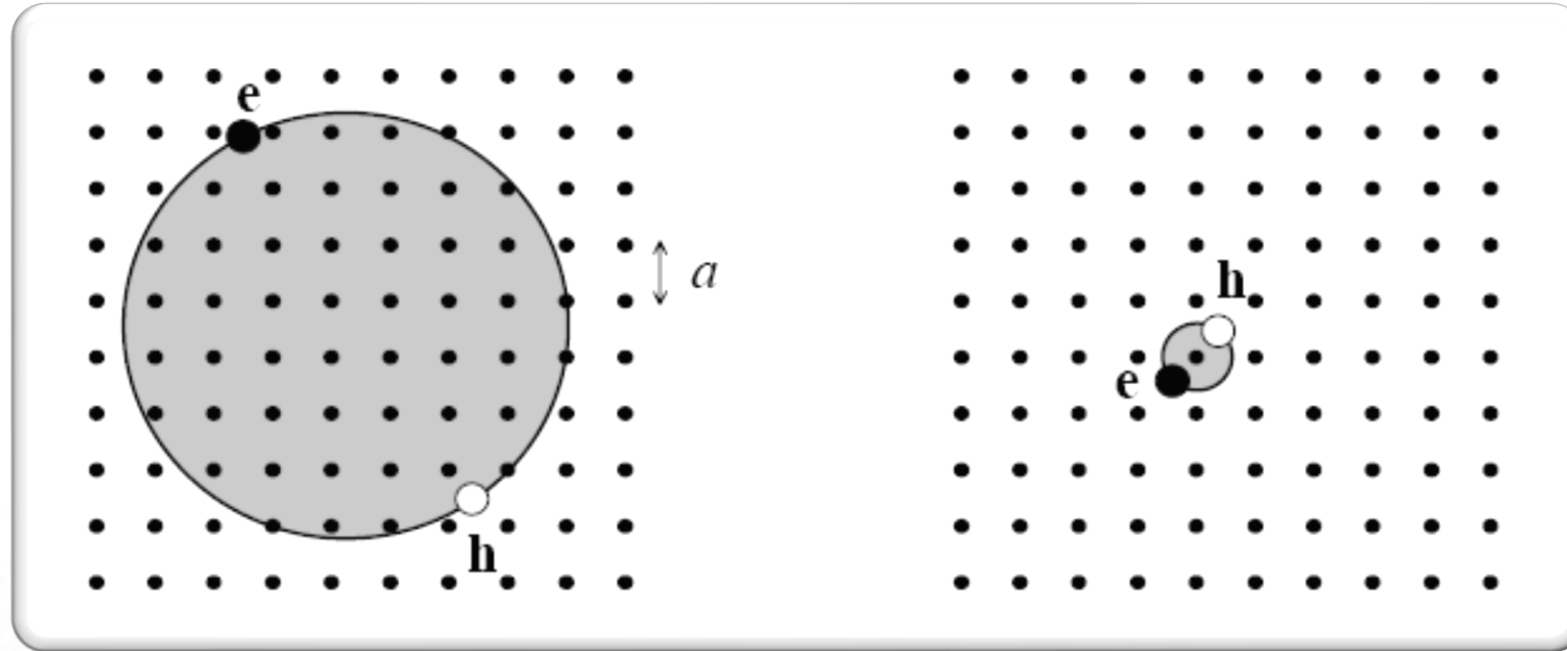


Vorlesung 6: Halbleiter Nanostrukturen

09.06.2026

Prof. Kornelius Nielsch

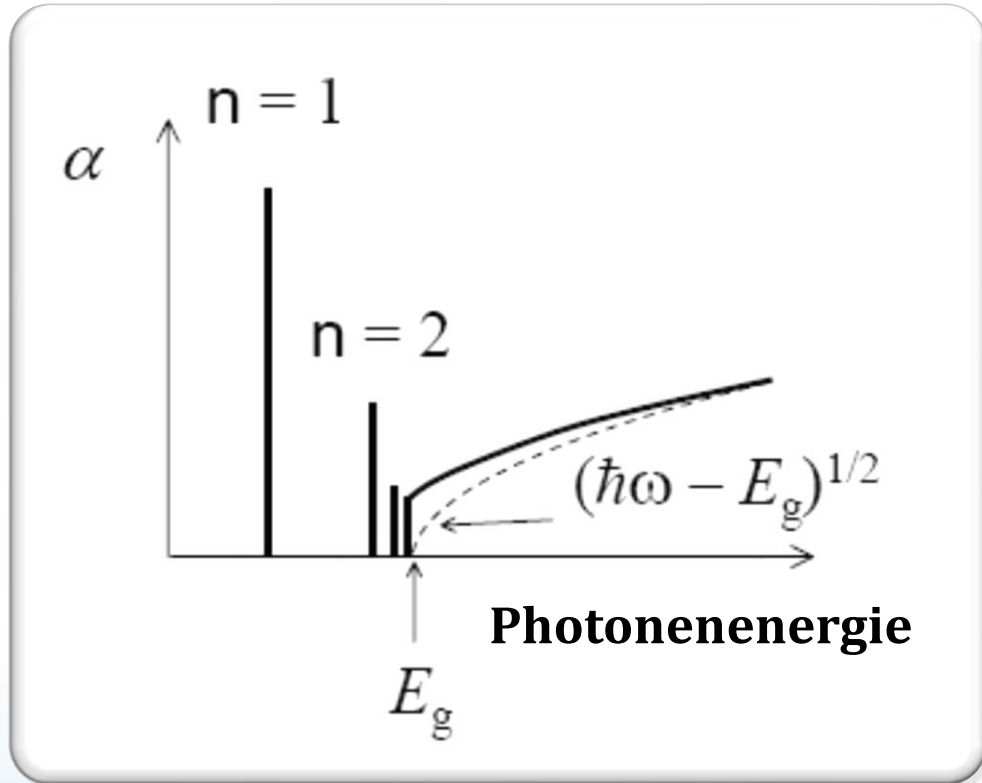
Exzitonen



- Freie (Wannier)
- Radius $\gg a$
- Geringe Bindungsenergie
- Bewegen sich frei durch den Kristall

- Stark-gebunden (Frenkel)
- Radius $\sim a$
- Hohe Bindungsenergie
- An einem Gitterplatz lokalisiert

Freie Exzitonen Absorption



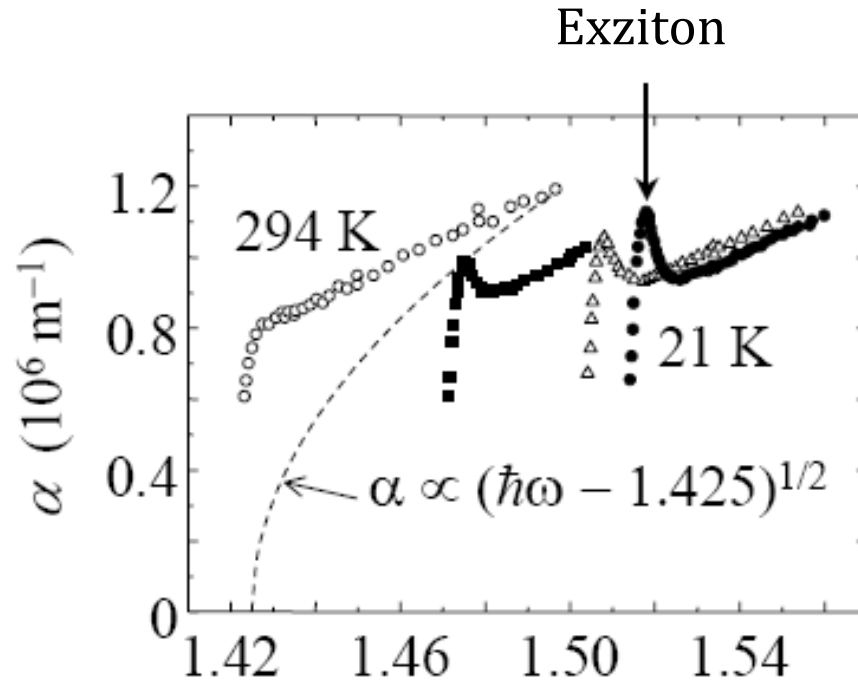
Wasserstoffserie-Linien zutreffend wenn

$$\hbar\omega = E_g - R_X/n^2$$

- Bevorzugte Absorption für $\hbar\omega > E_g$
- Gilt nur wenn

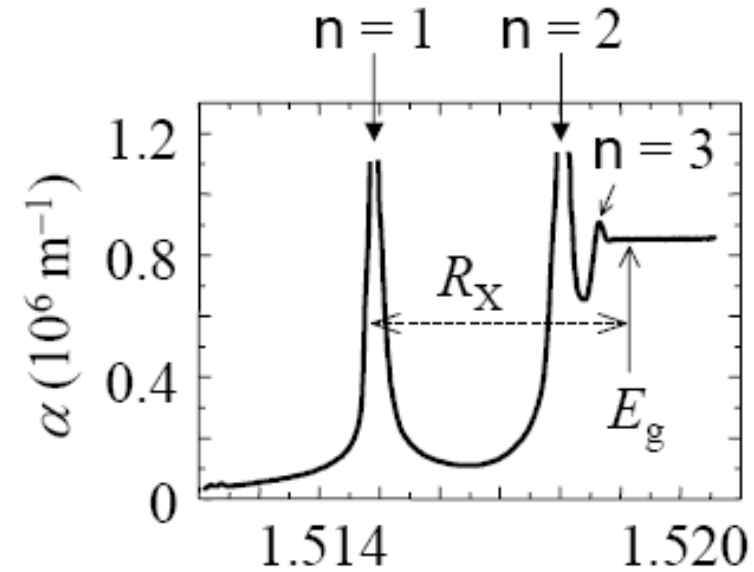
$$T \leq (R_X/k_B)$$

Exzitonen in Bulk GaAs



Photonenenergie (eV)

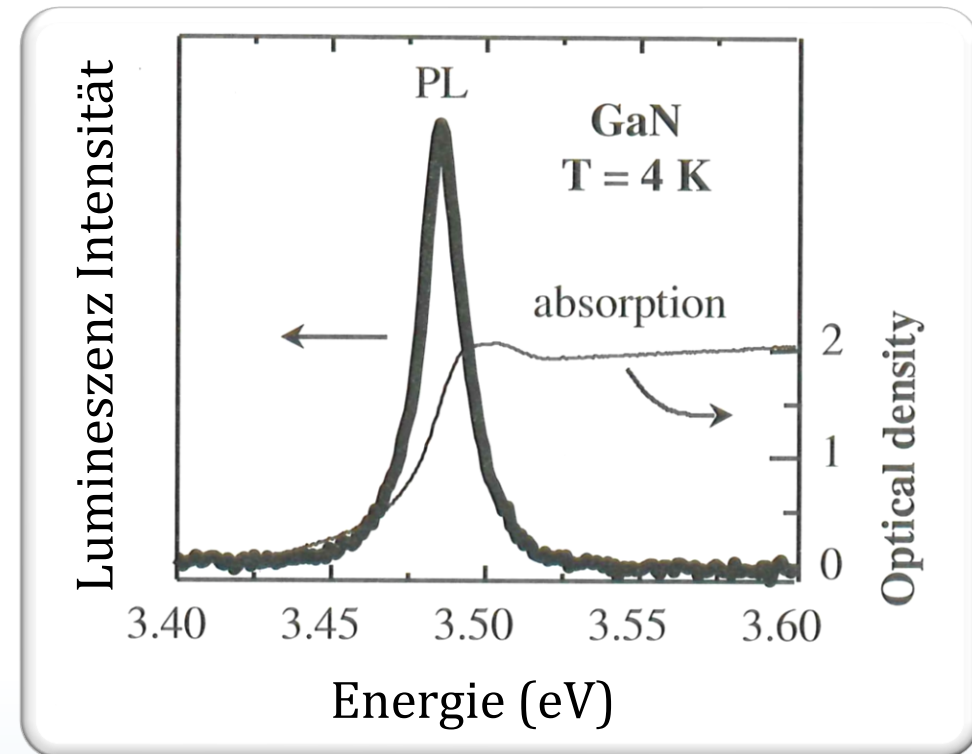
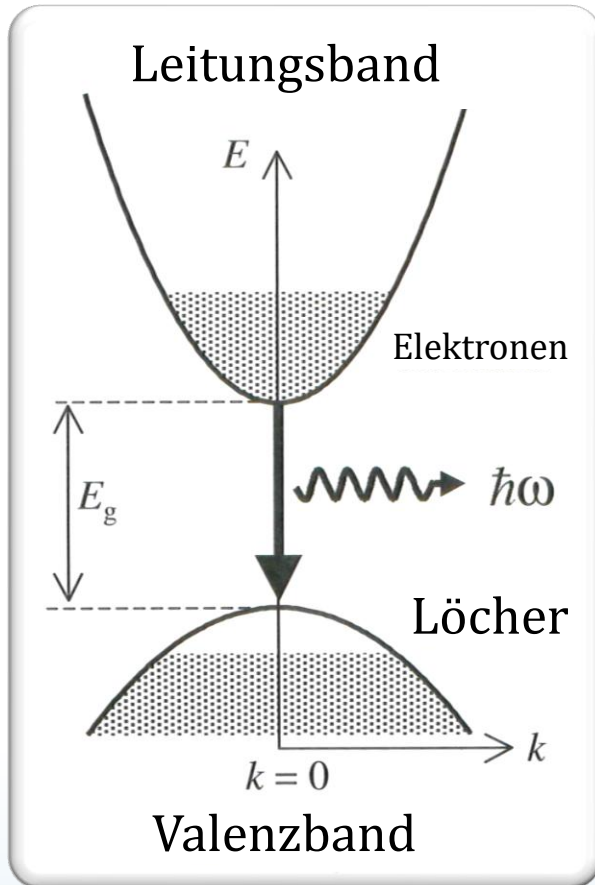
- Standardprobe
- T=21 K - 294 K



