) = -i\hbar \left[G^{\mathbf{R}}(1, 2)G^{\mathbf{<}}(2, 1) + G^{\mathbf{<}}(1, 2)G^{\mathbf{A}}(2, 1) \right], \quad (9.1)$$

hierbei bezeichnet $G(1, 2)$ die Einteilchen-Green-Funktion, welche sich in einer Basis entwickeln lässt:

$$G(1, 2) = \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}(t_1, t_2) \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \phi_{\beta}^*(\mathbf{r}_2).$$

Nun müssen noch weitere Näherungen durchgeführt werden, zum Beispiel den *generalisierten Kadanoff-Baym-Ansatz* (GKBA) [62, S. 402]:

$$G_{\alpha\beta}^{\mathbf{<}}(t_1, t_2) \approx \begin{cases} i\hbar G_{\alpha\alpha}^{\mathbf{R}}(t_1, t_2) G_{\alpha\beta}^{\mathbf{<}}(t_2, t_2) & \text{für } t_1 < t_2 \\ -i\hbar G_{\alpha\beta}^{\mathbf{<}}(t_1, t_1) G_{\beta\beta}^{\mathbf{A}}(t_1, t_2) & \text{für } t_1 > t_2, \end{cases}$$

und die *Effektive-Teilchen-Näherung* [62, S. 408]:

$$G_{\alpha\alpha}^{\mathbf{R/A}}(t_1, t_2) \approx \mp \frac{i}{\hbar} \theta(\mp(t_1 - t_2)) e^{\mp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha}(t_1 - t_2)}.$$

Das obere Vorzeichen gilt hier für R und das untere Vorzeichen für A. Die Funktionen $G_{\alpha\beta}^{\mathbf{<}}(t_1, t_1)$ lassen sich durch die Besetzungsfunktion $f_{\alpha}(t_1)$ ausdrücken:

$$G_{\alpha\beta}^{\mathbf{<}}(t_1, t_1) \approx \frac{i}{\hbar} \delta_{\alpha\beta} f_{\alpha}(t_1).$$

Eingesetzt in Gl. (9.1) ergibt sich

$$P^{\mathbf{R}}(1, 2) = \theta(t_2 - t_1) \sum_{\alpha\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1 - t_2)(\epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta})} \left[G_{\alpha\alpha}^{\mathbf{<}}(t_2, t_2) - G_{\alpha\beta}^{\beta\beta}(t_2, t_2) \right] \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}_2) \phi_{\beta}(\mathbf{r}_2) \phi_{\beta}^*(\mathbf{r}_1),$$

hierbei wurden nur Terme mit zwei Zuständen α und β berücksichtigt, da nur Intraband-Übergänge berücksichtigt werden sollen. Die Heaviside-Funktion kann durch das folgende Integral dargestellt werden:

$$\theta(t) = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\epsilon}.$$

Nach einigen Rechenschritten ergibt sich

$$\begin{aligned} P^{\mathbf{R}}(\omega, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\approx \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha\beta} \int d\tau \int d\omega' e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta} + \hbar\omega' - \hbar\omega)\tau} \frac{f_{\beta} - f_{\alpha}}{\omega' + i\epsilon} \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}_2) \phi_{\beta}(\mathbf{r}_2) \phi_{\beta}^*(\mathbf{r}_1) \\ &\approx \sum_{\alpha\beta} \frac{f_{\beta} - f_{\alpha}}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha} + \epsilon_{\beta} + i\delta_{\mathbf{W}}} \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}_2) \phi_{\beta}(\mathbf{r}_2) \phi_{\beta}^*(\mathbf{r}_1), \end{aligned}$$

mit $\delta_{\mathbf{W}} = \hbar\epsilon$. Hier wurde außerdem angenommen, dass sich die Besetzungsfunktion auf der Zeitskala der Coulomb-Wechselwirkung nicht ändert. Einsetzen der Quantenfilm-Wellenfunktionen aus Gl. (3.3) ergibt

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{q}}(\omega, z_1, z_2) &= \frac{2}{A} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} + i\delta_{\mathbf{W}}} |\xi_{\lambda}(z_1)|^2 |\xi_{\lambda}(z_2)|^2 \\ &= \sum_{\lambda} P_{\mathbf{q}}^{\lambda}(\omega) |\xi_{\lambda}(z_1)|^2 |\xi_{\lambda}(z_2)|^2. \end{aligned}$$

Mit der Lindhard-Formel für die Polarisation resultiert [62, 106]

$$P_{\mathbf{q}}^{\lambda}(\omega) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} - f_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\lambda} + i\delta_{\mathbf{W}}},$$

hier wurde der Spin auch über den zusätzlichen Faktor 2 berücksichtigt. In der Streuung werden die entsprechende Coulomb-Matrixelemente benötigt, welche definiert sind als

$$W_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'}(\omega) = \int dz_1 \int dz_2 |\xi_{\lambda}(z_1)|^2 |\xi_{\lambda'}(z_2)|^2 W_{\mathbf{q}}(\omega, z_1, z_2).$$

Für diese Matrixelemente folgt ein Gleichungssystem, welches für jede Frequenz ω und jeden Wellenvektor \mathbf{q} gelöst werden muss:

$$W_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'}(\omega) = V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda'} + \sum_{\lambda''} V_{\mathbf{q}}^{\lambda\lambda''} P_{\mathbf{q}}^{\lambda''}(\omega) W_{\mathbf{q}}^{\lambda''\lambda'}(\omega)$$

9.3 Coulomb-Summen

In der Hartree-Fock-Theorie müssen Summen der Form

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'}$$

numerisch ausgewertet werden. Allerdings divergiert die Coulomb-Wechselwirkung $V_{\mathbf{q}}$ für $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Im Folgenden soll eine Möglichkeit vorgestellt werden, um dieses Problem in der Simulation zu behandeln, siehe auch Ref. [62, 287 ff.]. Es wird nun eine Rotationssymmetrie angenommen, dass heißt alle Größen hängen nur vom Betrag des Wellenvektors ab: $a_{\mathbf{k}} = a_k$, $b_{\mathbf{k}} = b_k$. In 3 Dimensionen folgt für die Summe nach der Umwandlung ein Integral:

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} dk' k'^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta V_{\sqrt{k^2+k'^2-2kk'\cos\theta}}^{3D} b_{k'} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} dk' k'^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b} \frac{1}{k^2+k'^2-2kk'\cos\theta} b_{k'} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} \int_0^{\infty} dk' \frac{k'}{k} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| b_{k'}. \end{aligned}$$

In der Simulation werden die Funktionen auf einem Gitter mit Gitterpunkten k_i ausgewertet. Das Integral entspricht dann wieder einer Summe über diese Gitterpunkte und den dazugehörigen Gewichten w_j :

$$a_{k_i} \approx \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} \sum_j w_j \frac{k_j}{k_i} \ln \left| \frac{k_i+k_j}{k_i-k_j} \right| b_{k_j}$$

Der Summand für $i = j$ divergiert hier allerdings. Eine gute Annäherung des Integrals folgt mithilfe der Einführung eines konvergierenden Faktors $C(k, k')$.

$$\begin{aligned} a_{k_i} &\approx \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} \sum_j w_j \frac{k_j}{k_i} \ln \left| \frac{k_i+k_j}{k_i-k_j} \right| b_{k_j} + \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} \int_0^{\infty} dk' (C(k_i, k') - C(k_i, k_i)) \frac{k'}{k_i} \ln \left| \frac{k_i+k'}{k_i-k'} \right| b_{k_i} \\ &\approx \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} \sum_j w_j \frac{k_j}{k_i} \ln \left| \frac{k_i+k_j}{k_i-k_j} \right| (b_{k_j} - b_{k_i} C(k_i, k_j)) + \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} b_{k_i} \int_0^{\infty} dk' C(k_i, k') \frac{k'}{k_i} \ln \left| \frac{k_i+k'}{k_i-k'} \right| \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi^2} \sum_j w_j \frac{k_j}{k_i} \ln \left| \frac{k_i+k_j}{k_i-k_j} \right| (b_{k_j} - b_{k_i} C(k_i, k_j)) + \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_b 4\pi} k_i b_{k_i} \\ &= \sum_j V_{i,j} b_{k_j}, \end{aligned}$$

Dabei wurde zunächst eine Null addiert. Der eine Beitrag hebt den divergierenden Term bei $i = j$ auf und der andere Beitrag lässt sich analytisch integrieren. Der konvergierende Faktor lautet hierbei:

$$C(k, k') = \frac{4k^4}{(k^2 + k'^2)^2}.$$

Das Ergebnis ist die Coulomb-Matrix

$$V_{ij} = \begin{cases} \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_b 4\pi^2} w_j \frac{k_j}{k_i} \ln \left| \frac{k_i + k_j}{k_i - k_j} \right| & \text{für } i \neq j \\ -\sum_{l \neq i} V_{il} C(k_i, k_l) + \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_b 4\pi} k_i & \text{für } i = j \end{cases}$$

und die Coulomb-Summe lässt sich durch Matrix-Vektor-Multiplikation bestimmen. In zwei Dimensionen ist die Situation allerdings komplizierter:

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk' k' \int_0^{2\pi} d\varphi V^{2D} \frac{b_{k'}}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi}} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk' k' \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^2}{2\epsilon_0 \epsilon_b} \frac{1}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi}} F \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi} b_{k'} \\ &= \int_0^\infty dk' V(k, k') b_{k'} \end{aligned}$$

Wobei hier $V(k, k')$ folgendermaßen definiert ist:

$$\begin{aligned} V(k, k') &= \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{4\pi^2} \frac{e^2}{2\epsilon_0 \epsilon_b} \frac{k'}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi}} F \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi} \\ &= \int_0^\pi d\varphi \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_b 4\pi^2} \frac{k'}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi}} F \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \varphi}. \end{aligned}$$

Dieses Integral lässt sich im Allgemeinen nicht analytisch lösen, da der Formfaktor F_q normalerweise numerisch berechnet wird. Mit dem gleichen konvergierenden Faktor $C(k, k')$ wie in drei Dimensionen folgt:

$$\begin{aligned} a_{k_i} &\approx \sum_j w_j V(k_i, k_j) (b_{k_j} - b_{k_i} C(k_i, k_j)) + b_{k_i} \int_0^\infty dk' C(k_i, k') V(k_i, k') \\ &= \sum_j w_j V(k_i, k_j) (b_{k_j} - b_{k_i} C(k_i, k_j)) + b_{k_i} I(k_i) \\ &= \sum_j V_{ij} b_{k_j}. \end{aligned}$$

Das Integral

$$I(k) = \int_0^\infty dk' C(k, k') V(k, k')$$

muss dann auch numerisch ausgewertet werden. Die Coulomb-Matrix lautet:

$$V_{ij} = \begin{cases} V(k_i, k_j) & \text{für } i \neq j \\ -\sum_{l \neq i} V_{il} C(k_i, k_l) + I(k_i) & \text{für } i = j \end{cases}$$

9.4 **k · p**-Parameter

In Tabelle 9.1 sind die **k · p**-Parameter für die Nitride aus Ref. [39] von Vurgaftman et. al. dargestellt. Für ein Material der Form $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ werden die Parameter durch lineare Interpolation bestimmt:

$$p_{x,y} = (1 - x - y)p_{\text{GaN}} + xp_{\text{AlN}} + yp_{\text{InN}}.$$

Für manche Größen, wie beispielsweise die Bandlücke, ist die Berücksichtigung quadratischer Terme wichtig:

$$p_{x,y} = (1 - x - y)p_{\text{GaN}} + xp_{\text{AlN}} + yp_{\text{InN}} + (1 - x - y)xb_{\text{AlGa}} + (1 - x - y)yb_{\text{InGa}} + xyb_{\text{AlIn}}.$$

Die Größen b_{AlGa} werden als Bowing-Parameter bezeichnet und sind in Tabelle 9.2 aufgeführt. Für die temperaturabhängige Bandlücke wird die folgende Formel verwendet:

$$E_G = E_G^0 - \alpha \frac{T^2}{\beta + T}.$$

		GaN	InN	AlN
a	Gitterkonstante	0.3189 nm	0.3545 nm	0.3112 nm
c	Gitterkonstante	0.5185 nm	0.5703 nm	0.4982 nm
m_e^z	Elektronenmasse senkrecht	0.2 m_0	0.07 m_0	0.3 m_0
m_e^p	Elektronenmasse parallel	0.21 m_0	0.07 m_0	0.32 m_0
A_1		-7.21	-8.21	-3.86
A_2		-0.44	-0.68	-0.25
A_3		6.68	7.57	3.58
A_4		-3.46	-5.23	-1.32
A_5		-3.4	-5.11	-1.47
A_6		-4.9	-5.96	-1.64
Δ_{cr}		10 meV	24 meV	-227 meV
Δ_{so}		17 meV	5 meV	36 meV
$E_{px} = E_{pz} = E_p$	Optisches Matrixelement	19.8 eV	11.4 eV	13.6 eV
E_G^0	Bandlücke	3510 meV	690 meV	6100 meV
α	Bandlückenparameter	0.914 meVK ⁻¹	0.414 meVK ⁻¹	2.63 meVK ⁻¹
β	Bandlückenparameter	825 K	154 K	2082 K
ϵ	Dielektrische Funktion	9.7	14.4	9.14
D_1		-3.6 eV	-3.6 eV	-2.9 eV
D_2		1.7 eV	1.7 eV	4.9 eV
D_3		5.2 eV	5.2 eV	9.4 eV
D_4		-2.7 eV	-2.7 eV	-4 eV
D_5		-2.8 eV	-2.8 eV	-3.3 eV
D_6		-4.3 eV	-4.3 eV	-2.7 eV
a_{cz}		-7.1 eV	-4.2 eV	-3.4 eV
a_{ct}		-9.9 eV	-4.2 eV	-11.8 eV
d_{13}		-1.0 pmV ⁻¹	-3.5 pmV ⁻¹	-2.1 pmV ⁻¹
d_{33}		1.9 pmV ⁻¹	7.6 pmV ⁻¹	5.4 pmV ⁻¹
P_{sp}		-0.034 Cm ⁻²	-0.042 Cm ⁻²	-0.090 Cm ⁻²
C_{11}		390 GPa	223 GPa	396 GPa
C_{12}		145 GPa	115 GPa	137 GPa
C_{13}		106 GPa	92 GPa	108 GPa
C_{33}		398 GPa	224 GPa	373 GPa

Tabelle 9.1: **k · p**-Parameter für die verschiedenen Nitride, aus Ref. [39]

		InGaN	AlGaN	AlInN
E_G^0	Bandlücke	3510 meV	690 meV	6100 meV
α	Bandlückenparameter	0.914 meVK ⁻¹	0.414 meVK ⁻¹	2.63 meVK ⁻¹
β	Bandlückenparameter	825 K	154 K	208 K
P_{sp}		-0.034 Cm ⁻²	-0.042 Cm ⁻²	-0.090 Cm ⁻²

Tabelle 9.2: Bowing-Parameter für die verschiedenen Nitride, aus Ref. [39]

9.5 Parametrisierung der dielektrischen Funktion

Bei der Bestimmung der Waveguide-Moden wird die frequenzabhängige dielektrische Funktion für die verschiedenen Nitrid-Legierungen benötigt. Eine mögliche Parametrisierung geht auf Goldhahn et. al.[98] zurück, welche die Parameter auch an experimentelle Daten angepasst haben. Realteil und Imaginärteil haben hierbei die Form

$$\begin{aligned} \text{Im}\epsilon(\omega) &= \sum_{j \in A, B} \frac{A_{BS} \hbar \omega \Gamma_{BS}}{((E_j - R)^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_{BS})^2} + \sum_{j \in A, B} \frac{A_{CS}}{\hbar \omega} \frac{1 + \text{erf}[(\hbar \omega - E_j)/\Gamma_{CS}]}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{R}/(\hbar \omega - E_j))} \\ &\quad + \sum_{j \in D, 1, 2, 3} \frac{A_j \hbar \omega \Gamma_j}{(E_j^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_j)^2} \left[\theta(E_j - \hbar \omega) \frac{\hbar \omega - E_A}{E_j - E_A} + \theta(\hbar \omega - E_j) \right], \\ \text{Re}\epsilon(\omega) &= b + \sum_{j \in A, B} \frac{A_{BS} ((E_j - R)^2 - \hbar^2 \omega^2)}{((E_j - R)^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_{BS})^2} + \sum_{j \in D, 1, 2, 3} \frac{A_j (E_j^2 - \hbar^2 \omega^2)}{(E_j^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_j)^2} \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ A_0 \ln \frac{E_P^2 - (\hbar \omega + i\Gamma_0)^2}{E_A^2 - (\hbar \omega + i\Gamma_0)^2} + \frac{A_P \cdot E_P}{E_P^2 - (\hbar \omega + i\Gamma_0)^2} \right\}. \end{aligned}$$

Die Werte für die verschiedenen Parameter sind in Tabelle 9.3 aufgeführt. Um bei Legierungen die Interpolation zu verbessern, werden wie bei den $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Parametern hier auch Bowling-Parameter verwendet. Die Bowling-Parameter der Energien sind in Tabelle 9.4 dargestellt. Die Bowling-Parameter der Verbreiterungen Γ und Amplituden A können dann folgendermaßen berechnet werden, hier gezeigt für den Bowling-Parameter der Verbreiterung Γ und für die Interpolation zwischen GaN und InN:

$$b_\Gamma = \frac{\Gamma_{\text{GaN}} - \Gamma_{\text{InN}}}{E_{\text{GaN}} - E_{\text{InN}}} b_E.$$

	InN	GaN	AlN
R	8 meV	25 meV	50 meV
E_A	0.68 eV	3.447 eV	6.213 eV
E_B	0.685 eV	3.452 eV	6.227 eV
A_{BS}	0 eV ²	0.082 eV ²	0.462 eV ²
Γ_{BS}	0 eV	0.037 eV	0.080 eV
A_{CS}	0.290 eV	1.163 eV	3.411 eV
Γ_{CS}	0.030 eV	0.033 eV	0.055 eV
A_0	2.166	1.612	1.897
Γ_0	0.039 eV	0.022 eV	0.030 eV
A_P	164.2 eV	69.54 eV	118.3 eV
E_P	14.47 eV	13.43 eV	14.46 eV
E_D	4.82 eV	6.360 eV	8.207 eV
Γ_D	0.647 eV	1.686 eV	0.684 eV
A_D	8.442 eV ²	12.03 eV ²	17.06 eV ²
E_1	5.37 eV	6.940 eV	7.800 eV
Γ_1	0.725 eV	0.626 eV	0.510 eV
A_1	17.97 eV ²	31.81 eV ²	21.16 eV ²
E_2	6.09 eV	7.907 eV	8.950 eV
Γ_2	0.983 eV	0.924 eV	1.335 eV
A_2	14.43 eV ²	30.84 eV ²	62.12 eV ²
E_3	7.95 eV	9.214 eV	8.841 eV
Γ_3	1.167 eV	1.838 eV	1.838 eV
A_3	15.47 eV ²	63.27 eV ²	0 eV ²
b	-1.526	-0.041	-0.929

Tabelle 9.3: Parameter für die verschiedenen Nitride für die dielektrische Funktion, aus Ref. [98]

	b_A	b_D	b_1	b_2	b_3
InGaN	1.77 eV	0.97 eV	1.03 eV	1.10 eV	0.79 eV
InAlN	4.0 eV	0.0 eV	1.8 eV	2.7 eV	0.0 eV
AlGaN	0.9 eV	0.0 eV	0.2 eV	0.1 eV	0.5 eV

Tabelle 9.4: Bowling-Parameter für die verschiedenen Nitride für die dielektrische Funktion, aus Ref. [98]

9.6 Parametrisierung der Mobilität

Bei den Drift-Diffusions-Gleichungen spielt die Mobilität der Ladungsträger eine wichtige Rolle. Die Mobilität hängt von der Ladungsträgerdichte und auch von der Temperatur ab. Das in dieser Arbeit verwendete Modell stammt von Mnatsakanov et. al. und ist in Ref. [137] beschrieben. Die Mobilität lautet hier

$$\mu^M = \frac{\mu_{\max}^M f \left(\frac{T_0}{T} \right)^\beta}{1 + f \left(\frac{T_0}{T} \right)^{\alpha+\beta}},$$

mit dem Faktor

$$f = \frac{\mu_{\min}^M + \mu_{\max}^M \left(\frac{n_g}{n} \right)^\gamma}{\mu_{\max}^M - \mu_{\min}^M}.$$

	Elektronen	Löcher
μ_{\min}^M	55 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹	3.0 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹
μ_{\max}^M	1000 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹	170 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹
n_g	2 × 10 ¹⁷ cm ⁻²	3 × 10 ¹⁷ cm ⁻²
T_0	300 K	300 K
α	2.0	5.0
β	0.0	0.0
γ	1.0	2.0

Tabelle 9.5: Mobilitätsparameter aus Ref. [137] für GaN

9.7 Beispielstruktur der Laserdiode

Um die Theorie und die Simulationen zu untersuchen, wird eine Beispielstruktur benötigt. In dieser Arbeit wird dazu die mit GN6198 bezeichnete Schichtstruktur aus der Dissertation von T. Weig[138] verwendet, diese ist in leicht veränderter Form in Tabelle 9.6 angegeben. So wurde in Ref. [138] die Dotierung nicht genau angegeben, daher wurden hier Werte in einer realistischen Größenordnung angenommen. Der Indium-Anteil wurde außerdem so gewählt, sodass die Laser-Wellenlänge den experimentellen Werten ähnlich ist.

Die ersten zwei Schichten gehören zum Steg und besitzen daher eine Breite w_{Steg} . Die letzte Schicht stellt das Substrat dar und besitzt in der Simulation eine Breite von w_{Substrat} . Alle anderen Schichten besitzen eine Breite von w_{Diode} . In der Drift-Diffusions-Simulation wird der n-Kontakt mit einem Abstand d_{Kontakt} am oberen Rand des Substrat angebracht.