Photonenenergie (eV)

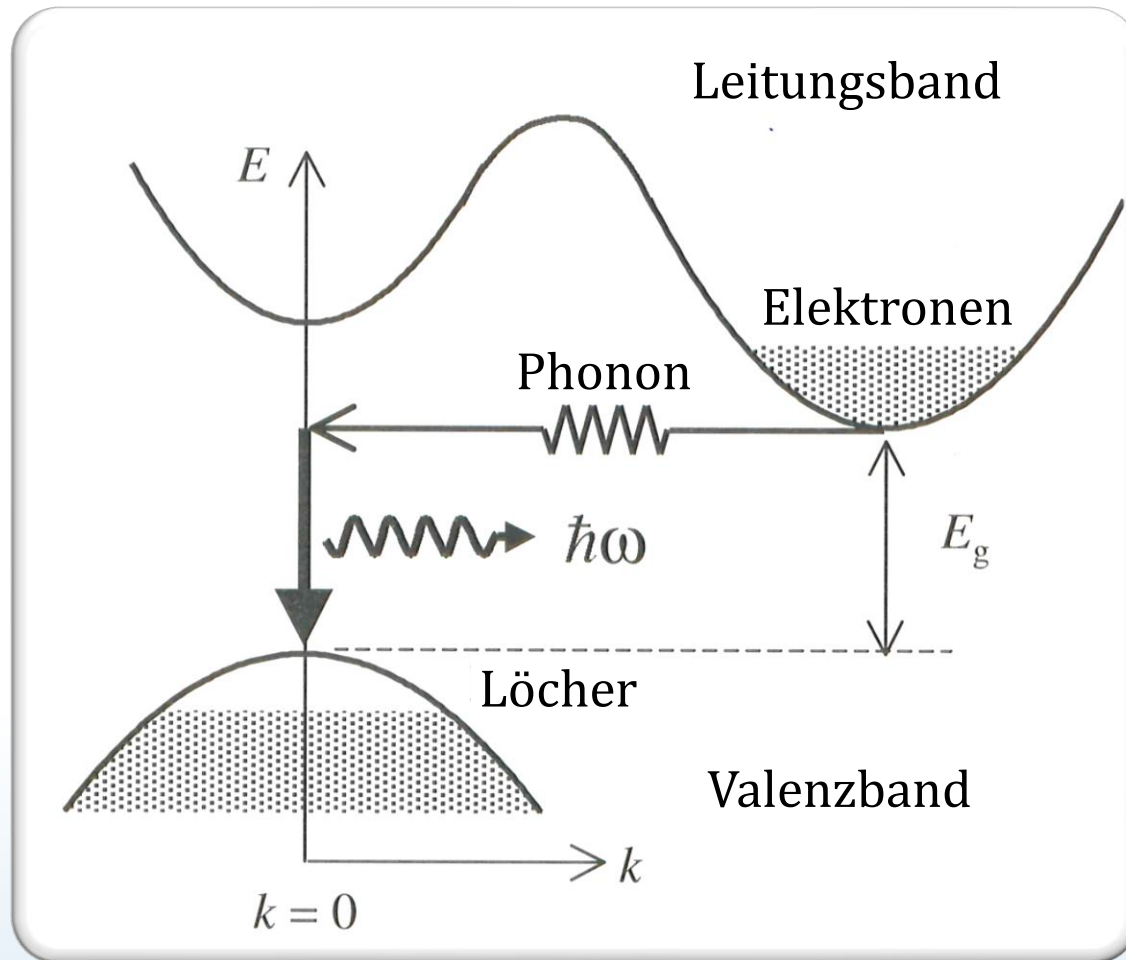
- Hochreine Probe
- T=1,2 K
- $R_X=4,2 \text{ meV}$

Materialien mit direkter Bandlücke



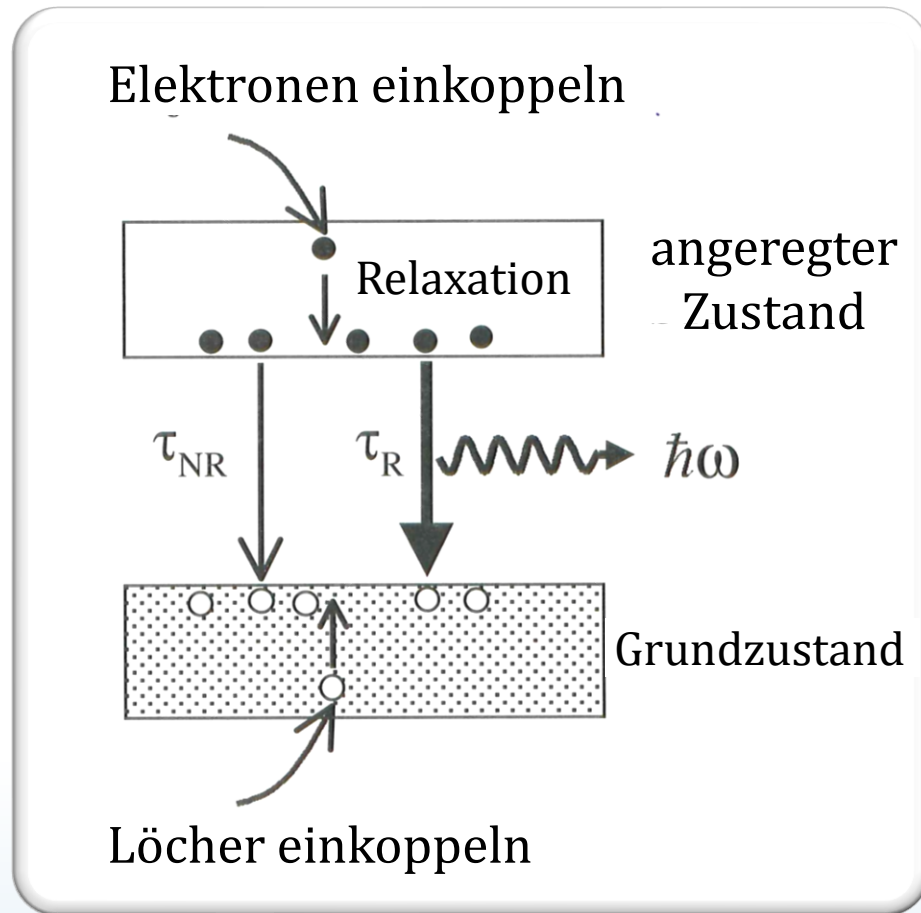
- Starke Emission an der Bandlücke
- Hauptsächlich III-V und II-VI Halbleiter
- Linienbreite $\geq k_B T$

Materialien mit indirekter Bandlücke



- Geringe Emissionswahrscheinlichkeit (Prozess 2ter Ordnung)
- Lange Strahlungsdauer → geringe Strahlungsquanteneffektivität
- Diamant, Silizium, Germanium, AlAs

Strahlungsquantenwirkungsgrad



η_R = Strahlungsquantenwirkungsgrad
= Strahlungsübergangsrate / totale Übergangsrate

$$\eta_R = \frac{1}{1 + \tau_R / \tau_{NR}}$$

- Strahlungsübergänge begrenzt durch Einstein A-Koeffizient $\tau_R = A^{-1}$
- τ_{NR} begrenzt durch die Phononendichte, Anzahl der Störstellen etc

b) Zwischenband-Lumineszenz

Direkter Halbleiter

Dauer des angeregten Zustandes bis zur Rekombination des Elektron-Loch-Paares

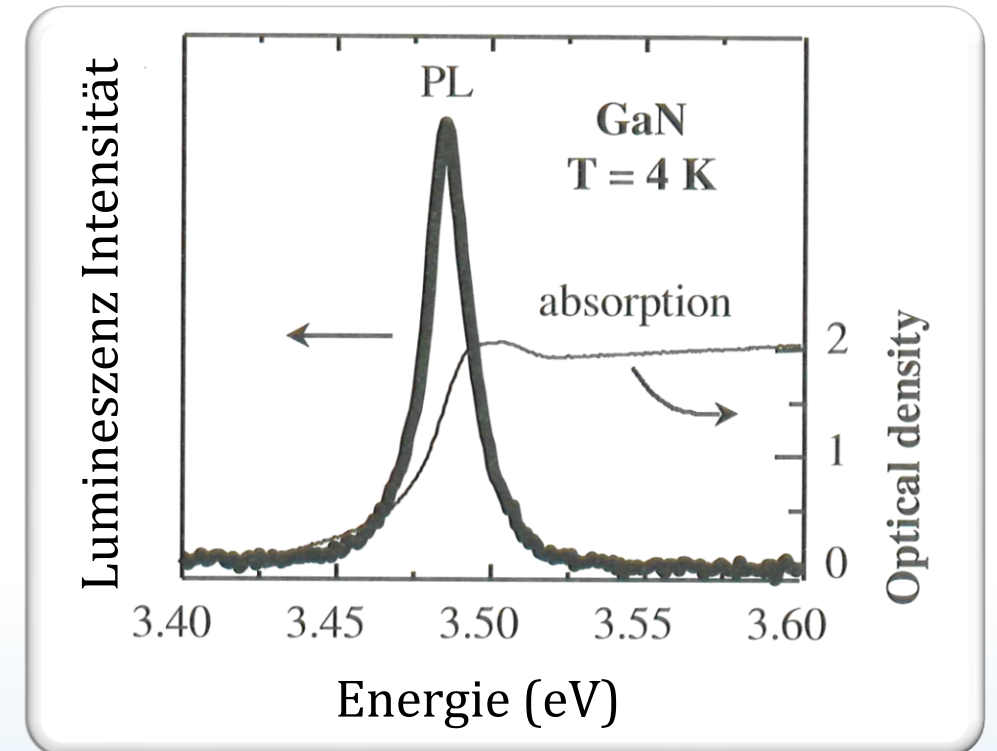
$$\tau_R \sim 10^{-8} - 10^{-9} \text{ s}$$

Definierter Emissionspeak bei der Bandbreite E_g

Indirekter Halbleiter

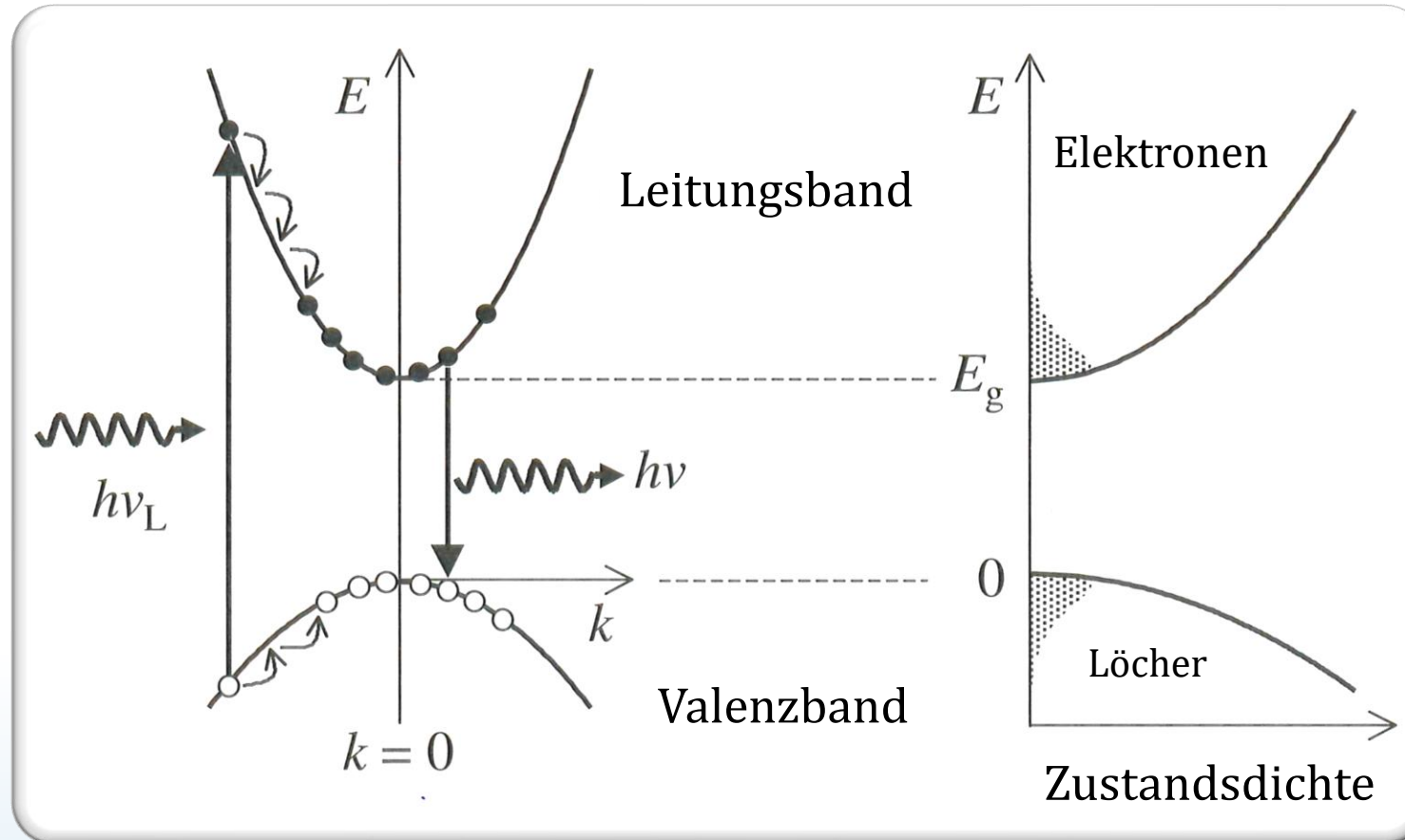
Die Lichtemission ist auch an Phonon-WW gekoppelt