Für die Lösung der Eigenwertgleichung der Modenfunktionen wird die dielektrische Funktionen der einzelnen Schichten benötigt. Für alle Materialien außer den Quantenfilmen wird die Parametrisierung aus Ref. [98] verwendet, welche in Kapitel 9.5 beschrieben wird. Für die Quantenfilme wird die Suszeptibilität aus Kapitel 3.9 mit den Parametern aus Tabelle 9.17 und einer Referenzdichte von $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ verwendet. Da in dieser Suszeptibilität nur die Beiträge der energetisch-höchsten Valenzbänder und des ersten Leitungsbandes enthalten sind, wird die dielektrische Funktion des umliegenden Materials bei einer Frequenz von $\hbar\omega = E_G - 100 \text{ meV}$ hinzugefügt.

Dicke	Funktion	Material	Dotierung
55 nm	<i>p</i> -Kontakt	GaN	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$
340 nm	<i>p</i> -Mantelschicht	$\text{Al}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$
10 nm	“Electron Blocking Layer” (EBL)	$\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$
15 nm	<i>p</i> -Wellenleiter	GaN	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$
50 nm	Wellenleiter	GaN	0 cm^{-2}
13 nm	Wellenleiter	$\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$	0 cm^{-2}
2 nm	Quantenfilm	$\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$	0 cm^{-2}
8 nm	Barriere	$\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$	0 cm^{-2}
2 nm	Quantenfilm	$\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$	0 cm^{-2}
13 nm	Wellenleiter	$\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$	0 cm^{-2}
115 nm	<i>n</i> -Wellenleiter	GaN	$-1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$
1300 nm	<i>n</i> -Mantelschicht	$\text{Al}_{0.06}\text{Ga}_{0.94}\text{N}$	$-1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$
4000 nm	Substrat	GaN	$-1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$

Tabelle 9.6: Beispiel einer Laserdiodenstruktur, die Anzahl und der Indium-Anteil der Quantenfilme ist hier variabel. Die Breite der ersten beiden Schichten wird durch die Stegbreite bestimmt, bis auf die unterste Schicht werden die Breiten der anderen Schichten durch die Laserdiodenbreite bestimmt. Die unterste Schicht ist das Substrat und ist über die ganze Simulationszelle ausgedehnt.

9.7.1 Struktur A

w_{Steg}	Stegbreite	2 μm
w_{Diode}	Breite der Diode	10 μm
w_{Substrat}	Breite des Substrats in der Simulation	20 μm
d_{Kontakt}	Abstand des n -Kontakts	2 μm
L	Länge der Diode	600 μm
n_{QW}	Anzahl an Quantenfilmen	1

Tabelle 9.7: Geometrie-Parameter für Struktur A

9.7.2 Struktur B

w_{Steg}	Stegbreite	2 μm
w_{Diode}	Breite der Diode	10 μm
w_{Substrat}	Breite des Substrats in der Simulation	20 μm
d_{Kontakt}	Abstand des n -Kontakts	2 μm
L	Länge der Diode	600 μm
n_{QW}	Anzahl an Quantenfilmen	2

Tabelle 9.8: Geometrie-Parameter für Struktur B

9.7.3 Struktur C

w_{Steg}	Stegbreite	10 μm
w_{Diode}	Breite der Diode	30 μm
w_{Substrat}	Breite des Substrats in der Simulation	40 μm
d_{Kontakt}	Abstand des n -Kontakts	2 μm
L	Länge der Diode	600 μm
n_{QW}	Anzahl an Quantenfilmen	1

Tabelle 9.9: Geometrie-Parameter für Struktur C

9.8 Weitere Parameter

m_e	Masse der Leitungsbandelektronen	$0.2m_0$
m_h	Masse der Löcher im Valenzband	$1.0m_0$
E_G	Bandlücke	2.4 eV
E_p	Optisches Matrix-Element im Bulk-Material	14 eV
S	Überlapp von Elektron- und Lochwellenfunktionen	0.5
T	Temperatur	300 K
τ_s	Streuzeit	100 fs
γ	Dephasierungskonstante	30 meV
n_{Pump}	Pump-Ladungsträgerdichte	10^{19}cm^{-2}

Tabelle 9.10: Parameter für die Bandstruktur mit effektiven Massen und einfachen Streutermen

n_{eff}	Effektiver Brechungsindex	2.4
n_{gr}	Gruppenbrechungsindex	2.8
I_t	Kopplungsfaktor	$3.5 \times 10^{-4} \text{ nm}^{-1}$
R_1	Reflektivität von Spiegel 1	1
R_2	Reflektivität von Spiegel 2	0.5
α_{int}	Intrinsische Verluste	10 cm^{-1}
L	Länge der Laserdiode	600 μm
w	Stegbreite	2 μm
δ	Zufälliger Offset der Modenfrequenzen	0.05
η_{inj}	Injektionseffizienz	0.7

Tabelle 9.11: Strukturparameter und andere benötigte Parameter für die Simulationen aus Kapitel 4

c_{In}	Indiumanteil im Quantenfilm	0.22
d_{QW}	Dicke des Quantenfilms	2 nm
n_{eff}	Effektiver Brechungsindex für spontane Emission	2.4
T	Temperatur	300 K
ϵ_r	Dielektrizitätskonstante für Coulomb-Wechselwirkung	9
$\hbar\omega_{\text{LO}}$	Frequenz der longitudinalen optischen Phononen	91 meV
$\tilde{\epsilon}_e$	Dielektrizitätskonstante für Elektron-Phonon-Wechselwirkung	14.45
$\tilde{\epsilon}_h$	Dielektrizitätskonstante für Loch-Phonon-Wechselwirkung	28.88
δ	Verbreiterung in den Streutermen	5 meV
n_{Pump}	Pump-Ladungsträgerdichte	10^{19}cm^{-2}
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste	5 ns
δ_{W}	Verbreiterung in der dynamischen Abschirmung	10 meV

Tabelle 9.12: Parameter für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur eines InGaN Quantenfilms, für das umliegende Material wird GaN verwendet. Für die Berechnung Pump-Besetzungsfunktionen in Gl. (4.1) wird die Bulk- $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur und die Dichte n_{Pump} verwendet. Die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Parameter für die verschiedenen Materialien sind in Kapitel 9.4 dargestellt. Bei der Berechnung der Suszeptibilität und der Modenwechselwirkungsterme werden hier die Streuung mittels Coulomb-Wechselwirkung und die Elektron-Phonon-Streuung berücksichtigt.

c_{In}	Indiumanteil im Quantenfilm	0.22
d_{QW}	Dicke des Quantenfilms	2 nm
n_{eff}	Effektiver Brechungsindex für spontane Emission	2.4
T	Temperatur	300 K
τ_s	Streuzeit	100 fs
γ	Dephasierungskonstante	30 meV
ϵ_r	Dielektrizitätskonstante für Coulomb-Wechselwirkung	9
n_{Pump}	Pump-Ladungsträgerdichte	10^{19}cm^{-2}
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste	5 ns

Tabelle 9.13: Parameter für die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur eines InGaN Quantenfilms, für das umliegende Material wird GaN verwendet. Für die Berechnung Pump-Besetzungsfunktionen in Gl. (4.1) wird die Bulk- $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur und die Dichte n_{Pump} verwendet. Die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Parameter für die verschiedenen Materialien sind in Kapitel 9.4 dargestellt. Anstelle komplizierter Streuterme werden hier eine feste Streuzeit und eine Dephasierungskonstante verwendet.

\tilde{a}	$-6.766 \text{ nm}^2 \text{ps}^{-1}$
\tilde{b}	$3.706 \times 10^{-5} \text{ ps}$
\tilde{I}_0	$2.506 \times 10^{-10} \text{ nm}^{-2} \text{ps}^{-1}$
g_{thr}	0.169 ps^{-1}
τ	389.94 ps
ω_0	3684.25 ps^{-1}
α	$1.404 \text{ nm}^2 \text{ps}$
β	-0.576 nm^2
n_{gr}	2.8
η	0.7
I_{thr}	29.44 mA
L	600 μm
w	2 μm

Tabelle 9.14: Parameter bestimmt aus den Parametern aus Tabelle 9.10 für eine Referenzdichte von $9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

		Lasertiode 1	Lasertiode 2
L	Lange der Lasertiode	300 μm	900 μm
w	Stegbreite	2 μm	2 μm
n_{eff}	Effektiver Brechungsindex	2.4	2.4
n_{gr}	Gruppenbrechungsindex	2.8	2.8
η_{inj}	Injektionseffizienz	0.75	0.75
γ	Dephasierungskonstante	30 meV	30 meV
Γ	Confinement-Faktor	0.005	0.005
d_{QW}	Dicke des Quantenfilms	2 nm	2 nm
c_{In}	Indiumanteil im Quantenfilm	0.2176	0.211
R_1	Reflektivitat von Spiegel 1	0.99	0.99
R_2	Reflektivitat von Spiegel 2	0.96	0.7
α_{int}	Intrinsische Verluste	8.69 cm^{-1}	4.95 cm^{-1}
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste	3630 ns	13 180 ns
τ_{s}	Streuzeit	95 fs	210 fs

Tabelle 9.15: Parameter fur den Vergleich der Simulation mit experimentellen Daten in Kapitel 5.8, siehe auch Ref. [51].

		Lasertiode 1	Lasertiode 2
α_{int}	Intrinsische Verluste	8.45 cm^{-1}	4.67 cm^{-1}
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste	3674 ns	7156 ns

Tabelle 9.16: Verlust-Parameter fur die Simulationen mit den komplizierteren Streutermen in Kapitel 5.8

c_{In}	Indiumanteil im Quantenfilm	0.22
d_{QW}	Dicke des Quantenfilms	2 nm
n_{eff}	Effektiver Brechungsindex fur spontane Emission	2.4
T	Temperatur	300 K
τ_{s}	Streuzeit	100 fs
γ	Dephasierungskonstante	30 meV
ϵ_r	Dielektrizitatskonstante fur Coulomb-Wechselwirkung	9
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste im QW	5 ns
R_1	Reflektivitat von Spiegel 1	1
R_2	Reflektivitat von Spiegel 2	0.5
$n_{\text{Diffusion}}$	Dichte zur Bestimmung der Diffusionskonstante im QW	$1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$
C_e	Elektron-Einfang	1 ps^{-1}
C_h	Loch-Einfang	100 ps^{-1}
τ_e	Nichtradiative Verluste	1 ns
τ_h	Nichtradiative Verluste	1 ns
r_{spont}	Verluste durch spontane Emission	0.01 $\text{nm}^3 \text{ps}^{-1}$
c_e	Auger-Verluste	0.01 $\text{nm}^6 \text{ps}^{-1}$
c_h	Auger-Verluste	0.01 $\text{nm}^6 \text{ps}^{-1}$

Tabelle 9.17: Parameter fur die Drift-Diffusions-Simulationen aus Kapitel 6, die Parameter der Struktur sind in Kapitel 9.7 beschrieben. Die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Parameter fur die verschiedenen Materialien sind in Kapitel 9.4 dargestellt. Anstelle komplizierter Streutermen werden hier eine feste Streuzeit und eine Dephasierungskonstante verwendet. Der Parameter $n_{\text{Diffusion}}$ wird verwendet, um die Diffusionskonstanten $D_{e,h}$ zu berechnen. Dazu werden zunachst die Mobilitaten mit der Parametrisierung aus Kapitel 9.6 bei der Temperatur und der dreidimensionalen Dichte $n_{\text{Diffusion}}/d_{\text{QW}}$ bestimmt. Zur Berechnung der Diffusionskonstanten wird anschlieend die Einstein-Beziehung $D = \mu^M k_B T$ verwendet.