- $\tau_{NR} \ll \tau_R$
- Schlechte Quanteneffizienz
- sehr lange Verweilzeit im angeregten Zustand



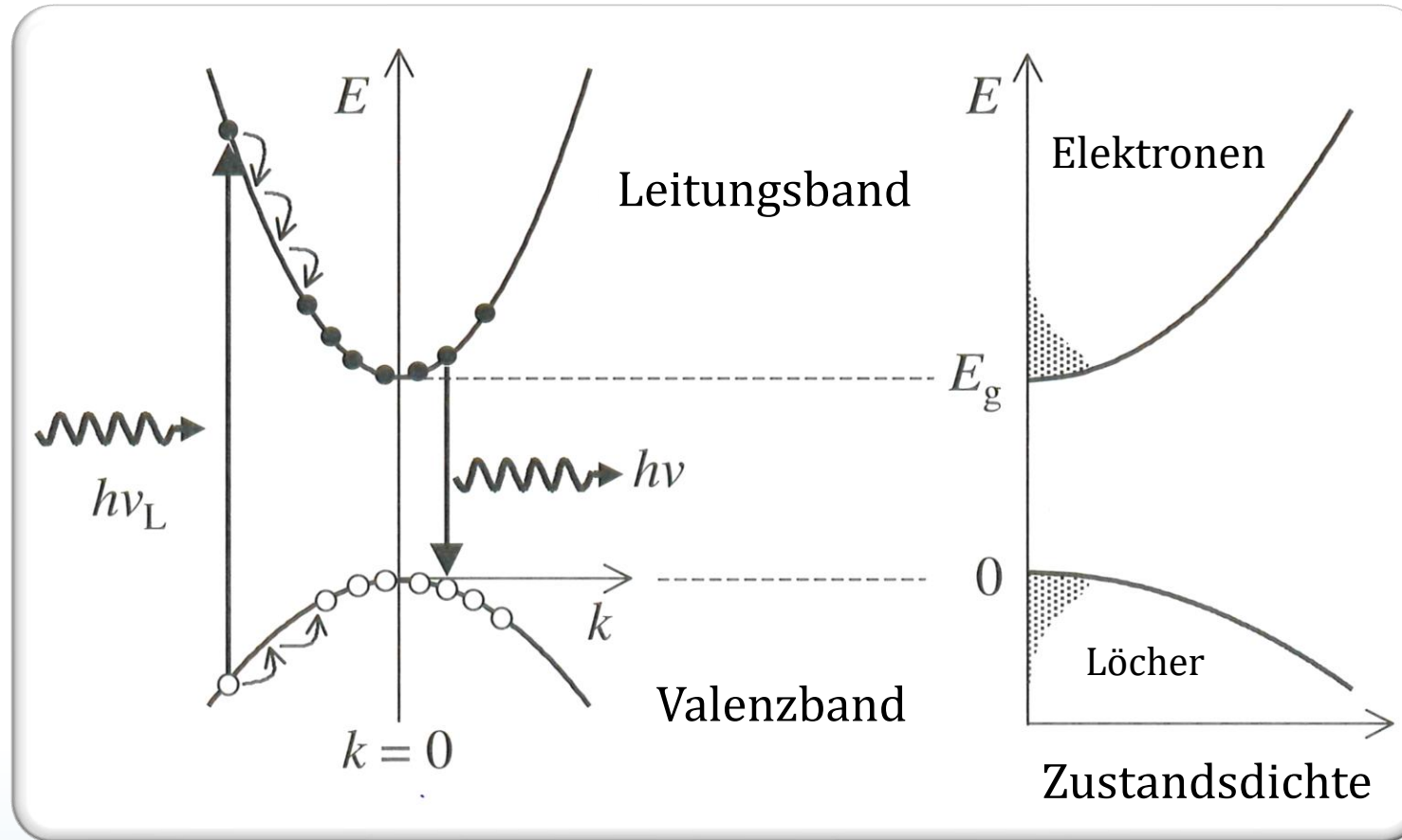
c) Photolumineszenz: Anregung und Relaxation

1) Anregung und Relaxation



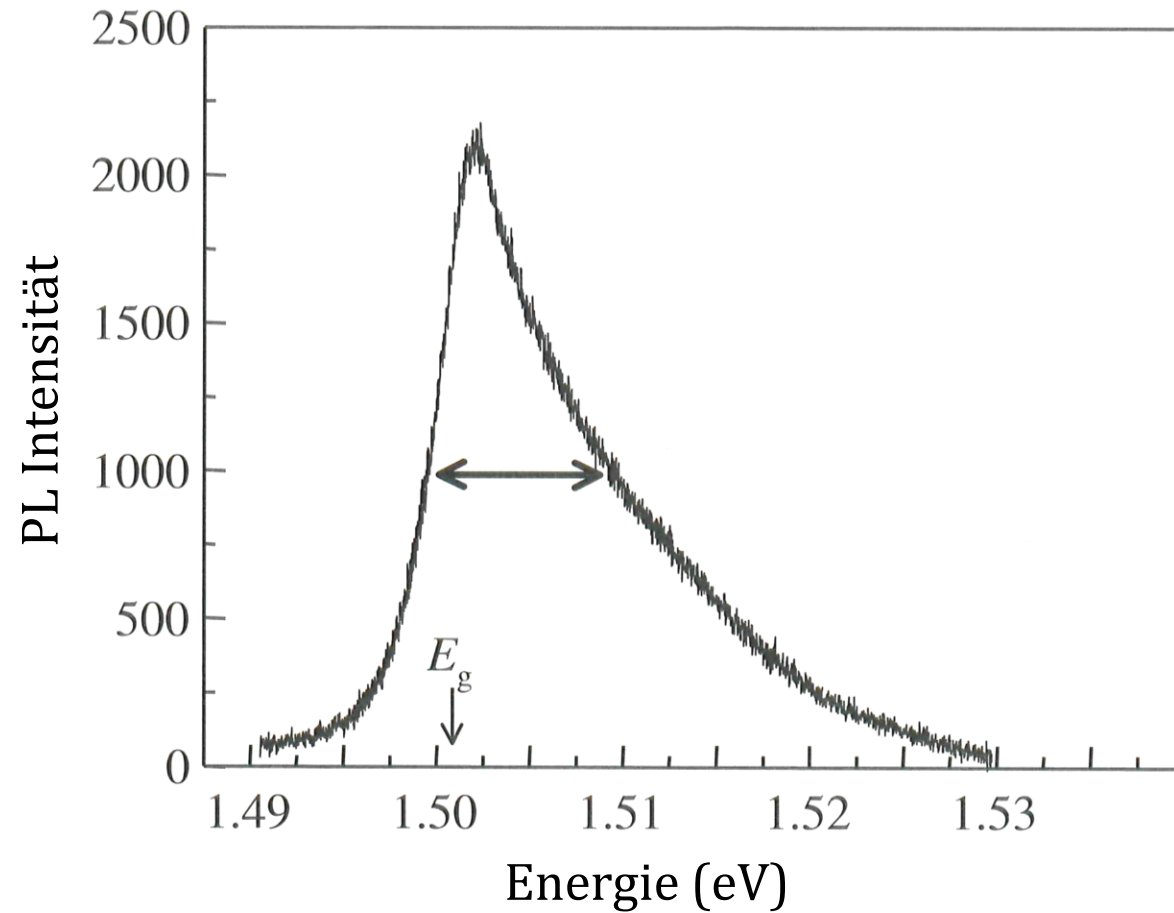
Zeitskala der Elektronen-Phonon-Übergänge innerhalb
des Leitungs- bzw. Valenzbandes: $\sim 100 \text{ fs}$ (10^{-13} s)

Photolumineszenz



- Anregung durch einen Laser mit Photonenenergie $> E_g$
- Elektronen und Löcher relaxieren über die Unterkante der Bänder
- Emission erfolgt von E_g zur Spitze der Ladungsträgerverteilung

Klassische (Boltzmann) Statistik



GaAs

$T=100\text{ K}$

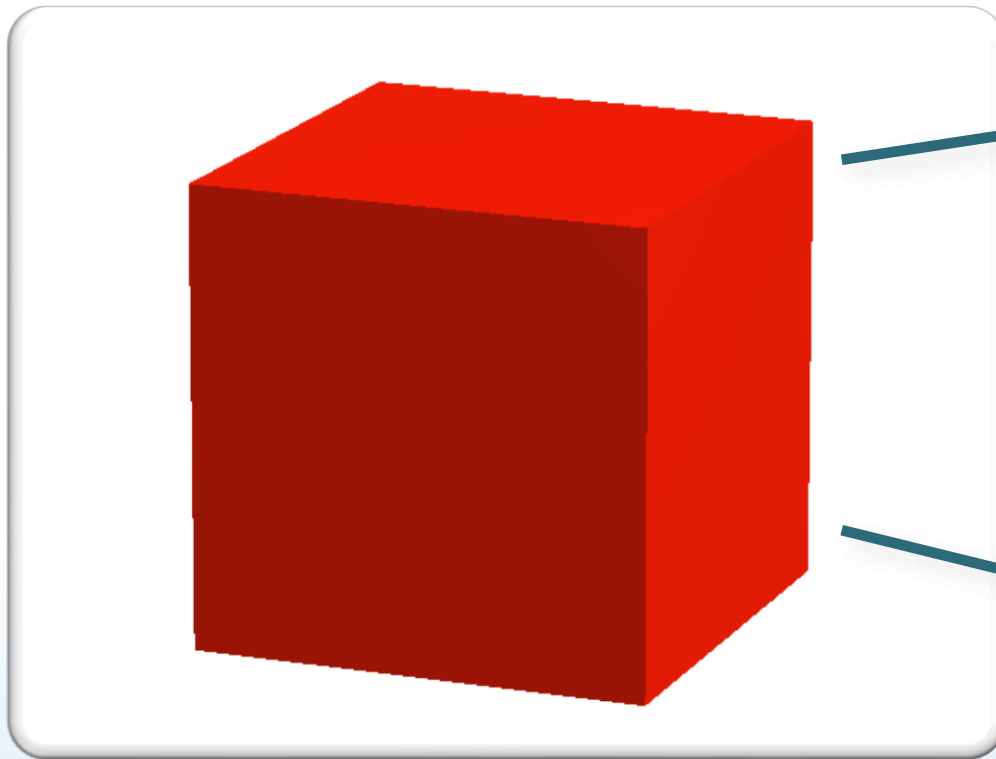
$k_B T=8,6\text{ meV}$

$E_g=1,501\text{ eV}$

- Boltzmann Statistik: $f(E) \sim \exp(-E/k_B T)$
- $I(E) \sim \text{Zustandsdichte} \times f_e(E)/f_h(E)$
- PL nimmt bei E_g stark zu und fällt dann exponentiell ab; Linienbreite $\approx k_B T$