c_{In}	Indium-Anteil im QW	0.22
d_{QW}	Quantenfilmdicke	2 nm
n_0	Referenzdichte im QW	$1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$
T	Temperatur	300 K
γ	Dephasierungskonstante	30 meV
τ_s	Streuzeit	100 fs
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste	5 ns
n_{eff}	Effektiver Brechungsindex	2.4
n_{gr}	Gruppenbrechungsindex	2.8
Γ	Confinement-Faktor	0.01
R_1	Reflektivität von Spiegel 1	1
R_2	Reflektivität von Spiegel 2	0.5
α_{int}	Intrinsische Verluste	10 cm^{-1}
L	Länge der Laserdiode	600 μm
w	Stegbreite	2 μm
η_{inj}	Injektionseffizienz	0.7
ω_0	Referenzfrequenz	3591 ps^{-1}
χ_0	Konstanter Beitrag zur Suszeptibilität	$(1.52 + 0.25i) \text{ nm}$
χ'_0	Ableitung des konstanten Beitrags	$(-0.68 + 0.24i) \text{ nm}^3$
χ_1	Amplitude der Polstelle	$(0.063 - 0.354i) \text{ nm}$
χ'_1	Ableitung der Amplitude	$(-6.67 - 4.06i) \text{ nm}^3$
γ	Imaginärteil der Polstelle	121.651 ps^{-1}
$\Delta\omega$	Realteil der Polstelle	0 ps^{-1}
b	Fitparameter der SE-Verluste	$3.37 \times 10^{-3} \text{ ps}^{-1} \text{ nm}$
β	Anteil der SE-Verluste	5.4×10^{-6}
Φ_0	Startwert für das Feld	$1 \times 10^{-7} \text{ meVnm}^{-1/2}$

Tabelle 9.18: Parameter für die Simulationen mit der Traveling-Wave-Methode in Kapitel 7

m_e	Masse der Leitungsbandelektronen	$0.2m_0$
m_h	Masse der Löcher im Valenzband	$1.0m_0$
E_G	Bandlücke	2.4 eV
E_p	Optisches Matrix-Element im Bulk-Material	14 eV
S	Überlapp von Elektron- und Lochwellenfunktionen	0.5
T	Temperatur	300 K
τ_s	Streuzeit	100 fs
γ	Dephasierungskonstante	30 meV
n_{Pump}	Pump-Ladungsträgerdichte	10^{19} cm^{-2}
d_{QW}	Quantenfilmdicke	2 nm
τ_{nr}	Nichtradiative Verluste	5 ns
n_{eff}	Effektiver Brechungsindex	2.4
n_{gr}	Gruppenbrechungsindex	2.8
Γ	Confinement-Faktor	0.005
R_1	Reflektivität von Spiegel 1	1
R_2	Reflektivität von Spiegel 2	0.5
α_{int}	Intrinsische Verluste	20 cm^{-1}
L	Länge der Laserdiode	600 μm
w	Stegbreite	2 μm
η_{inj}	Injektionseffizienz	0.7
ω_0	Referenzfrequenz	$E_G \hbar^{-1}$
Φ_0	Startwert für das Feld	$1 \times 10^{-5} \text{ meVnm}^{-1/2}$

Tabelle 9.19: Parameter für die Simulationen mit der mikroskopischen Traveling-Wave-Methode in Kapitel 7

N_k	Anzahl an Wellenvektoren in der Bandstruktur	201
k_{\max}	Maximaler Wert des Wellenvektors in der Bandstruktur	4 nm^{-1}
N_φ	Anzahl an Winkeln in den Integralen	30
N_q	Anzahl an Wellenvektoren in der dynamischen Abschirmung	201
q_{\max}	Maximaler Wert des Wellenvektors in der dynamischen Abschirmung	2 nm^{-1}
N_ω	Anzahl an Frequenzen in der dynamischen Abschirmung	201
ω_{\max}	Anzahl an Frequenzen in der dynamischen Abschirmung	$200 \text{ meV } \hbar^{-1}$
L_Z	Länge der Simulationszelle in der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung	8 nm
N_Z	Anzahl an Stützstellen in der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnung	401

Tabelle 9.20: Numerische Parameter für die Simulationen

Abbildungsverzeichnis

1.1	Streak-Camera-Messung einer grünen Nitrid-Laserdiode	10
2.1	Skizze des Querschnitts einer Laserdiode	13
2.2	Transversale Modenfunktionen der schmalen Laserdiode	18
2.3	Frequenzabhängigkeit des Brechungsindex für die schmale Laserdiode	18
2.4	Transversale Modenfunktionen der breiten Laserdiode	19
2.5	Frequenzabhängigkeit des Brechungsindex für die breite Laserdiode	19
2.6	Beispiel für zeitliche Änderung des Brechungsindex im Quantenfilm	21
2.7	Ortsabhängigkeit des effektiven Brechungsindex	24
2.8	Vergleich der 1D-Modenfunktionen der verschiedenen Näherungen	24
2.9	Beispiel der Lösung der Eigenwertgleichung in z -Richtung	24
3.1	Lösung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Schrödingergleichung für Quantenfilm	37
3.2	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstruktur und Coulomb-Formfaktor	38
3.3	Dynamische Abschirmung	41
3.4	Phonon-Formfaktoren	42
3.5	Phonon-Bandstruktur und Elektron-Phonon-Matrixelemente	44
3.6	Elektrische Suszeptibilität für verschiedene Ladungsträgerdichten	46
3.7	Spektren der spontanen Emission für verschiedene Ladungsträgerdichten	51
3.8	Ladungsträgerverluste durch spontane Emission	51
4.1	Abhängigkeit der Injektions-Effizienz von der Ladungsträgerdichte	54
4.2	Schematische Darstellung der Bewegungsgleichungen (4.5).	56
4.3	Imaginärteil der Suszeptibilität für effektive Massen	57
4.4	Imaginärteil der Suszeptibilität für verschiedene Dephasierungskonstanten	60
4.5	Einfluss der Dephasierungskonstante auf die Laserdynamik	61
4.6	Gleichgewichtsverteilungen für verschiedene Streuzeiten	62
4.7	Zeitlicher Verlauf der Temperatur	64
4.8	Abhängigkeit der Leistung von der Stromstärke	64
4.9	Modendynamik ohne Moden-Wechselwirkung	64
4.10	Modendynamik für ortsabhängige Besetzungsfunktionen	68
4.11	Vergleich der Modendynamik für verschiedene Methoden	72
4.12	Einfluss der Phasen der Modenkoeffizienten auf die Modendynamik	72
4.13	Ort- und Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten	73
4.14	Modendynamik für verschiedene Stromstärken	74
4.15	Stromabhängigkeit der Modenrollenfrequenz	74
5.1	Gesamter Modenwechselwirkungsterm für einfache Streuterme	82
5.2	Symmetrischer und asymmetrischer Anteil des Modenwechselwirkungsterms	82
5.3	Modenwechselwirkungsterm für verschiedene Streuzeiten	82
5.4	Modenwechselwirkungsterm für kompliziertere Streuterme	84
5.5	Modenwechselwirkungsterm unter Berücksichtigung der Hartree-Fock-Beiträge	85
5.6	Modenwechselwirkungsterm mit zusätzlicher Streuzeit	85
5.7	Modenwechselwirkungsterm für verschiedene Photonendichten	86
5.8	Abweichung der Besetzungsfunktionen von Fermi-Dirac-Verteilungen	91
5.9	Abweichung der Besetzungsfunktionen für verschiedene Stromstärken	92

5.10	Abweichung der Besetzungsfunktionen für verschiedene Streuzeiten	93
5.11	Änderung der Suszeptibilität am Maximum der optischen Verstärkung für verschiedene Ladungsträgerdichten	93
5.12	Änderung der Suszeptibilität am Maximum der optischen Verstärkung für verschiedene Streuterme	93
5.13	Vergleich der Modendynamik mit vereinfachtem Modell	95
5.14	Stromabhängigkeit der Modenrollenfrequenz für vereinfachtes Modell	96
5.15	Einfluss des asymmetrischen Wechselwirkungsparameters	98
5.16	Einfluss des symmetrischen Wechselwirkungsparameters	98
5.17	Einfluss des Parameters $\tilde{\alpha}$ auf die Modendynamik	99
5.18	Einfluss des Parameters $\tilde{\beta}$ auf die Modendynamik	99
5.19	Kennlinien und Modenrollen-Frequenzen aus Experiment und Simulation	101
5.20	Vergleich der Modendynamik mit experimentellen Ergebnissen	101
5.21	Kennlinien und Modenrollen-Frequenzen für Simulationen mit komplizierteren Streutermen	102
5.22	Modendynamik für Simulation mit komplizierteren Streutermen	102
6.1	Vergleich der verschiedenen statistischen Funktionen	109
6.2	Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen für schmale Laserdiode	114
6.3	Strom-Spannungskurve und Kennlinie für die schmale Laserdiode	115
6.4	Ladungsträgerdichten im Quantenfilm und Stromdichten für die schmale Laserdiode	115
6.5	Stromdichten für verschiedene statistische Funktionen	115
6.6	Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen für die schmale Laserdiode mit zwei Quantenfilmen	116
6.7	Strom-Spannungskurve und Kennlinie für die schmale Laserdiode mit zwei Quantenfilmen	117
6.8	Ladungsträgerdichten im Quantenfilm und Stromdichten für die schmale Laserdiode mit zwei Quantenfilmen	117
6.9	Lösung der Drift-Diffusions-Gleichungen für die breite Laserdiode	118
6.10	Strom-Spannungskurve und Kennlinie für die breite Laserdiode	119
6.11	Ladungsträgerdichten im Quantenfilm und Stromdichten für die breite Laserdiode	119
6.12	Ortsabhängigkeit der transversalen Moden der schmalen Laserdiode	121
6.13	Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten für schmale Laserdiode	121
6.14	Modendynamik der schmalen Laserdiode für kleine Zeiten	122
6.15	Modendynamik der schmalen Laserdiode für große Zeiten	122
6.16	Modendynamik der Laserdiode mit zwei Quantenfilmen	123
6.17	Ortsabhängigkeit der transversalen Moden der breiten Laserdiode	124
6.18	Zeitabhängigkeit der Ladungsträgerdichten für die breite Laserdiode	125
6.19	Zeitlicher Verlauf der Photonenzahlen für breite Laserdiode	125
6.20	Modendynamik der breiten Laserdiode für kleine Zeiten	125
6.21	Modendynamik der breiten Laserdiode für große Zeiten	126
6.22	Modendynamik der breiten Laserdiode an verschiedenen Orten	126
7.1	Schematische Darstellung des Traveling-Wave-Modells	129
7.2	Kurvenanpassung durchgeführt für die Suszeptibilität	133
7.3	Verwendete Diskretisierung der Traveling-Wave-Gleichungen	135
7.4	Verwendete Diskretisierung der Traveling-Wave-Gleichungen	137
7.5	Gleichgewichtszustand des Traveling-Wave-Modells	139
7.6	Modendynamik für verschiedene Stromstärken	140
7.7	Ortsabhängigkeit des Feldes und der Ladungsträgerdichte	141
7.8	Abweichungen der Ladungsträgerdichte von ihrem zeitlichen Mittelwert	142
7.9	Modendynamik für verschiedene Anfangsbedingungen	142
7.10	Modendynamik mit zusätzlichem symmetrischen Kopplungsterm	145
7.11	Modendynamik des mikroskopischen Traveling-Wave-Modells	148
7.12	Besetzungen des mikroskopischen Traveling-Wave-Modells	148

Literatur

- [1] A. Javan, W. R. Bennett und D. R. Herriott, "Population Inversion and Continuous Optical Maser Oscillation in a Gas Discharge Containing a He-Ne Mixture," *Phys. Rev. Lett.*, Jg. 6, S. 106–110, 3 Feb. 1961. DOI: 10.1103/PhysRevLett.6.106.
- [2] W. Fitzsimmons, L. Anderson, C. Riedhauser und J. Vrtilek, "Experimental and Theoretical Investigation of the Nitrogen Laser," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 12, Nr. 10, S. 624–633, 1976. DOI: 10.1109/JQE.1976.1069059.
- [3] A. Ali, A. Kolb und A. Anderson, "Theory of the pulsed molecular nitrogen laser," *Applied Optics*, Jg. 6, Nr. 12, S. 2115–2119, 1967. DOI: 10.1364/AO.6.002115.
- [4] Z. Li und D. Psaltis, "Optofluidic dye lasers," *Microfluidics and Nanofluidics*, Jg. 4, Nr. 1-2, S. 145–158, 2008. DOI: 10.1007/s10404-007-0225-9.
- [5] T. Pavlopoulos, "Scaling of dye lasers with improved laser dyes," *Progress in Quantum Electronics*, Jg. 26, Nr. 4-5, S. 193–224, 2002. DOI: 10.1016/S0079-6727(02)00005-8.
- [6] D. Bradley, "Generation and measurement of frequency-tunable picosecond pulses from dye lasers," *Opto-electronics*, Jg. 6, Nr. 1, S. 25–42, 1974. DOI: 10.1007/BF01421988.
- [7] C. Collins, B. Johnson, D. Popescu, G. Musa, M. Pascu und I. Popescu, "Multiphoton ionization of molecular cesium with a tunable dye laser," *Physical Review A*, Jg. 8, Nr. 4, S. 2197–2201, 1973. DOI: 10.1103/PhysRevA.8.2197.
- [8] P. Moulton, "Ti-doped sapphire: tunable solid-state laser," *Optics News*, Jg. 8, Nr. 6, S. 9–9, Nov. 1982. DOI: 10.1364/ON.8.6.000009.
- [9] P. F. Moulton, "Spectroscopic and laser characteristics of Ti:Al₂O₃," *J. Opt. Soc. Am. B*, Jg. 3, Nr. 1, S. 125–133, Jan. 1986. DOI: 10.1364/JOSAB.3.000125.
- [10] U. Keller, K. Weingarten, F. Kärtner, D. Kopf, B. Braun, I. Jung, R. Fluck, C. Hönninger, N. Matuschek und J. Aus Der Au, "Semiconductor saturable absorber mirrors (SESAM's) for femtosecond to nanosecond pulse generation in solid-state lasers," *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics*, Jg. 2, Nr. 3, S. 435–451, 1996. DOI: 10.1109/2944.571743.
- [11] A. Ikesue, T. Kinoshita, K. Kamata und K. Yoshida, "Fabrication and Optical Properties of High-Performance Polycrystalline Nd:YAG Ceramics for Solid-State Lasers," *Journal of the American Ceramic Society*, Jg. 78, Nr. 4, S. 1033–1040, 1995. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1995.tb08433.x.
- [12] S. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota und S. Nakamura, "Spontaneous emission of localized excitons in InGaN single and multiquantum well structures," *Applied Physics Letters*, Jg. 69, Nr. 27, S. 4188–4190, 1996. DOI: 10.1063/1.116981.
- [13] F. A. I. Chaqmaqchee und J. A. Lott, "Impact of oxide aperture diameter on optical output power, spectral emission, and bandwidth for 980 nm VCSELs," *OSA Continuum*, Jg. 3, Nr. 9, S. 2602–2613, Sep. 2020. DOI: 10.1364/OSAC.397687.
- [14] A. Liu, P. Wolf, J. A. Lott und D. Bimberg, "Vertical-cavity surface-emitting lasers for data communication and sensing," *Photon. Res.*, Jg. 7, Nr. 2, S. 121–136, Feb. 2019. DOI: 10.1364/PRJ.7.000121.
- [15] H. Li, P. Wolf, P. Moser, G. Larisch, A. Mutig, J. Lott und D. Bimberg, "Energy-efficient and temperature-stable oxide-confined 980 nm VCSELs operating error-free at 38 Gbit/s at 85°C," *Electronics Letters*, Jg. 50, Nr. 2, S. 103–105, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1049/el.2013.3941>.
- [16] P. Moser, W. Hofmann, P. Wolf, J. A. Lott, G. Larisch, A. Payusov, N. N. Ledentsov und D. Bimberg, "81 fJ/bit energy-to-data ratio of 850 nm vertical-cavity surface-emitting lasers for optical interconnects," *Applied Physics Letters*, Jg. 98, Nr. 23, S. 231106, 2011. DOI: 10.1063/1.3597799.

- [17] P. Westbergh, R. Safaisini, E. Haglund, J. S. Gustavsson, A. Larsson, M. Geen, R. Lawrence und A. Joel, "High-Speed Oxide Confined 850-nm VCSELs Operating Error-Free at 40 Gb/s up to 85 °C," *IEEE Photonics Technology Letters*, Jg. 25, Nr. 8, S. 768–771, 2013. DOI: 10.1109/LPT.2013.2250946.
- [18] D. M. Kuchta, A. V. Rylyakov, C. L. Schow, J. E. Proesel, C. W. Baks, P. Westbergh, J. S. Gustavsson und A. Larsson, "A 50 Gb/s NRZ Modulated 850 nm VCSEL Transmitter Operating Error Free to 90 °C," *Journal of Lightwave Technology*, Jg. 33, Nr. 4, S. 802–810, 2015. DOI: 10.1109/JLT.2014.2363848.
- [19] A. Larsson, "Advances in VCSELs for Communication and Sensing," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Jg. 17, Nr. 6, S. 1552–1567, 2011. DOI: 10.1109/JSTQE.2011.2119469.
- [20] C.-H. Cheng, W.-C. Lo, B. Su, C.-H. Wu und G.-R. Lin, "Review of VCSELs for Complex Data-Format Transmission Beyond 100-Gbit/s," *IEEE Photonics Journal*, Jg. 13, Nr. 5, S. 1–13, 2021. DOI: 10.1109/JPHOT.2021.3104647.
- [21] N. Ledentsov Jr., E. Chorchos, O. Y. Makarov, V. A. Shchukin, V. P. Kalosha, J.-R. Kropp, J. P. Turkiewicz, C. Kottke, V. Jungnickel, R. Freund und N. N. Ledentsov, "Serial data transmission at 224 Gbit/s applying directly modulated 850 and 910 nm VCSELs," *Electronics Letters*, Jg. 57, Nr. 19, S. 735–737, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1049/e112.12236>.
- [22] Y.-H. Lin, C.-T. Tsai, W.-L. Wu, C.-H. Cheng, K. D. Choquette und G.-R. Lin, "Photonic Crystal Structured Multi-Mode VCSELs Enabling 92-Gbit/s QAM-OFDM Transmission," *Journal of Lightwave Technology*, Jg. 39, Nr. 13, S. 4331–4340, 2021. DOI: 10.1109/JLT.2021.3073898.
- [23] A. Tian, L. Hu, L. Zhang, J. Liu und H. Yang, "Design and growth of GaN-based blue and green laser diodes," *Science China Materials*, Jg. 63, Nr. 8, S. 1348–1363, 2020. DOI: 10.1007/s40843-020-1275-4.
- [24] L. Jiang, J. Liu, A. Tian, Y. Cheng, Z. Li, L. Zhang, S. Zhang, D. Li, M. Ikeda und H. Yang, "GaN-based green laser diodes," *Journal of Semiconductors*, Jg. 37, Nr. 11, S. 111 001, Nov. 2016. DOI: 10.1088/1674-4926/37/11/111001.
- [25] Y. Nakatsu, Y. Nagao, K. Kozuru, T. Hirao, E. Okahisa, S. Masui, T. Yanamoto und S.-I. Nagahama, "High-efficiency blue and green laser diodes for laser displays," *Proc. SPIE*, Jg. 10918, 2019. DOI: 10.1117/12.2505309.
- [26] N. Shimada, M. Yukawa, K. Shibata, K. Ono, T. Yagi und A. Shima, "640-nm laser diode for small laser display," *Proc. SPIE*, Jg. 7198, 2009. DOI: 10.1117/12.808710.
- [27] S. Masui, T. Miyoshi, T. Yanamoto und S.-I. Nagahama, "Blue and green laser diodes for large laser display," *Proc. CLEOPR*, 2013. DOI: 10.1109/CLEOPR.2013.6599913.
- [28] D. Queren, A. Avramescu, G. Brüderl, A. Breidenassel, M. Schillgalies, S. Lutgen und U. Strauß, "500 nm electrically driven InGaN based laser diodes," *Applied Physics Letters*, Jg. 94, Nr. 8, S. 081 119, 2009. DOI: 10.1063/1.3089573.
- [29] S. Lutgen, D. Dini, I. Pietzonka, S. Tautz, A. Breidenassel, A. Lell, A. Avramescu, C. Eichler, T. Lerner, J. Müller, G. Brüderl, A. Gomez, U. Strauss, W. G. Scheibenzuber, U. T. Schwarz, B. Pasenow und S. Koch, "Recent results of blue and green InGaN laser diodes for laser projection," *Proc. SPIE*, Jg. 7953, 2011. DOI: 10.1117/12.874757.
- [30] J. Raring, M. Schmidt, C. Poblentz, M. Mondry, P. Rudy, J. Speck, S. DenBaars und S. Nakamura, "47.1: Invited paper: Progress in green and blue laser diodes and their application in pico projection systems," *Digest of Technical Papers - SID International Symposium*, Jg. 42 1, S. 677–680, 2011. DOI: 10.1889/1.3621414.
- [31] J. Wierer, J. Tsao und D. Sizov, "Comparison between blue lasers and light-emitting diodes for future solid-state lighting," *Laser and Photonics Reviews*, Jg. 7, Nr. 6, S. 963–993, 2013. DOI: 10.1002/lpor.201300048.
- [32] Y.-C. Chi, D.-H. Hsieh, C.-T. Tsai, H.-Y. Chen, H.-C. Kuo und G.-R. Lin, "450-nm GaN laser diode enables high-speed visible light communication with 9-Gbps QAM-OFDM," *Opt. Express*, Jg. 23, Nr. 10, S. 13 051–13 059, Mai 2015. DOI: 10.1364/OE.23.013051.
- [33] H. König, S. Gerhard, M. Ali, U. Heine, S. Tautz, C. Eichler, G. Brüderl, M. Peter, A. Lell, M. Behringer, M. Keidler, T. Haupteltshofer, C. Walter, M. Baumann, A. Balck und V. Krause, "Blue high power InGaN semiconductor laser diodes: Design optimization of laser bars and single emitters for best performance and reliability," *Proc. SPIE*, Jg. 11262, 2020. DOI: 10.1117/12.2543306.