1) Einführung zu Quanteneffekte in Nanostrukturen

Klein ist anders

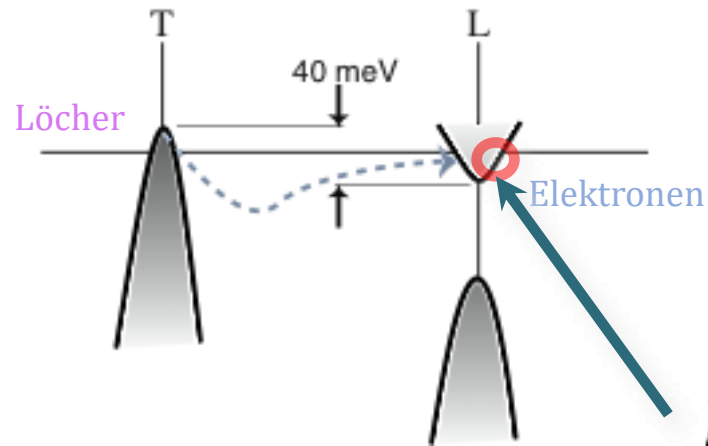


Änderung der Schützeigenschaften

erhöhte Bedeutung von Oberflächen

Quantengrößeneffekte in dünnen Bi-Schichten

schematische Bulk-Bandstruktur



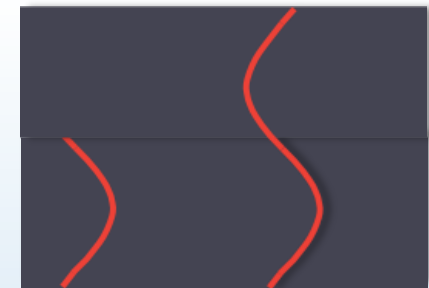
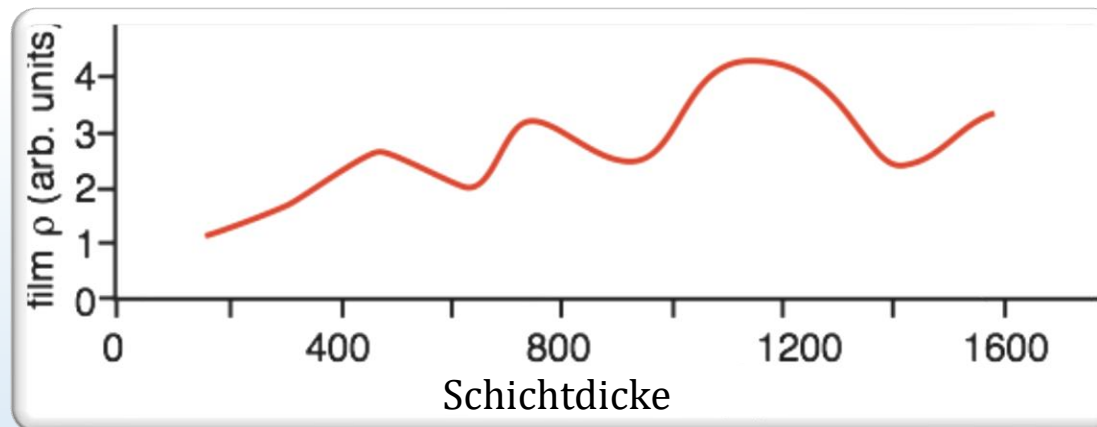
klein

$$E(k) = -E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

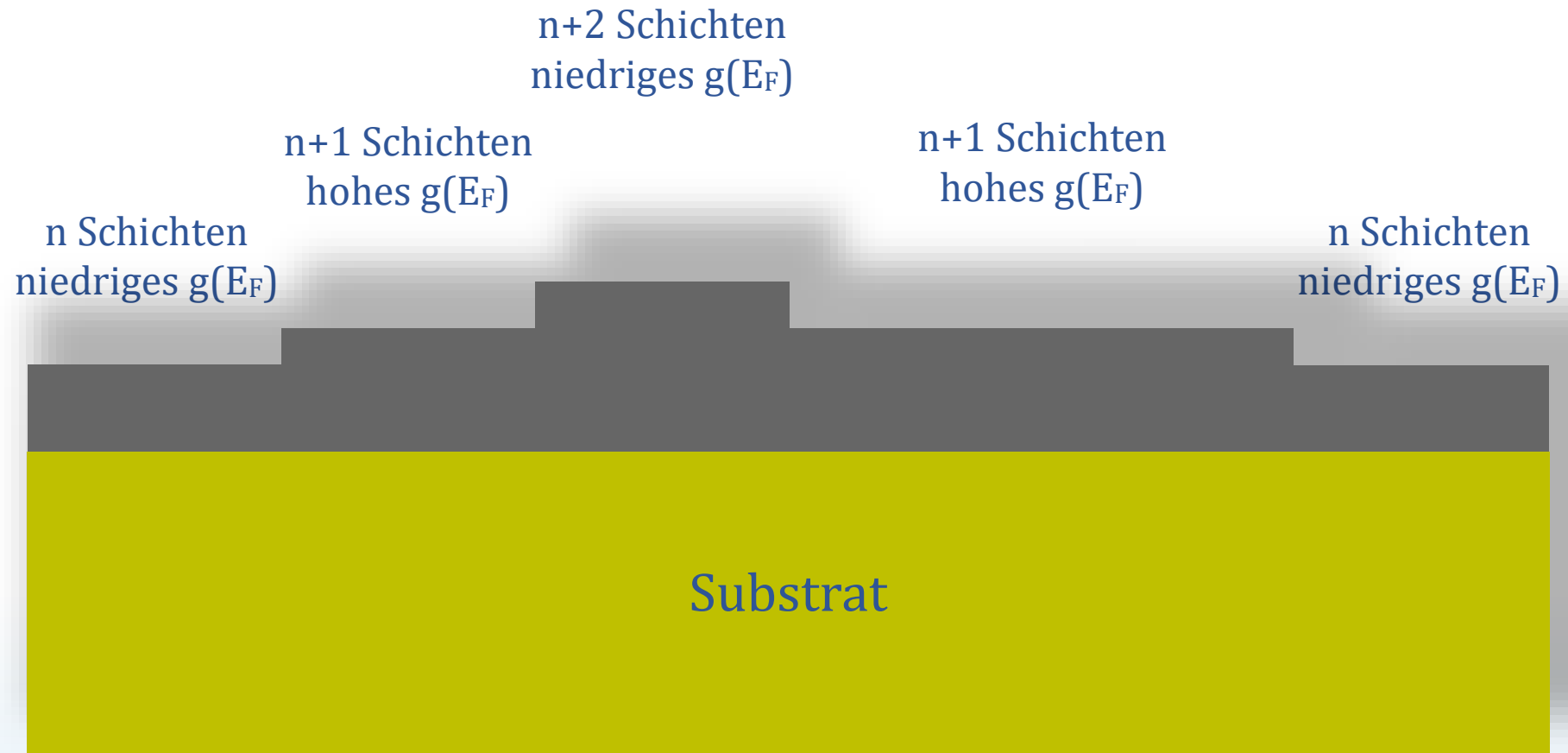
klein

k_F sehr klein

λ_F sehr lang (Hunderte von Å)



Magische Schichthöhe



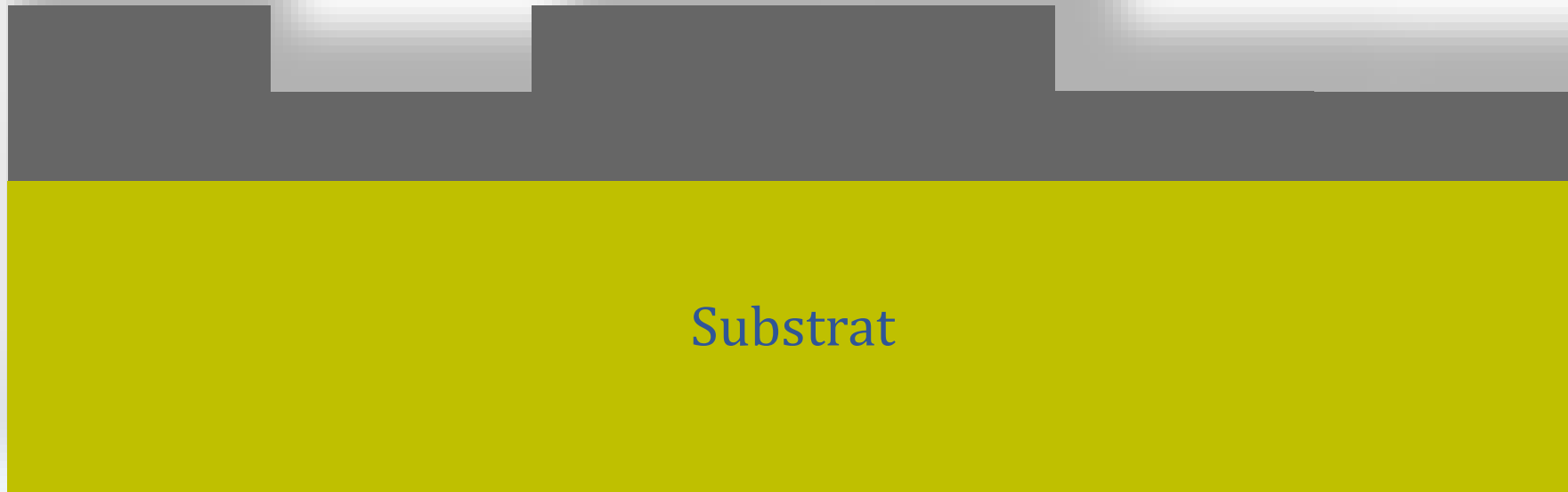
Magische Schichthöhe

n Schichten
niedriges $g(E_F)$

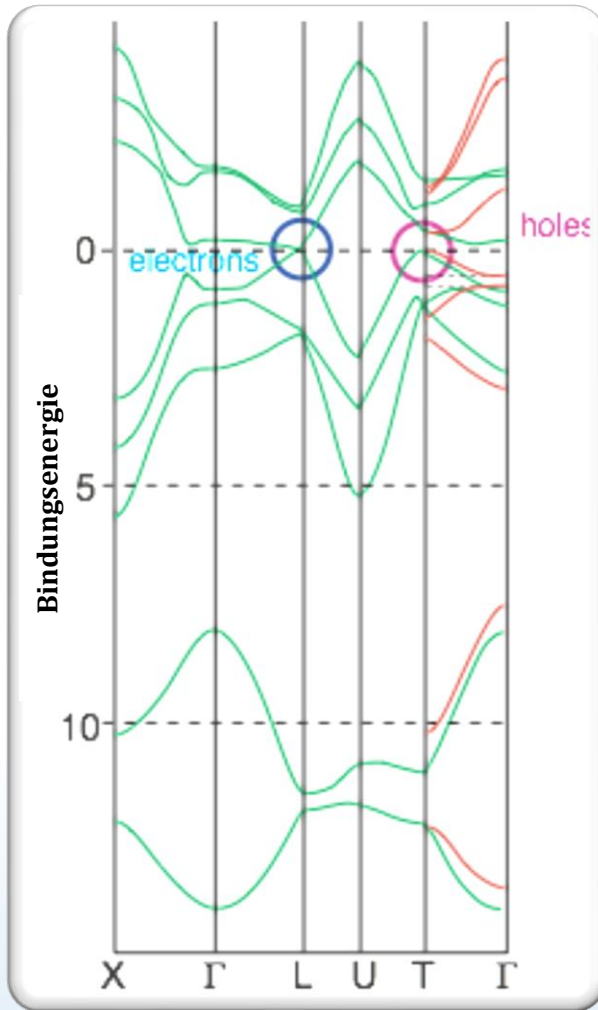
n+2 Schichten
niedriges $g(E_F)$

n Schichten
niedriges $g(E_F)$

n Schichten
niedriges $g(E_F)$



Elektronische Struktur von Bi



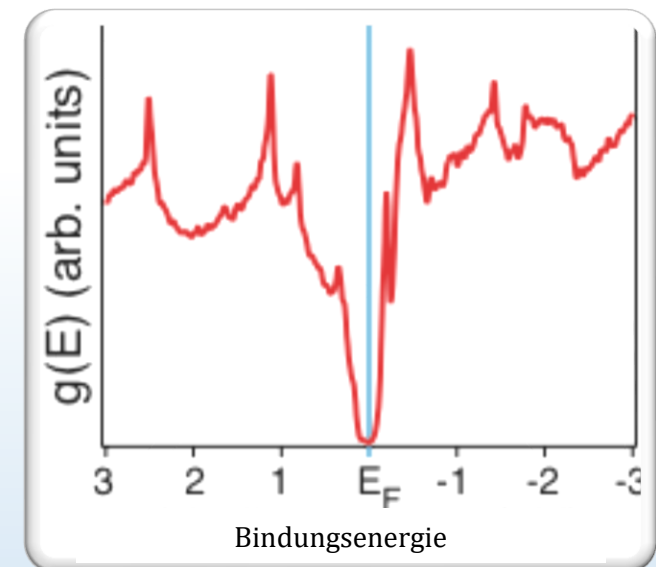
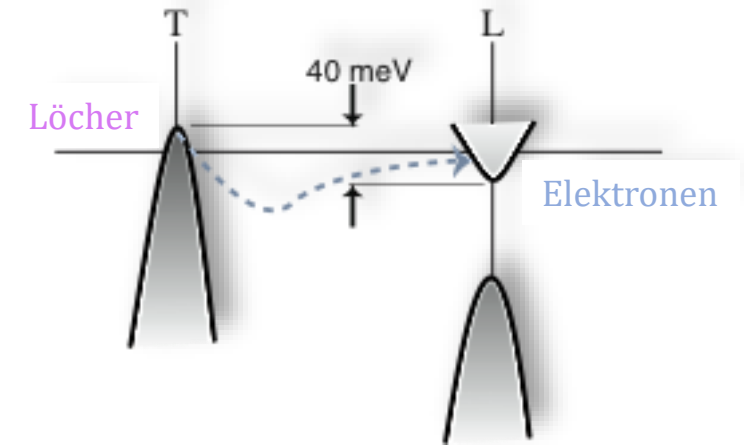
$$T_C = 1.13 \Theta_D \exp \frac{-1}{g(E_F)V}$$

Debye
Temp.

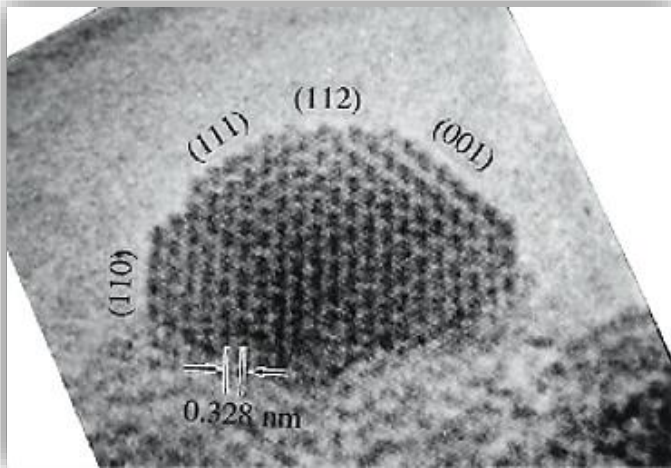
Zustandsdichte

el-ph
Wechselwirkung
Stärke

schematische Bulk-Bandstruktur

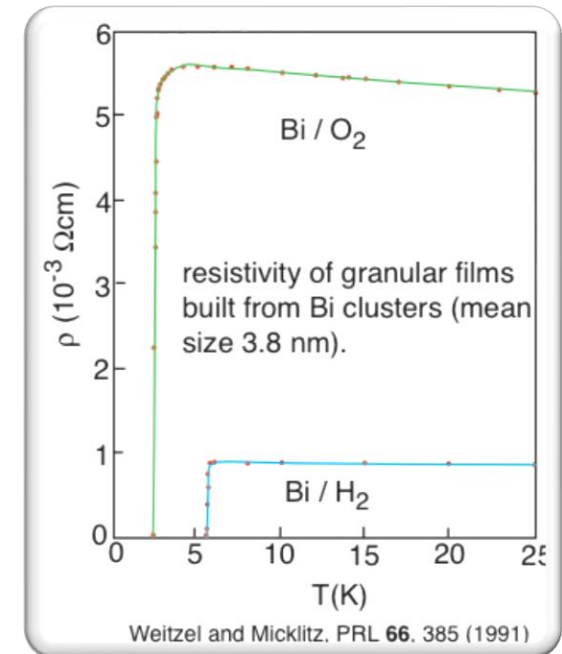


Supraleitfähigkeit in Bi-Nanoclustern



Oshima et al. Z. Phys. D 40534 (1997)

Widerstand von
körnigen
Schichten aus
Bi-Clustern
(mittlere Größe
3,8 nm)



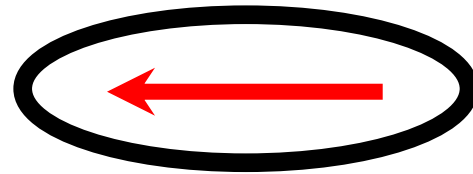
- Bulk-Bi ist nicht supraleitend.
- Granulare Filme aus Bi-Clustern sind bei einigen K supraleitend.
- T_c nimmt bei abnehmender Clustergröße zu.
- T_c ist abhängig von der Umgebung.

Supraleitung durch metallische
Oberfläche verursacht?

$$T_C = 1.13 \Theta_D \exp \left[\frac{-1}{N(E_F)V} \right]$$

Superparamagnetismus

- Bulk-Magnet: Umdrehen eines Spins kostet Energie $\approx k_B \theta_C$.
- Nano-Magnet: Alle Spins in der einzelnen Domäne können gleichzeitig gedreht werden. Das kostet viel weniger Energie.



$$\Delta E \approx V M B_{inside} \approx V \mu_0 M^2$$

Halbleiter-Nanopartikel

Bulk-Halbleiter: kleinste Energie zur Erzeugung eines E-H-Paares

$$E_{min} = E_g$$

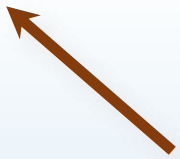
Halbleiter-Nano-Kristall

$$E_{min} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu r^2} - \frac{1.8e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r}$$

Quanten
Begrenzung



Coulomb
Wechselwirkung



2) Quanteneffekte in Halbleiter-Nanostrukturen

- a) → **Quantumconfinement**
→ **Ladungsträger in begrenzten Geometrien**

Buchtitel: Optical Properties of Solids
Autor: Mark Fox
Kapitel: 6 – Quantum Confinement Structures

Heisenberg'sche Unschärferelation

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\Delta x}$$

$$E_{\text{Confinement}} = \frac{\Delta p_x^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}$$

Große Effekte sind zu erwarten, wenn

$$E_{\text{Confinement}} > \frac{1}{2} k_B \cdot T$$

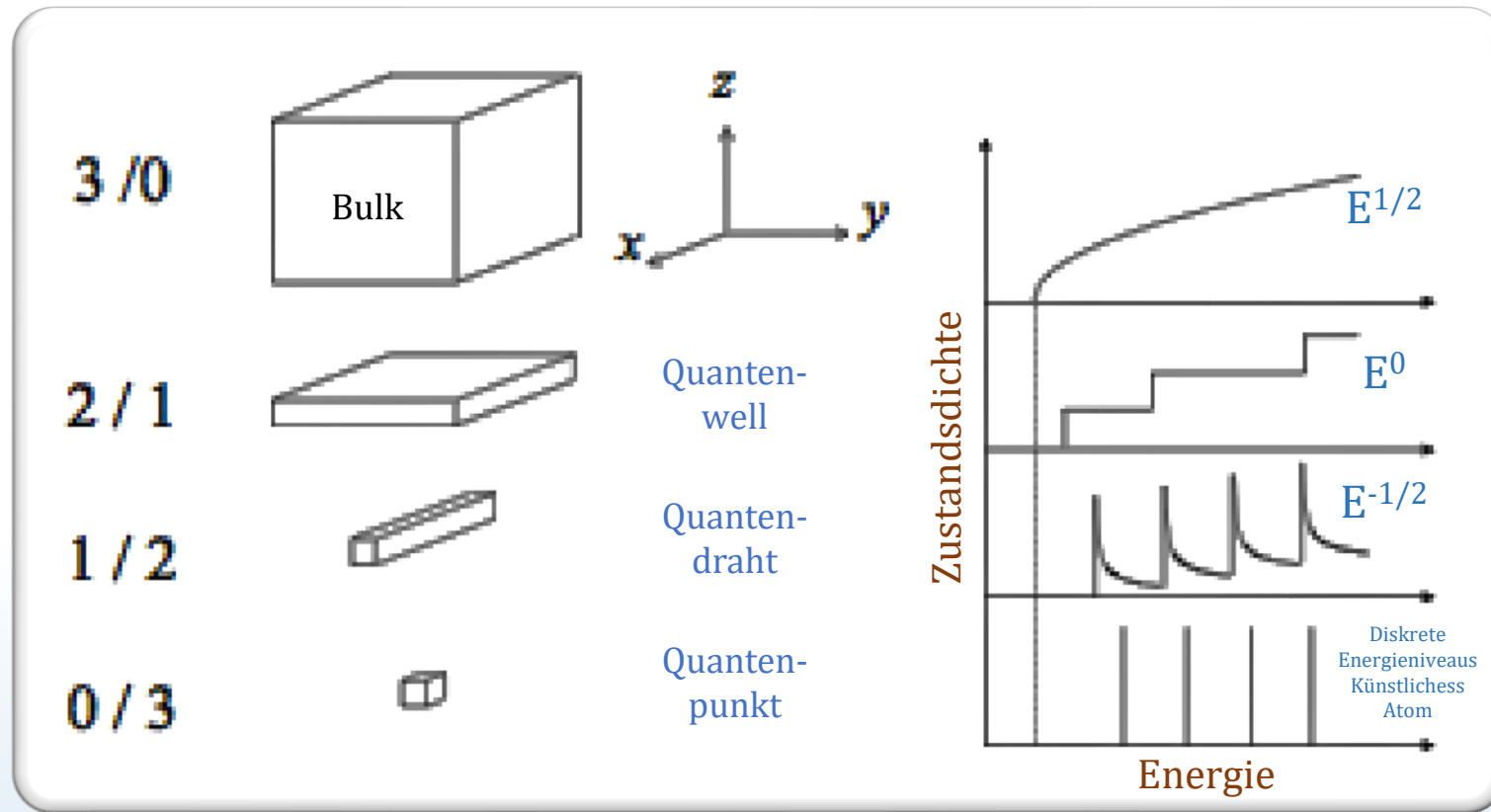
→

$$\Delta x \leq \sqrt{\frac{\hbar^2}{m_{e/h}^* \cdot k_B \cdot T}}$$

Bsp:	$m_e^* = 0,1m_0$	$T = RT$	→	$\Delta x \leq 5\text{nm}$
	$m_i^* = 0,001m_0$		→	$\Delta \leq 50\text{nm}$

b) Strukturen und Zustandsdichte

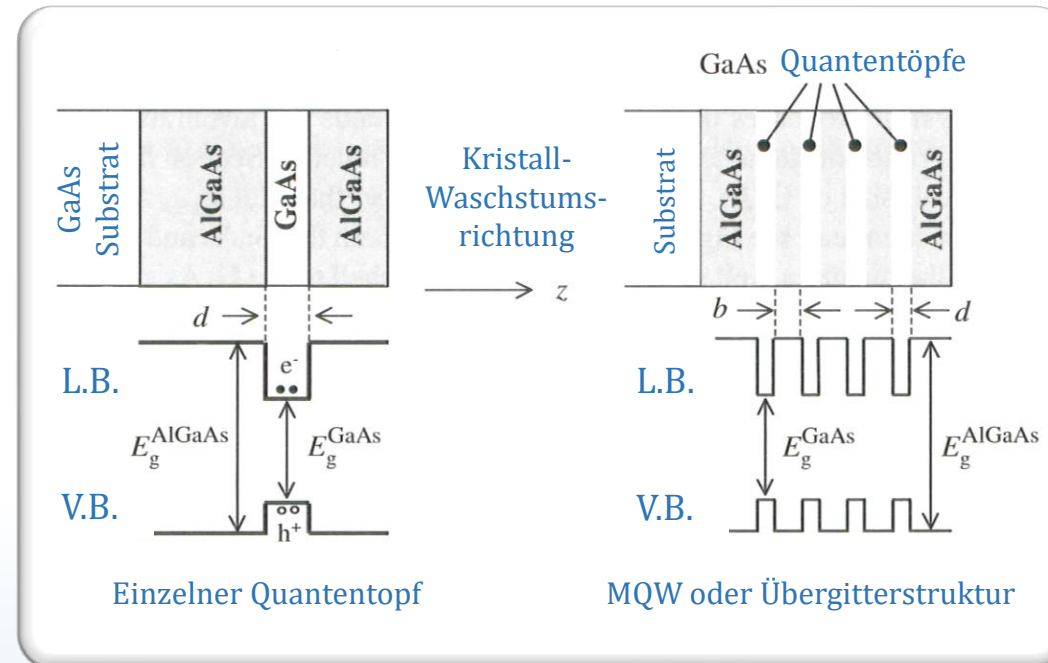
Dimensionalität / Confinement



Quantenconfinement

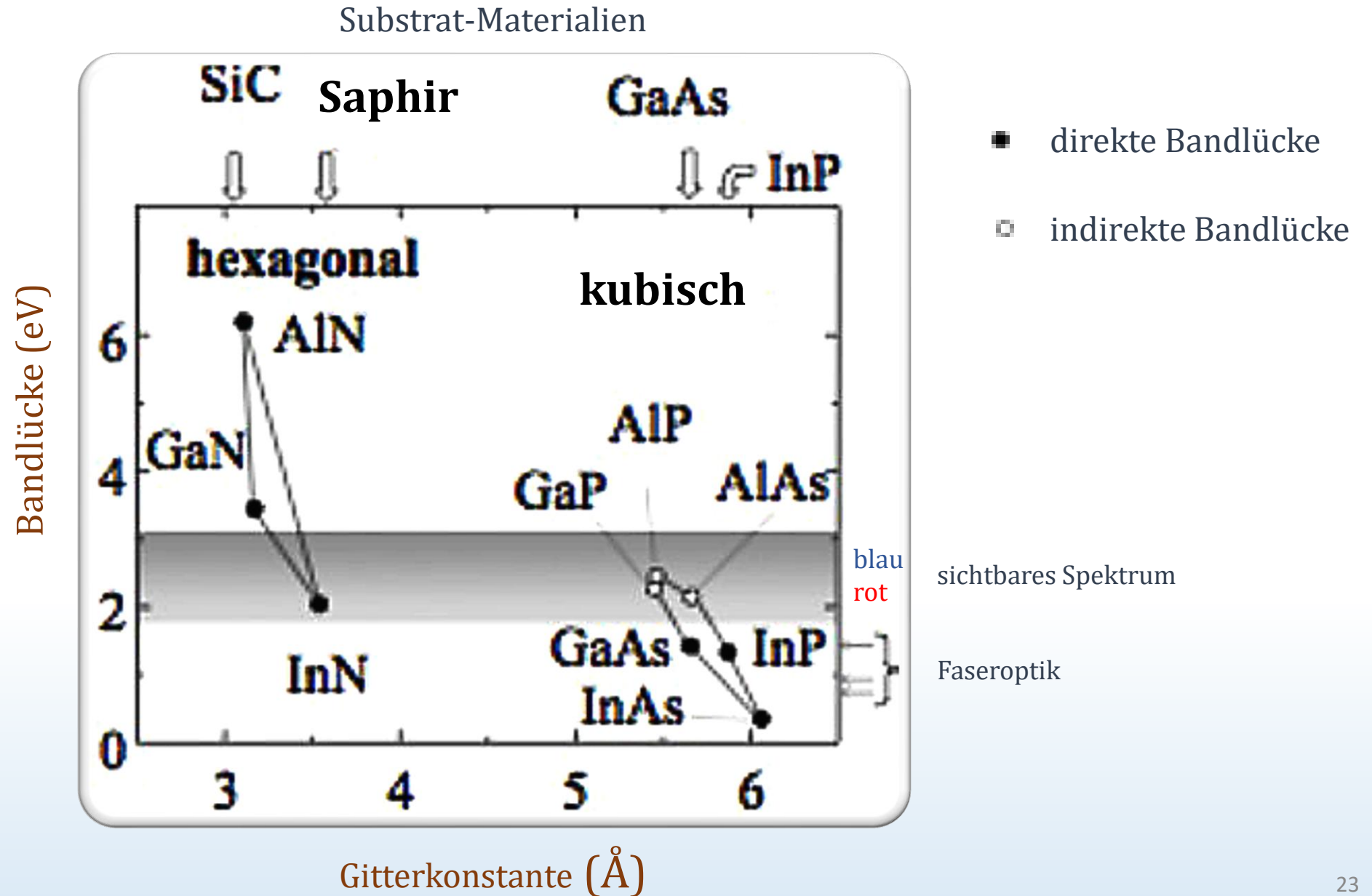
- Dimensionalität
- Quantumwells/töpfe
- Energiebereiche
- Optische Übergänge
- Quantenpunkte