- [34] T.-C. Wu, Y.-C. Chi, H.-Y. Wang, C.-T. Tsai und G.-R. Lin, "Blue laser diode enables underwater communication at 12.4 Gbps," *Scientific Reports*, Jg. 7, 2017. DOI: 10.1038/srep40480.
- [35] H. Oubei, C. Li, K.-H. Park, T. Ng, M.-S. Alouini und B. Ooi, "2.3 Gbit/s underwater wireless optical communications using directly modulated 520 nm laser diode," *Optics Express*, Jg. 23, Nr. 16, S. 20 743–20 748, 2015. DOI: 10.1364/OE.23.020743.
- [36] X. Liu, S. Yi, X. Zhou, Z. Fang, Z.-J. Qiu, L. Hu, C. Cong, L. Zheng, R. Liu und P. Tian, "34.5 m underwater optical wireless communication with 2.70 Gbps data rate based on a green laser diode with NRZ-OOK modulation," *Optics Express*, Jg. 25, Nr. 22, S. 27 937–27 947, 2017. DOI: 10.1364/OE.25.027937.
- [37] F. Ponce und D. Bour, "Nitride-based semiconductors for blue and green light-emitting devices," *Nature*, Jg. 386, Nr. 6623, S. 351–359, 1997. DOI: 10.1038/386351a0.
- [38] I. Vurgaftman und J. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors," *Journal of Applied Physics*, Jg. 94, Nr. 6, S. 3675–3696, 2003. DOI: 10.1063/1.1600519.
- [39] I. Vurgaftman und J. R. Meyer, "Electron Bandstructure Parameters," in *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*. John Wiley & Sons, Ltd, 2007, Kap. 2, S. 13–48, ISBN: 9783527610723. DOI: <https://doi.org/10.1002/9783527610723.ch2>.
- [40] I. Akasaki, H. Amano, K. Itoh, N. Koide und K. Manabe, "GaN-based ultraviolet/blue light emitting devices," in *Inst. Phys. Conf. Ser.*, Bd. 129, 1992, S. 851. DOI: 10.1109/JPROC.2013.2274928.
- [41] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh und N. Iwasa, "Thermal Annealing Effects on P-Type Mg-Doped GaN Films," *Japanese Journal of Applied Physics*, Jg. 31, Nr. Part 2, No. 2B, S. L139–L142, Feb. 1992. DOI: 10.1143/jjap.31.1139.
- [42] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu und I. Akasaki, "P-Type Conduction in Mg-Doped GaN Treated with Low-Energy Electron Beam Irradiation (LEEBI)," *Japanese Journal of Applied Physics*, Jg. 28, Nr. Part 2, No. 12, S. L2112–L2114, Dez. 1989. DOI: 10.1143/jjap.28.12112.
- [43] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, S.-i. Nagahama und N. Iwasa, "In_xGa_{1-x}N/In_yGa_{1-y}N superlattices grown on GaN films," *Journal of Applied Physics*, Jg. 74, Nr. 6, S. 3911–3915, 1993. DOI: 10.1063/1.354486.
- [44] S. Nakamura, T. Mukai und M. Senoh, "Candela-class high-brightness InGaN/AlGaN double-heterostructure blue-light-emitting diodes," *Applied Physics Letters*, Jg. 64, Nr. 13, S. 1687–1689, 1994. DOI: 10.1063/1.111832.
- [45] S. Nakamura, M. Senoh, S.-i. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku und Y. Sugimoto, "InGaN-Based Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes," Jg. 35, Nr. Part 2, No. 1B, S. L74–L76, Jan. 1996. DOI: 10.1143/jjap.35.174.
- [46] S. Nakamura, M. Senoh, S.-i. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku und Y. Sugimoto, "Characteristics of InGaN multi-quantum-well-structure laser diodes," *Applied Physics Letters*, Jg. 68, Nr. 23, S. 3269–3271, 1996. DOI: 10.1063/1.116570.
- [47] K. Itaya, M. Onomura, J. Nishio, L. Sugiura, S. Saito, M. Suzuki, J. Rennie, S.-y. Nunoue, M. Yamamoto, H. Fujimoto, Y. Kokubun, Y. Ohba, G.-i. Hatakoshi und M. Ishikawa, "Room Temperature Pulsed Operation of Nitride Based Multi-Quantum-Well Laser Diodes with Cleaved Facets on Conventional C-Face Sapphire Substrates," *Japanese Journal of Applied Physics*, Jg. 35, Nr. Part 2, No. 10B, S. L1315–L1317, Okt. 1996. DOI: 10.1143/jjap.35.11315.
- [48] Y. Enya, Y. Yoshizumi, T. Kyono, K. Akita, M. Ueno, M. Adachi, T. Sumitomo, S. Tokuyama, T. Ikegami, K. Katayama und T. Nakamura, "531 nm Green Lasing of InGaN Based Laser Diodes on Semi-Polar {20₂1} Free-Standing GaN Substrates," Jg. 2, S. 082 101, Juli 2009. DOI: 10.1143/apex.2.082101.
- [49] T. Miyoshi, S. Masui, T. Okada, T. Yanamoto, T. Kozaki, S.-i. Nagahama und T. Mukai, "510–515 nm InGaN-Based Green Laser Diodes on c-Plane GaN Substrate," *Applied Physics Express*, Jg. 2, Juni 2009. DOI: 10.1143/APEX.2.062201.
- [50] U. T. Schwarz und W. G. Scheibenzuber, "The Green Laser Diode: Completing the Rainbow," *Opt. Photon. News*, Jg. 22, Nr. 9, S. 38–44, Sep. 2011. DOI: 10.1364/OPN.22.9.000038.
- [51] E. Kuhn, L. Uhlig, M. Wachs, U. Schwarz und A. Thränhardt, "Mode rolling effects in nitride laser diodes," *Engineering Research Express*, Jg. 2, Nr. 3, 2020. DOI: 10.1088/2631-8695/abb6c8.

- [52] H. Soda, Y. Kotaki, H. Sudo, H. Ishikawa, S. Yamakoshi und H. Imai, "Stability in Single Longitudinal Mode Operation in GaInAsP/InP Phase-Adjusted DFB Lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 23, Nr. 6, S. 804–814, 1987. DOI: 10.1109/JQE.1987.1073454.
- [53] T. Weig, T. Hager, G. Brüderl, U. Strauss und U. T. Schwarz, "Longitudinal mode competition and mode clustering in (Al,In)GaN laser diodes," *Optics Express*, Jg. 22, Nr. 22, S. 27 489, Okt. 2014. DOI: 10.1364/oe.22.027489.
- [54] T. Weig, H. Höck, K. Holc, K. Köhler, J. Wagner und U. T. Schwarz, "Implementation and investigation of mode locking in GaN-based laser diodes in external cavity configuration," *physica status solidi (a)*, Jg. 212, Nr. 5, S. 986–991, 2015. DOI: 10.1002/pssa.201431682.
- [55] L. Uhlig, M. Wachs, D. Kunzmann und U. Schwarz, "Spectral-temporal dynamics of (Al,In) GaN laser diodes," *Optics Express*, Jg. 28, Nr. 2, S. 1771–1789, 2020. DOI: 10.1364/OE.382257.
- [56] M. Yamada, "Theoretical analysis of nonlinear optical phenomena taking into account the beating vibration of the electron density in semiconductor lasers," *Journal of Applied Physics*, Jg. 66, Nr. 1, S. 81–89, Juli 1989. DOI: 10.1063/1.343860.
- [57] M. Yamada, "Transverse and longitudinal mode control in semiconductor injection lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 19, Nr. 9, S. 1365–1380, Sep. 1983. DOI: 10.1109/jqe.1983.1072059.
- [58] M. Ahmed und M. Yamada, "Influence of instantaneous mode competition on the dynamics of semiconductor lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 38, Nr. 6, S. 682–693, Juni 2002. DOI: 10.1109/jqe.2002.1005419.
- [59] M. Ahmed, M. Yamada und M. Saito, "Numerical modeling of intensity and phase noise in semiconductor lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 37, Nr. 12, S. 1600–1610, 2001. DOI: 10.1109/3.970907.
- [60] M. Yamada, "Theory of mode competition noise in semiconductor injection lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 22, Nr. 7, S. 1052–1059, Juli 1986. DOI: 10.1109/jqe.1986.1073087.
- [61] M. Ahmed, "Theoretical Modeling of Intensity Noise in InGaN-Semiconductor Lasers," *The Scientific World Journal*, Jg. 2014, S. 475 423, Juli 2014. DOI: 10.1155/2014/475423.
- [62] H. Haug und S. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scientific, 2009, ISBN: 9789812838834.
- [63] M. Lindberg und S. W. Koch, "Effective Bloch equations for semiconductors," *Phys. Rev. B*, Jg. 38, S. 3342–3350, 5 Aug. 1988. DOI: 10.1103/PhysRevB.38.3342.
- [64] O. Hess und T. Kuhn, "Maxwell-Bloch equations for spatially inhomogeneous semiconductor lasers. I. Theoretical formulation," *Physical Review A*, Jg. 54, Nr. 4, S. 3347–3359, Okt. 1996. DOI: 10.1103/physreva.54.3347.
- [65] S. Koch, T. Meier, F. Jahnke und P. Thomas, "Microscopic theory of optical dephasing in semiconductors," *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, Jg. 71, Nr. 5, S. 511–517, 2000. DOI: 10.1007/s003390000707.
- [66] T. Nielsen, P. Gartner und F. Jahnke, "Many-body theory of carrier capture and relaxation in semiconductor quantum-dot lasers," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, Jg. 69, Nr. 23, S. 235314-1-235314-13, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.235314.
- [67] W. Schäfer und M. Wegener, *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*, Ser. Advanced Texts in Physics. Springer, 2002, ISBN: 9783540616146. DOI: 10.1007/978-3-662-04663-0.
- [68] M. Kira, F. Jahnke und S. W. Koch, "Microscopic Theory of Excitonic Signatures in Semiconductor Photoluminescence," *Phys. Rev. Lett.*, Jg. 81, S. 3263–3266, 15 Okt. 1998. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3263.
- [69] T. Nielsen, P. Gartner, M. Lorke, J. Seebeck und F. Jahnke, "Coulomb scattering in nitride-based self-assembled quantum dot systems," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, Jg. 72, Nr. 23, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.235311.
- [70] M. Lorke, T. Nielsen, J. Seebeck, P. Gartner und F. Jahnke, "Influence of carrier-carrier and carrier-phonon correlations on optical absorption and gain in quantum-dot systems," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, Jg. 73, Nr. 8, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.085324.