Halbleiterquantentöpfe



- Molekularstrahlepitaxie (MBE)
- Metall-organische chemische Gasphasen Abscheidung (MOCVD)

Gitterkonstanten



Beispielaufgabe

Geg: III-V-Halbleiterverbindung

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Bandlücke: $E_g \cdot (x) = 1,42 + 1,087x + 0,438x^2$

Übergang: Direkter Halbleiter $\rightarrow$ Indirekter Halbleiter

$$x \leq 0,43$$

$$x > 0,43$$

a) Bestimmen Sie die Zusammensetzung, bei welchem Licht mit 800nm emittiert wird.

$$\lambda = 800\text{nm} \rightarrow E_g = 1,55\text{eV} \rightarrow x = 0,11$$

b) Bestimmen Sie den Wellenlängenbereich der mit einer $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ – Diode effizient erzeugt werden kann.

$$\text{Für } x = 0 \rightarrow E_g = 1,42\text{eV} \rightarrow \lambda_{\text{max}} = 870\text{nm}$$

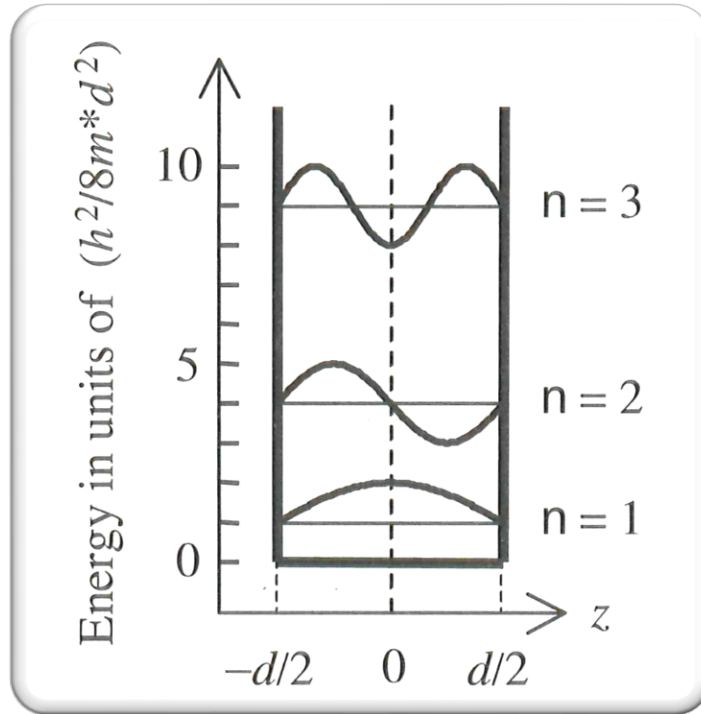
$$\text{Für } x = 0,43 \rightarrow E_g = 1,97\text{eV} \rightarrow \lambda_{\text{min}} = 630\text{nm}$$

$$E_g = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

$$c = 299,8 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{Js} = \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}} = 4,135 \cdot 10^{-15} \text{eV} \cdot \text{s}$$

Unendlich hoher Quantentopf



$$k_n = \frac{n\pi}{d}$$

$$E_n = \frac{(hk_n)^2}{2m^*} = \left(\frac{h^2\pi^2}{2m^*d^2} \right) n^2$$

$$\psi_n = \left(\frac{2}{d} \right)^{1/2} \sin \left(k_n z + \frac{n\pi}{2} \right)$$

- Symmetrie bei $z=0 \rightarrow$ die Wellenfunktionen haben bestimmte/eindeutige Paritäten
- ψ_n hat $(n-1)$ Sattelpunkte
- E_n hängt von m^* ab, folglich Aufspaltung zw. schweren und leichten Löchern

c) Energiezustände Quantentopf

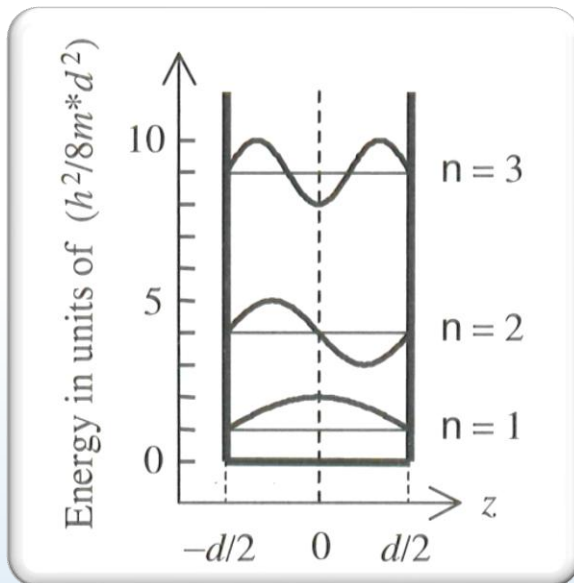
Zweidimensionales (2D) Elektronengas

$$E_{(n,k)}^{total} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

X,Y-Richtung: $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

$$\psi_k(x, y) = \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot e^{i \cdot \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Schrödingergleichung für den unendlich tiefen Quantentopf $V_0 = \infty$



$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} = E \varphi(z)$$

Wellenzahl $k_n = \frac{n \cdot \pi}{d}$

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \sin \left(k_n \cdot z + \frac{n\pi}{2} \right)$$

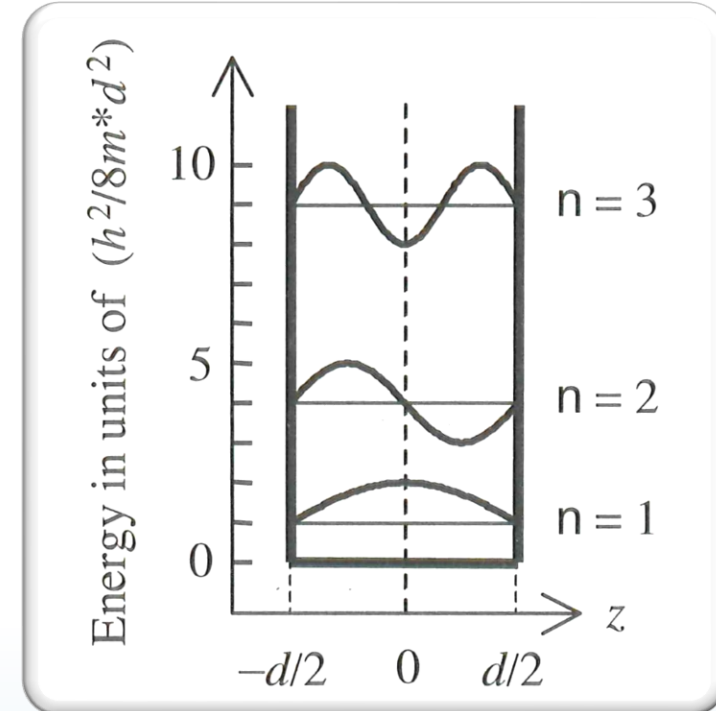
c) Energiezustände Quantentopf

$$E_{(n,k)}^{total} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

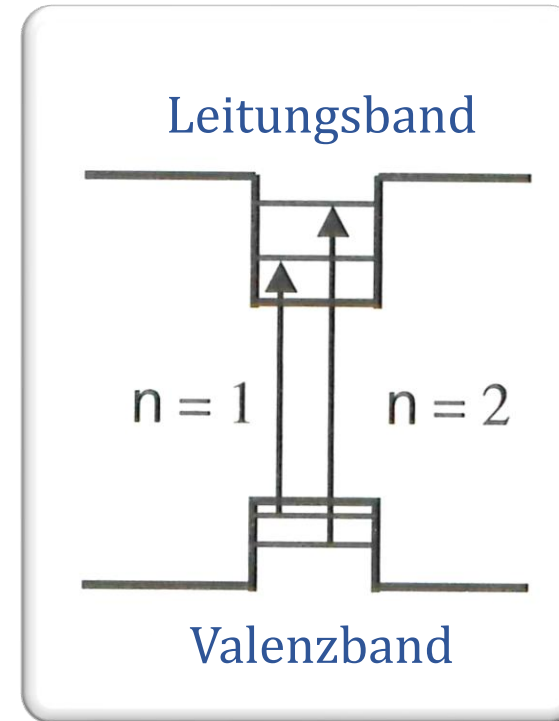
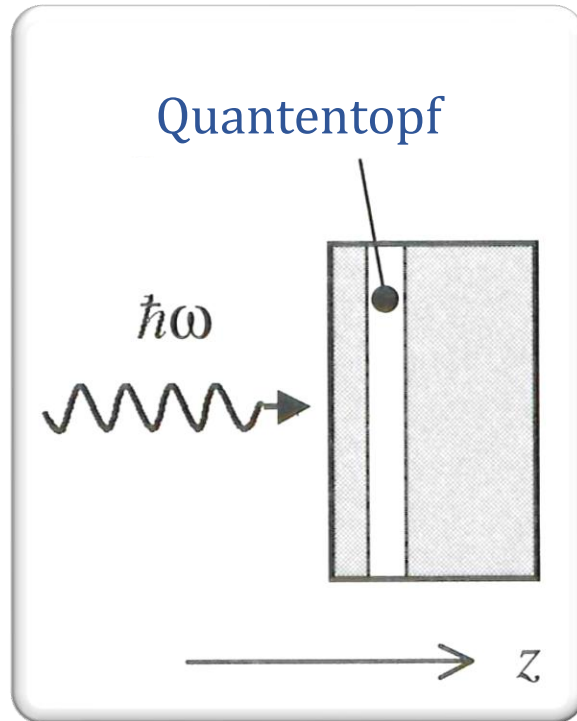
$$E_n = \frac{\hbar^2 \cdot k_n^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n \cdot \pi}{d} \right)^2$$

Bsp.: Quantentopf mit Breite $d = 10\text{nm}$
 Masse der Elektronen $m^* = 0,1m_e$

$$\rightarrow E_1 = 38\text{ meV} \quad E_2 = 150\text{ meV}$$

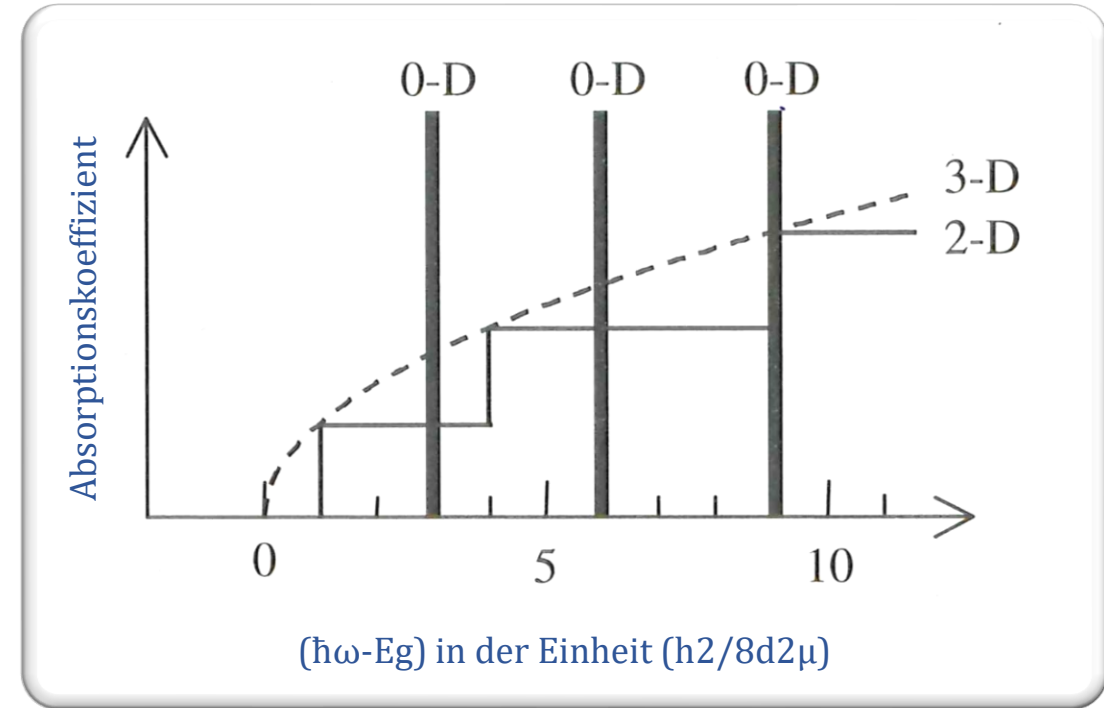
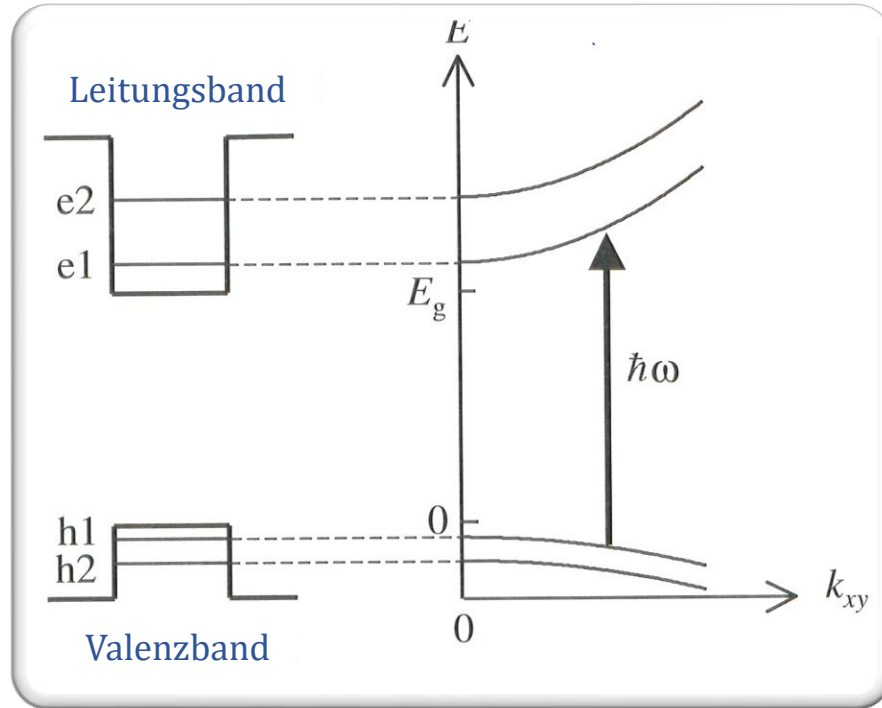


Optische Übergänge



- Licht wird bei senkrechtem Einfallswinkel in die x,y Ebene polarisiert
- Paritätsauswahlregel: $\Delta n = \text{geradzahlig}$
- Beim unendlichen Quantentopf: $\Delta n = 0$

2-D Absorption



- Absorption $\approx$ Zustandsdichte
- Konstante Zustandsdichte in 2-D: $g_{2D}(E) = m/\pi\hbar^2$
- Bandkante verschiebt sich nach $(E_g + E_{e1} + E_{hh1})$

d) Absorption im Quantentopf

Absorption ($\alpha > 0$) bei minimal

Vergleich der Energien: schweres und leichtes Loch

$$\hbar\omega = E_g + E_{hh1} + E_{e1}$$

$$(E_{hh} < E_{lh})$$

Berücksichtigung der Parabolischen Banddispersion ($E - k_{xy}$)

$$\hbar \cdot \omega = E_g + \left(E_{hh1} + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_{hh}^*} \right) + \left(E_{e1} + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_e^*} \right) = E_g + E_{hh1} + E_{e1} \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2\mu}$$

Optische Übergänge treten bei $k_{xy} = 0$ auf

d) Absorption im Quantentopf

Zustandsdichte ist unabhängig von der Energie

$$g_{2D}(E) = \frac{\mu}{\pi \hbar^2}$$

μ = reduzierte Masse der Ladungsträger

Auswahlregeln für den optischen Übergang $n = 0$

1. Übergang

$$\hbar \cdot \omega = E_g + E_{hh1} + E_{e1}$$

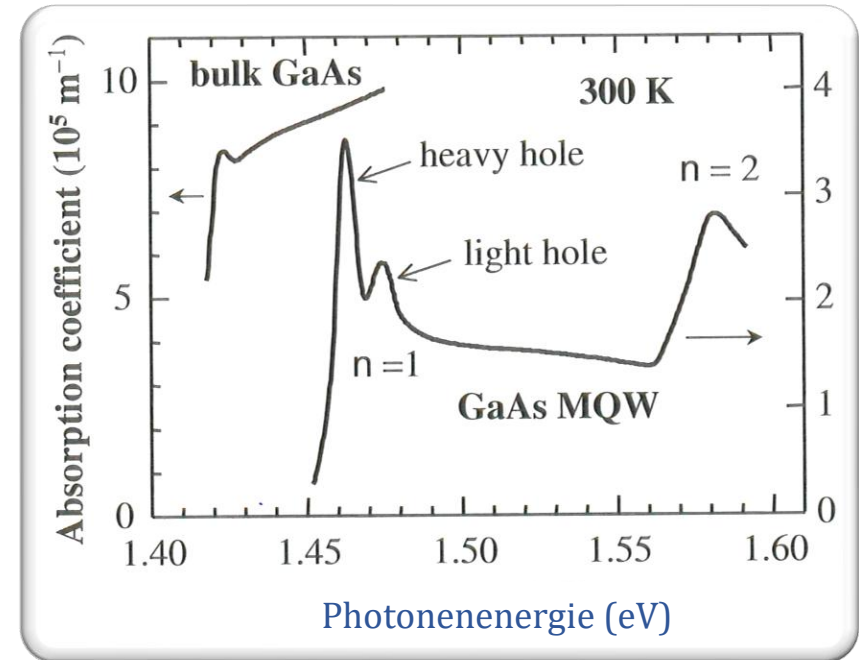
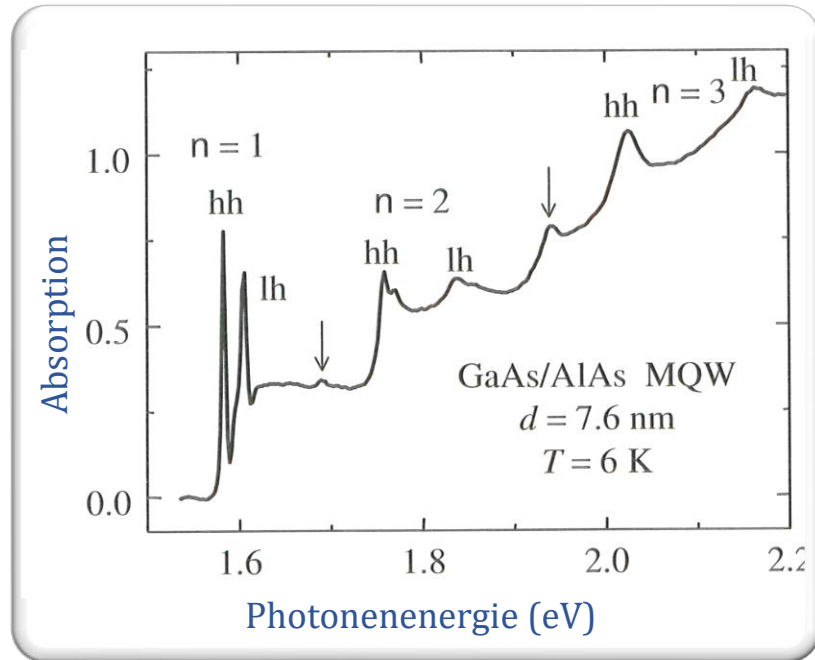
2. Übergang

$$\hbar \cdot \omega = E_g + E_{hh2} + E_{e2}$$

Allgemein

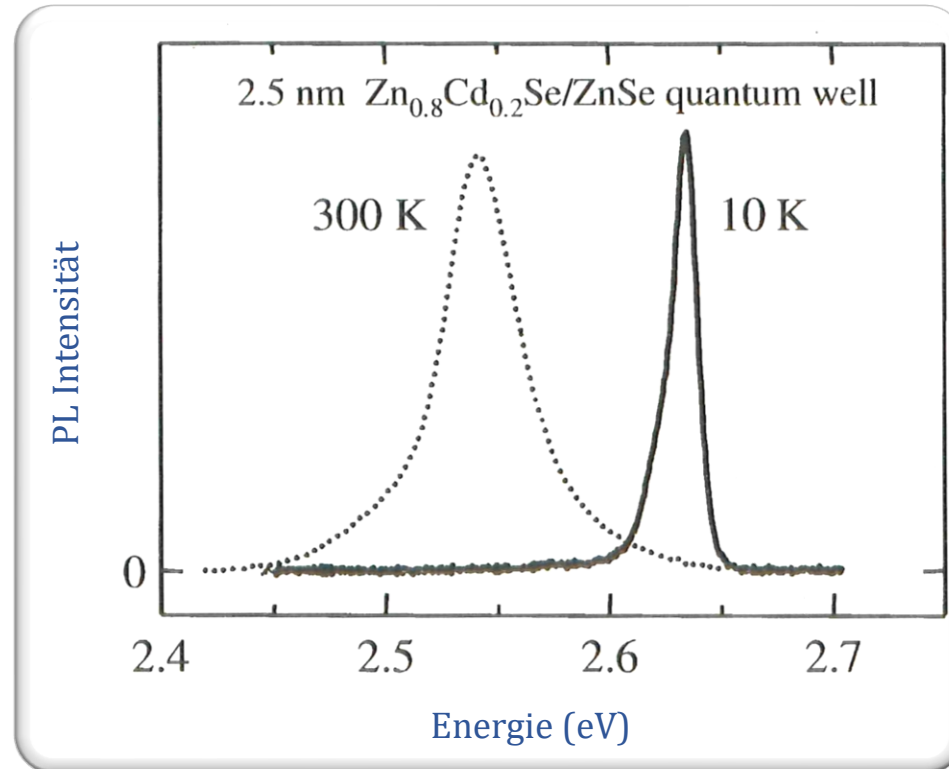
$$\hbar \cdot \omega = E_g + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_e^* d^2} + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_h^* d^2} = E_g - \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2\mu d^2}$$

GaAs Quantentopf



- Effekte durch Exzitonen im Quantentopf verstärkt: stark bei Raumtemperatur
- 2-D: $R_{x2D} = 4 \times R_{x3D}$
- Im typischen GaAs Quantentopf: $R_x \approx 10 \text{ meV} \approx 2,5 \times R_x \text{ (Bulk GaAs)}$
- Aufspaltung von schweren und leichten Löcherübergängen

Emissionsspektrum

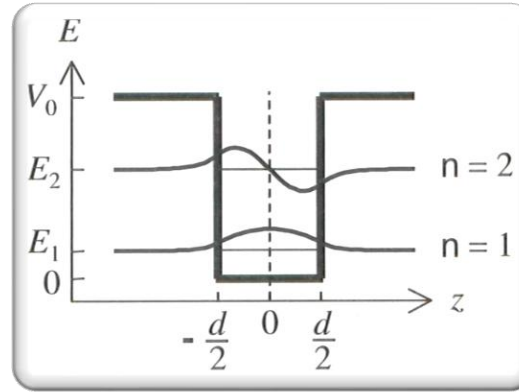


$$E_g = 2,55\text{eV}(10\text{K})$$

$$E_g = 2,45\text{eV}(300\text{K})$$

- Emissionsenergie verschiebt sich von E_g nach $(E_g + E_{e1} + E_{hh1})$
- Abstimmung von λ durch Änderung von d
- Heller als Bulkmaterial aufgrund besseren Elektron-Loch-Überlapps
- Verwendet in Laserdioden und LEDs

e) **Endlich tiefer Potentialtopf**



Lösung der Schrödinger-Gleichung im Topf

$$\varphi_{Topf}(z) = c \cdot \sin(k \cdot z) \quad \text{für gerade } n (2, 4, 6)$$

$$\varphi_{Topf}(z) = c \cdot \cos(k \cdot z) \quad \text{für ungerade } n (1, 3, 5)$$

k für endlichen und unendlich tiefen Potentialtopf unterscheiden sich

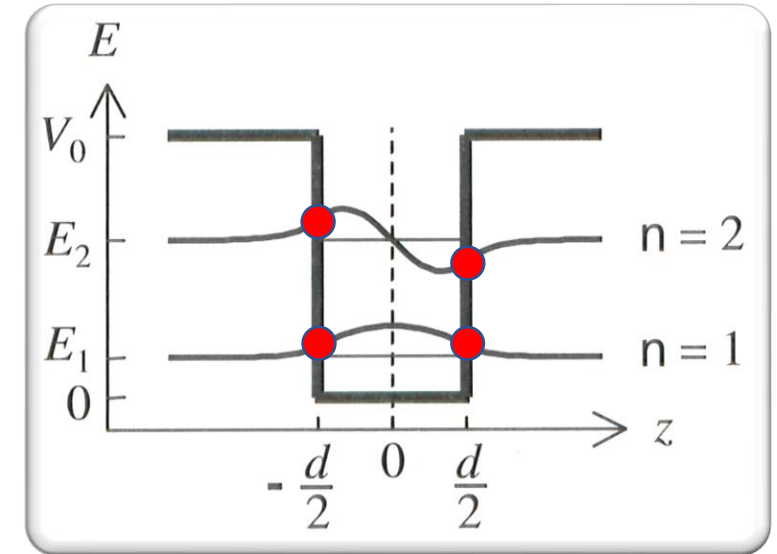
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{Topf}^*}$$