- [71] F. Jahnke und S. W. Koch, "Theory of carrier heating through injection pumping and lasing in semiconductor microcavity lasers," *Opt. Lett.*, Jg. 18, Nr. 17, S. 1438–1440, Sep. 1993. DOI: 10.1364/OL.18.001438.
- [72] P. Gartner, J. Seebeck und F. Jahnke, "Ultrafast quantum kinetics of carrier-LO-phonon interaction in quantum dots and quantum wells," in *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science Conference and Photonic Applications Systems Technologies*, Optica Publishing Group, 2006. DOI: 10.1109/CLEO.2006.4629132.
- [73] A. Girndt, F. Jahnke, A. Knorr, S. Koch und W. Chow, "Multi-band bloch equations and gain spectra of highly excited II-VI semiconductor quantum wells," *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, Jg. 202, Nr. 2, S. 725–739, 1997. DOI: 10.1002/1521-3951(199708)202:2<725::AID-PSSE725>3.0.CO;2-K.
- [74] C. Ellmers, A. Girndt, M. Hofmann, A. Knorr, W. Rühle, F. Jahnke, S. Koch, C. Hanke, L. Korte und C. Hoyler, "Measurement and calculation of gain spectra for (GaIn)As/(AlGa)As single quantum well lasers," *Applied Physics Letters*, Jg. 72, Nr. 13, S. 1647–1649, 1998. DOI: 10.1063/1.121140.
- [75] A. Rossetto, V. Camargo, D. Vasileska und G. Wirth, "3-D non-isothermal particle-based device simulator for p-type MOSFETs," *Journal of Computational Electronics*, Jg. 20, Nr. 5, S. 1644–1656, 2021. DOI: 10.1007/s10825-021-01740-5.
- [76] A. Svizhenko, M. Anantram, T. Govindan, B. Biegel und R. Venugopal, "Two-dimensional quantum mechanical modeling of nanotransistors," *Journal of Applied Physics*, Jg. 91, Nr. 3, S. 2343–2354, 2002. DOI: 10.1063/1.1432117.
- [77] T. Koprucki und K. Gärtner, "Discretization scheme for drift-diffusion equations with strong diffusion enhancement," *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 45, Nr. 7, S. 791–796, 2013. DOI: 10.1007/s11082-013-9673-5.
- [78] D. Scharfetter und H. Gummel, "Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator," *IEEE Transactions on Electron Devices*, Jg. 16, Nr. 1, S. 64–77, 1969. DOI: 10.1109/T-ED.1969.16566.
- [79] O. W. Purbo, D. T. Cassidy und S. H. Chisholm, "Numerical model for degenerate and heterostructure semiconductor devices," *Journal of Applied Physics*, Jg. 66, Nr. 10, S. 5078–5082, 1989. DOI: 10.1063/1.343733.
- [80] J. Sutherland und J. Hauser, "A computer analysis of heterojunction and graded composition solar cells," *IEEE Transactions on Electron Devices*, Jg. 24, Nr. 4, S. 363–372, 1977. DOI: 10.1109/T-ED.1977.18742.
- [81] A. Nakagawa, "One-dimensional device model of the npn bipolar transistor including heavy doping effects under fermi statistics," *Solid-State Electronics*, Jg. 22, Nr. 11, S. 943–949, 1979, ISSN: 0038-1101. DOI: [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(79\)90067-4](https://doi.org/10.1016/0038-1101(79)90067-4).
- [82] A. Tibaldi, F. Bertazzi, M. Goano, R. Michalzik und P. Debernardi, "VENUS: A Vertical-Cavity Surface-Emitting Laser Electro-Opto-Thermal NUMerical Simulator," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Jg. 25, Nr. 6, 2019. DOI: 10.1109/JSTQE.2019.2893755.
- [83] A. Tibaldi, J. González Montoya, F. Bertazzi, M. Goano, M. Daubenschütz, R. Michalzik und P. Debernardi, "Bridging scales in multiphysics VCSEL modeling," *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 51, Nr. 7, 2019. DOI: 10.1007/s11082-019-1931-8.
- [84] A. Tibaldi, J. A. González Montoya, F. Bertazzi, M. Goano, M. Daubenschütz, R. Michalzik und P. Debernardi, "Bridging scales in multiphysics VCSEL modeling," *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 51, Nr. 7, S. 231, Juni 2019, ISSN: 1572-817X. DOI: 10.1007/s11082-019-1931-8.
- [85] A. Bercha, P. Adamiec, F. Dybala, R. Bohdan und W. Trzeciakowski, "Effect of pressure and temperature on AlGaInP and AlGaAs laser diodes," in *Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XI*, M. Osinski, H. Amano und P. Blood, Hrsg., International Society for Optics und Photonics, Bd. 4986, SPIE, 2003, S. 613–620. DOI: 10.1117/12.498045.
- [86] W. B. Joyce, "Carrier transport in double-heterostructure active layers," *Journal of Applied Physics*, Jg. 53, Nr. 11, S. 7235–7239, 1982. DOI: 10.1063/1.331621.
- [87] J. Piprek, R. Sink, M. A. Hansen, J. E. Bowers und S. P. DenBaars, "Simulation and optimization of 420 nm InGaIn/GaN laser diodes," *Proc. SPIE*, Jg. 3944, 2000.

- [88] B. Witzigmann, A. Witzig und W. Fichtner, "A multidimensional laser simulator for edge-emitters including quantum carrier capture," *IEEE Transactions on Electron Devices*, Jg. 47, Nr. 10, S. 1926–1934, Okt. 2000. DOI: 10.1109/16.870574.
- [89] J. J. Lim, S. Sujecki, L. Lang, Z. Zhang, D. Paboeuf, G. Pauliat, G. Lucas-Leclin, P. Georges, R. C. I. MacKenzie, P. Bream, S. Bull, K.-H. Hasler, B. Sumpf, H. Wenzel, G. Erbert, B. Thestrup, P. M. Petersen, N. Michel, M. Krakowski und E. C. Larkins, "Design and Simulation of Next-Generation High-Power, High-Brightness Laser Diodes," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Jg. 15, Nr. 3, S. 993–1008, 2009. DOI: 10.1109/JSTQE.2008.2011286.
- [90] J. Javaloyes, S. Balle und A. Perez-Serrano, "Spectral Delay Algebraic Equation Approach to Broad Area Laser Diodes," *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, Jg. PP, S. 1–1, Sep. 2013. DOI: 10.1109/JSTQE.2013.2246772.
- [91] H. Wenzel, "Basic Aspects of High-Power Semiconductor Laser Simulation," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Jg. 19, Feb. 2013. DOI: 10.1109/JSTQE.2013.2246774.
- [92] M. Spreemann, M. Lichtner, M. Radziunas, U. Bandelow und H. Wenzel, "Measurement and Simulation of Distributed-Feedback Tapered Master-Oscillator Power Amplifiers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 45, Nr. 6, S. 609–616, 2009. DOI: 10.1109/JQE.2009.2013115.
- [93] M. Radziunas, *Modeling and Simulations of Edge-Emitting Broad-Area Semiconductor Lasers and Amplifiers*. Cham: Springer International Publishing, 2016, S. 269–276, ISBN: 978-3-319-32152-3. DOI: 10.1177/1094342016677086.
- [94] M. Radziunas, "Modeling and simulations of broad-area edge-emitting semiconductor devices," *The International Journal of High Performance Computing Applications*, Jg. 32, Nr. 4, S. 512–522, 2018. DOI: 10.1177/1094342016677086.
- [95] S. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*, Ser. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 1995, ISBN: 9780471109396.
- [96] J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*. De Gruyter, 2013, ISBN: 9783110334470. DOI: doi : 10.1515/9783110334470.
- [97] M. Kira und S. W. Koch, *Semiconductor Quantum Optics*. Cambridge University Press, 2011. DOI: 10.1017/CB09781139016926.
- [98] R. Goldhahn, C. Buchheim, P. Schley, A. T. Winzer und H. Wenzel, "Optical Constants of Bulk Nitrides," in *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*. John Wiley & Sons, Ltd, 2007, Kap. 5, S. 95–115, ISBN: 9783527610723. DOI: <https://doi.org/10.1002/9783527610723.ch5>.
- [99] J. Buus, "Models of the static and dynamic behavior of stripe geometry lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 19, Nr. 6, S. 953–960, 1983. DOI: 10.1109/JQE.1983.1071964.
- [100] J. Y. Duboz, "Hot photoluminescence in GaN: Carrier energy relaxation and hot phonon effects," *Journal of Applied Physics*, Jg. 92, Nr. 8, S. 4312–4319, 2002. DOI: 10.1063/1.1499525.
- [101] S. Poncé, D. Jena und F. Giustino, "Route to High Hole Mobility in GaN via Reversal of Crystal-Field Splitting," *Phys. Rev. Lett.*, Jg. 123, S. 096 602, 9 Aug. 2019. DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.096602.
- [102] J. Piprek, *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*. Wiley, 2007, ISBN: 9783527610716.
- [103] S. L. Chuang und C. S. Chang, " $k \cdot p$ method for strained wurtzite semiconductors," *Phys. Rev. B*, Jg. 54, S. 2491–2504, 4 Juli 1996. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.2491.
- [104] S. L. Chuang und C. S. Chang, "Effective-mass Hamiltonian for strained wurtzite GaN and analytical solutions," *Applied Physics Letters*, Jg. 68, Nr. 12, S. 1657–1659, 1996. DOI: 10.1063/1.115896.
- [105] S. L. Chuang und C. S. Chang, "A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors," *Semiconductor Science and Technology*, Jg. 12, Nr. 3, S. 252–263, März 1997. DOI: 10.1088/0268-1242/12/3/004.
- [106] G. Stefanucci und R. van Leeuwen, *Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems: A Modern Introduction*. Cambridge University Press, 2013, ISBN: 9780521766173.

- [107] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougousis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari und R. M. Wentzcovitch, "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Jg. 21, Nr. 39, S. 395 502, Sep. 2009. DOI: 10 . 1088/0953-8984/21/39/395502.
- [108] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Buongiorno Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni und et al., "Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Jg. 29, Nr. 46, S. 465 901, Okt. 2017, ISSN: 1361-648X. DOI: 10 . 1088/1361-648x/aa8f79.
- [109] P. Giannozzi, O. Baseggio, P. Bonfà, D. Brunato, R. Car, I. Carnimeo, C. Cavazzoni, S. de Gironcoli, P. Delugas, F. Ferrari Ruffino, A. Ferretti, N. Marzari, I. Timrov, A. Urru und S. Baroni, "Quantum ESPRESSO toward the exascale," *The Journal of Chemical Physics*, Jg. 152, Nr. 15, S. 154 105, 2020. DOI: 10 . 1063/5 . 0005082.
- [110] S. Poncé, E. Margine, C. Verdi und F. Giustino, "EPW: Electron-phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions," *Computer Physics Communications*, Jg. 209, S. 116-133, 2016, ISSN: 0010-4655. DOI: 10 . 1016/j . cpc . 2016 . 07 . 028.
- [111] F. Giustino, M. L. Cohen und S. G. Louie, "Electron-phonon interaction using Wannier functions," *Phys. Rev. B*, Jg. 76, S. 165 108, 16 Okt. 2007. DOI: 10 . 1103/PhysRevB . 76 . 165108.
- [112] J. P. Perdew, K. Burke und M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple," *Phys. Rev. Lett.*, Jg. 77, S. 3865-3868, 18 Okt. 1996. DOI: 10 . 1103/PhysRevLett . 77 . 3865.
- [113] J. P. Perdew, K. Burke und M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple," *Phys. Rev. Lett.*, Jg. 78, S. 1396-1396, 7 Feb. 1997. DOI: 10 . 1103/PhysRevLett . 78 . 1396.
- [114] M. Schlipf und F. Gygi, "Optimization algorithm for the generation of ONCV pseudopotentials," *Computer Physics Communications*, Jg. 196, S. 36-44, 2015, ISSN: 0010-4655. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.05.011>.
- [115] S. M. Sze und K. K. Ng, "Physics and Properties of Semiconductors—A Review," in *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Ltd, 2006, S. 5-75, ISBN: 9780470068328. DOI: <https://doi.org/10.1002/9780470068328.ch1>.
- [116] W. Chow und S. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials*. Springer Berlin Heidelberg, 2013, ISBN: 9783662038819.
- [117] W. Shockley und W. T. Read, "Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons," *Phys. Rev.*, Jg. 87, S. 835-842, 5 Sep. 1952. DOI: 10 . 1103/PhysRev . 87 . 835.
- [118] J. Piprek und S. Nakamura, "Physics of high-power InGaN/GaN lasers," *IEE Proceedings: Optoelectronics*, Jg. 149, Nr. 4, S. 145-151, 2002. DOI: 10 . 1049/ip-opt : 20020441.
- [119] E. Kuhn und A. Thränhardt, "Modeling mode competition in laser diodes," *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 51, Nr. 6, 2019. DOI: 10 . 1007/s11082-019-1916-7.
- [120] J. Piprek, *Handbook of Optoelectronic Device Modeling and Simulation: Lasers, Modulators, Photodetectors, Solar Cells, and Numerical Methods, Vol. 2*, Ser. Series in Optics and Optoelectronics. CRC Press, 2017, ISBN: 9781498749572.
- [121] J. Blakemore, "The parameters of partially degenerate semiconductors," *Proceedings of the Physical Society, Section A*, Jg. 65, Nr. 6, S. 460-461, 1952. DOI: 10 . 1088/0370-1298/65/6/116.
- [122] T. Koprucki, N. Rotundo, P. Farrell, D. Doan und J. Fuhrmann, "On thermodynamic consistency of a Scharfetter-Gummel scheme based on a modified thermal voltage for drift-diffusion equations with diffusion enhancement," *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 47, Nr. 6, S. 1327-1332, 2015. DOI: 10 . 1007/s11082-014-0050-9.
- [123] W. G. Scheibenzuber und U. T. Schwarz, "Unequal Pumping of Quantum Wells in GaN-Based Laser Diodes," *Applied Physics Express*, Jg. 5, Nr. 4, S. 042 103, Apr. 2012. DOI: 10 . 1143/apex . 5 . 042103.
- [124] D. S. Sizov, R. Bhat, A. Zakharian, J. Napierala, K. Song, D. Allen und C.-e. Zah, "Impact of Carrier Transport on Aquamarine-Green Laser Performance," *Applied Physics Express*, Jg. 3, Nr. 12, S. 122 101, Nov. 2010. DOI: 10 . 1143/apex . 3 . 122101.

- [125] L. Uhlig, D. J. Kunzmann, Y. Mu und U. T. Schwarz, "Dynamical behavior of blue broad-area laser diodes," in *Gallium Nitride Materials and Devices XVI*, H. Fujioka, H. Morkoç und U. T. Schwarz, Hrsg., International Society for Optics und Photonics, Bd. 11686, SPIE, 2021, S. 14–25. DOI: 10.1117/12.2575564.
- [126] G. Agrawal und N. Olsson, "Self-phase modulation and spectral broadening of optical pulses in semiconductor laser amplifiers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 25, Nr. 11, S. 2297–2306, 1989. DOI: 10.1109/3.42059.
- [127] S. Balsamo, F. Sartori und I. Montrosset, "Dynamic beam propagation method for flared semiconductor power amplifiers," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Jg. 2, Nr. 2, S. 378–384, 1996. DOI: 10.1109/2944.577398.
- [128] C. Ning, R. Indik und J. Moloney, "Effective Bloch equations for semiconductor lasers and amplifiers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 33, Nr. 9, S. 1543–1550, 1997. DOI: 10.1109/3.622635.
- [129] U. Bendelow, M. Radziunas, J. Sieber und M. Wolfrum, "Impact of gain dispersion on the spatio-temporal dynamics of multisection lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Jg. 37, Nr. 2, S. 183–188, 2001. DOI: 10.1109/3.903067.
- [130] R. Čiegis und M. Radziunas, "Effective Numerical Integration of Traveling Wave Model for Edge-Emitting Broad-Area Semiconductor Lasers and Amplifiers," *Mathematical Modelling And Analysis*, Jg. 15, S. 409–430, Nov. 2010. DOI: 10.3846/1392-6292.2010.15.409-430.
- [131] R. Čiegis, M. Radziunas und M. Lichtner, "Numerical algorithms for simulation of multisection lasers by using traveling wave model," *Mathematical Modelling and Analysis*, Jg. 13, Nr. 3, S. 327–348, 2008. DOI: 10.3846/1392-6292.2008.13.327-348.
- [132] P. M., L. C.-K., W. Y.-R., S. J.S., B. B., F. R.M., F. M., M. L., P. J. und W. C., "Localization landscape theory of disorder in semiconductors. II. Urbach tails of disordered quantum well layers," *Physical Review B*, Jg. 95, Nr. 14, 2017. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.144205.
- [133] W. Liu, G. Rossbach, A. Avramescu, T. Schimpke, H.-J. Lugauer, M. Strassburg, C. Mounir, U. T. Schwarz, B. Deveaud und G. Jacopin, "Impact of alloy disorder on Auger recombination in single InGaN/GaN core-shell microrods," *Phys. Rev. B*, Jg. 100, S. 235 301, 23 Dez. 2019. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.235301.
- [134] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney und D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, Third. Philadelphia, PA: Society for Industrial und Applied Mathematics, 1999, ISBN: 0-89871-447-8.
- [135] T. A. Davis und I. S. Duff, "An Unsymmetric-Pattern Multifrontal Method for Sparse LU Factorization," *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Jg. 18, Nr. 1, S. 140–158, 1997. DOI: 10.1137/S0895479894246905.
- [136] J. D. Hunter, "Matplotlib: A 2D graphics environment," *Computing in Science & Engineering*, Jg. 9, Nr. 3, S. 90–95, 2007. DOI: 10.1109/MCSE.2007.55.
- [137] T. T. Mnatsakanov, M. E. Levinshtein, L. I. Pomortseva, S. N. Yurkov, G. S. Simin und M. Asif Khan, "Carrier mobility model for GaN," *Solid-State Electronics*, Jg. 47, Nr. 1, S. 111–115, 2003, ISSN: 0038-1101. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0038-1101\(02\)00256-3](https://doi.org/10.1016/S0038-1101(02)00256-3).
- [138] T. Weig, "Generation of optical ultra-short pulses in (Al,In)GaN laser diodes," Dissertation, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2015.
- [139] E. Kuhn, D. Röhlig, E. Sowade, D. Rittrich, A. Willert, S. E. Schulz, R. R. Baumann, A. Thränhardt und T. Blaudeck, "Disorder explains dual-band reflection spectrum in spherical colloidal photonic supraparticle assemblies," *Nano Select*, Jg. 2, Nr. 12, S. 2461–2472, 2021. DOI: 10.1002/nano.202100263.
- [140] F. Teichert, E. Kuhn und A. Thränhardt, "Do equidistant energy levels necessitate a harmonic potential?" *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 53, Nr. 7, 2021. DOI: 10.1007/s11082-021-03015-6.
- [141] E. Kuhn, L. Uhlig, M. Wachs, U. T. Schwarz und A. Thränhardt, "Simulation of mode competition phenomena in (Al,In)GaN laser diodes," in *DPG-Frühjahrstagung Regensburg*, 2019.
- [142] E. Kuhn und A. Thränhardt, "Influence of Coulomb Scattering on the Coupling between Longitudinal Modes in Nitride Laser Diodes," in *2020 International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD)*, 2020, S. 1–2.

Danksagung

Hiermit bedanke ich mich bei Prof. Dr. Angela Thränhardt für die Möglichkeit, die an der TU Chemnitz promovieren zu können. Außerdem bedanke ich mich für die vielen Verbesserungsvorschläge und die Übernahme des Erstgutachtens.

Für das Thema dieser Arbeit und die Übernahme des Zweitgutachtens bedanke ich mich bei Prof. Dr. Ulrich Theodor Schwarz.

Bei Dr. Fabian Teichert bedanke ich mich für viele Anmerkungen und Verbesserungsvorschläge.

Ich bedanke mich bei Johann Sebastian Bach für seine Musik, vor allem für *Die Kunst der Fuge*, die *Goldberg-Variationen* und die *Chaconne*.

Zuletzt möchte ich mich noch bei meiner Familie, vor allem bei meinen Eltern, für die Unterstützung während meines Studiums und der Promotion bedanken.

Liste der wissenschaftlichen Veröffentlichungen

E. Kuhn und A. Thränhardt, "Modeling mode competition in laser diodes," *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 51, Nr. 6, 2019. DOI: 10.1007/s11082-019-1916-7

E. Kuhn, L. Uhlig, M. Wachs, U. Schwarz und A. Thränhardt, "Mode rolling effects in nitride laser diodes," *Engineering Research Express*, Jg. 2, Nr. 3, 2020. DOI: 10.1088/2631-8695/abb6c8

E. Kuhn, D. Röhlig, E. Sowade, D. Rittrich, A. Willert, S. E. Schulz, R. R. Baumann, A. Thränhardt und T. Blaudeck, "Disorder explains dual-band reflection spectrum in spherical colloidal photonic supraparticle assemblies," *Nano Select*, Jg. 2, Nr. 12, S. 2461-2472, 2021. DOI: 10.1002/nano.202100263

F. Teichert, E. Kuhn und A. Thränhardt, "Do equidistant energy levels necessitate a harmonic potential?" *Optical and Quantum Electronics*, Jg. 53, Nr. 7, 2021. DOI: 10.1007/s11082-021-03015-6

Liste der Konferenzbeiträge

E. Kuhn, L. Uhlig, M. Wachs, U. T. Schwarz und A. Thränhardt, "Simulation of mode competition phenomena in (Al,In)GaN laser diodes," in *DPG-Frühjahrstagung Regensburg*, 2019

E. Kuhn und A. Thränhardt, "Influence of Coulomb Scattering on the Coupling between Longitudinal Modes in Nitride Laser Diodes," in *2020 International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD)*, 2020, S. 1-2

Selbstständigkeitserklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.