Topf $\rightarrow$ Material beachten und deren elektronische Eigenschaften

e) Endlich tiefer Potentialtopf

Schrödinger-Gleichung in den Barrieren/Wand

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{Wand}^*} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} + V_0 \cdot \varphi(z) = E \cdot \varphi(z)$$



Lösungsansatz für die Barriere/wand:

$$\varphi_b(z) = C \cdot e^{\pm \kappa \cdot z}$$

wobei gilt:

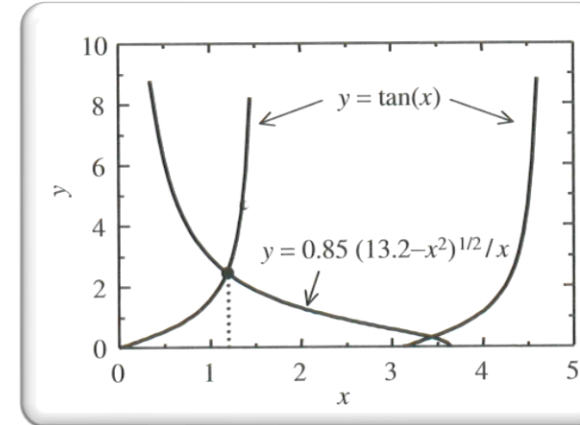
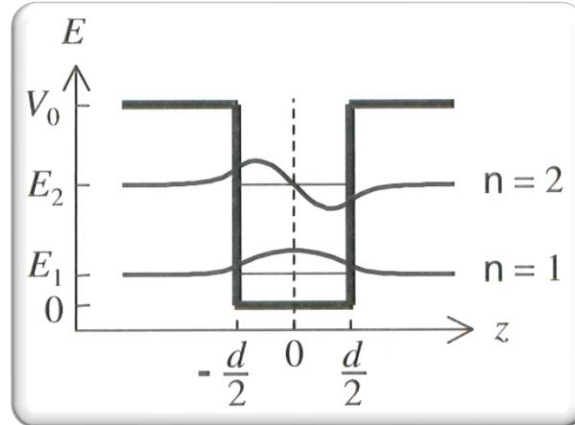
$$\frac{\hbar^2 \cdot \kappa^2}{2m_{Wand}^*} = V_0 - E$$

Folgende Randbedingungen müssen erfüllt sein:

$$\varphi_{Topf} \left(\pm \frac{d}{2} \right) = \varphi_{Wand} \left(\pm \frac{d}{2} \right)$$

$$\frac{1}{m_{Topf}^*} \left(\frac{d\varphi_{Topf}}{dz} \right)_{z=\pm \frac{d}{2}} = \frac{1}{m_{Wand}^*} \left(\frac{d\varphi_{Wand}}{dz} \right)_{z=\pm \frac{d}{2}} \quad \text{Stetigkeit}$$

f) Endlicher Quantentopf



- Wellenfunktionen tunneln in die Barriere
- Wellenfunktionen können über ihre Parität und Sattelpunkte bestimmt werden
- Confinement-Energie ist gegenüber dem unendl. Topf reduziert
- Graphische Lösung um Energie zu bestimmen

Beispiel: GaAs/AlGaAs

$$\begin{aligned} V_0 &= 0,3 \text{ eV}, \\ m_w^* &= 0,067 m_e, \\ E_1 &= 32,5 \text{ meV} \end{aligned}$$

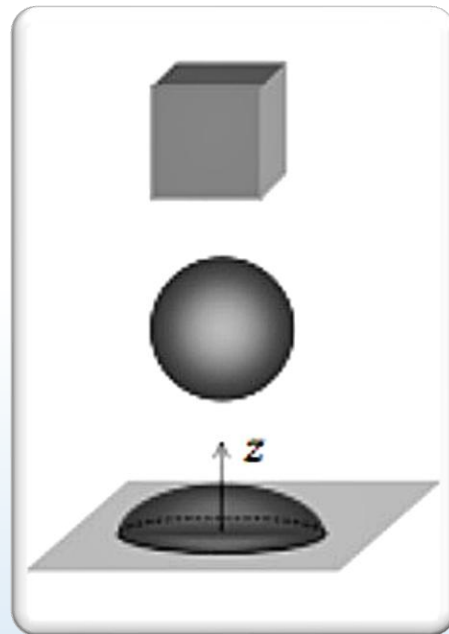
$$\begin{aligned} d &= 10 \text{ nm} \\ m_b^* &= 0,092 m_e \end{aligned}$$

unendl. Quantentopf: $E_1 = 57 \text{ meV}$

f) Quantendot und künstliche Atome

- Merkmale:
1. Diskrete / quantisierte Energiezustände
 2. Energiezunahme mit $\frac{1}{d^2}$
 3. Der Grundzustand $n = 1 \rightarrow$ können nur 2 Ladungsträger aufnehmen

Formen für Quantendots



Quader bzw. kastenförmiger Quantendot

Sphärisches Nanopartikel mit dem
Durchmesser D_p

Linsenförmiger Quantenpunkt

1) Kastenförmiger Quantendot

Einschränkung in einer Dimension

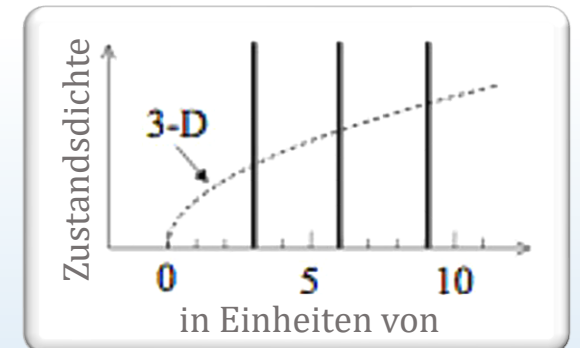
$$E_n = \frac{\hbar^2 \cdot k_n^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n \cdot \pi}{d} \right)^2$$

Quaderpunkt



Einschränkung in drei Dimensionen

$$E_{(n_x, n_y, n_z)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_x^2}{d_x^2} + \frac{n_y^2}{d_y^2} + \frac{n_z^2}{d_z^2} \right)$$



2) Spährischer Quantendot / kugelförmiges Nanopartikel

Modell: Efros + Efros (1982)

Potentialtopf unendlich tief:

$$E \Rightarrow \infty$$

Kugelsymmetrischer Potentialtopf:

$$E_{g,op} = E_g + E_{kin,e} + E_{kin,h}$$

$$E_{kin} = \frac{h^2}{2m^* \cdot D_p^2}$$

$$E_{g,op} = E_g + \frac{h^2}{2D_p^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_n^*} \right) = E_g + \frac{h^2}{2\mu \cdot D_p^2}$$

Modell: E. Bruis (1984)

Journal of Chemical Physics, Vol. 80, Seite 4423

Bildung von Exzitonen in den Quantendot/Nanopartikeln aufgrund von Coulomb - WW

$$E_{col} = - \frac{C_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot \epsilon_R \cdot D_p}$$

$$C_1 = 3,572$$

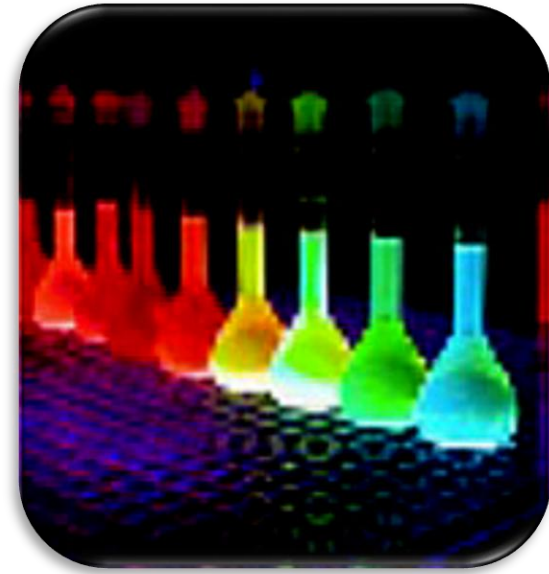
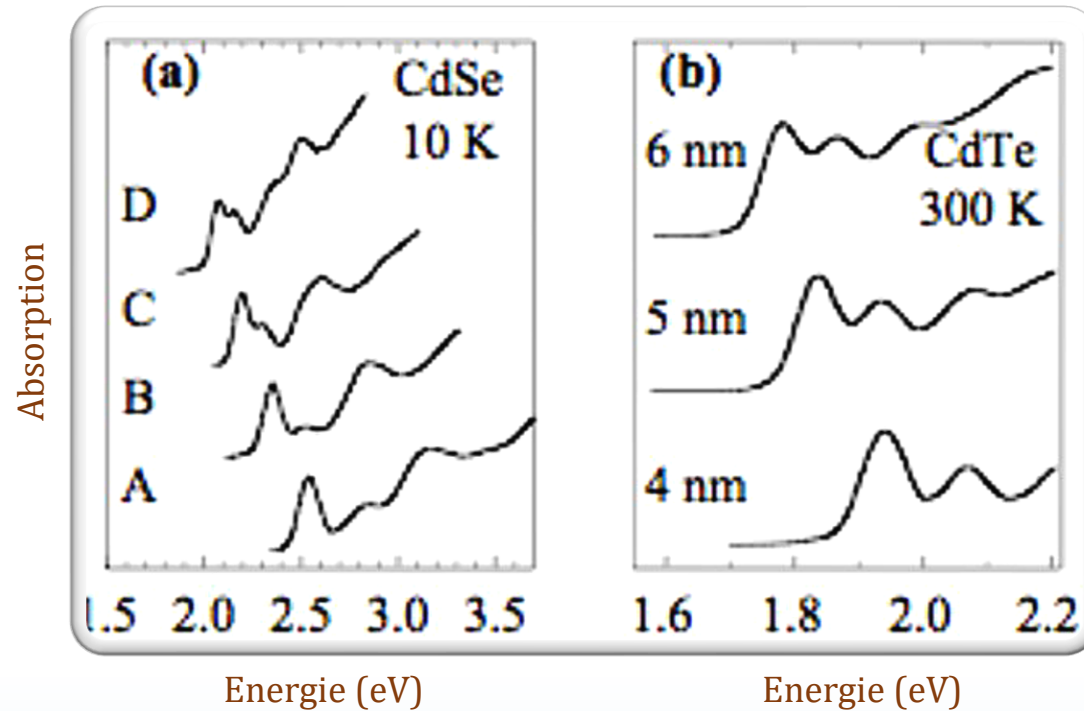
→ → →

$$E_{g,op} = E_g + \frac{h^2}{2D_p^2} \left[\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_n^*} \right] - \frac{3,572e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_R \cdot D_p}$$

Berücksichtigung der Coulomb-Energie von Loch und Elektron, die zu einer Energiereduktion führt.

Loch und Elektron bewegen sich in einem Medium mit hoher dielektrischen Zahl

Kolloidiale Quantenpunkte



- Gefunden auch in dotiertem halbleitendem Glas
- Kommerziell verfügbar

3) Endlich tiefer sphärischer Potentialtopf

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{(r)} \right] \psi_{(r)} = E \psi_{(r)}$$

Randbedingung:

$$-V_0 \text{ für } r < R_0$$

Innerhalb des Q-Dot

$$V_{(r)} = 0 \text{ für } r > R_0$$

Außerhalb des Q-Dot ($2 R_0 = D_P$)

Lösungsansatz:

$$\psi_{(r)} = R_{nl} Y_{lm}(v, \Phi)$$

const ← Kugelsymmetrisch

Quantenzahlen: n, l, m

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \cdot l(l+1)}{2m^* \cdot r^2} + V_{(r)} \right] R_{nl}(r) = E_{nl} \cdot R_{nl}(r)$$

Energie:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{C_{nl}^2 \cdot \pi^2}{R^2}$$

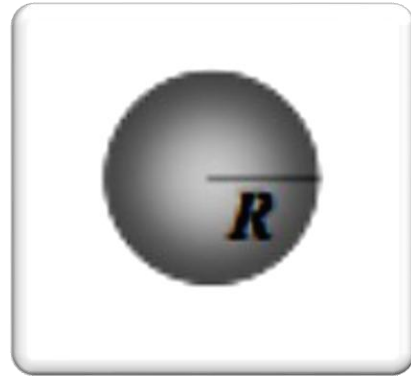
(Ohne Korrekturterm für
Coulomb-Wechselwirkung)

Lösung:

nur numerisch möglich

3) Endlich tiefer sphärischer Potentialtopf

sphärischer Q-Punkt

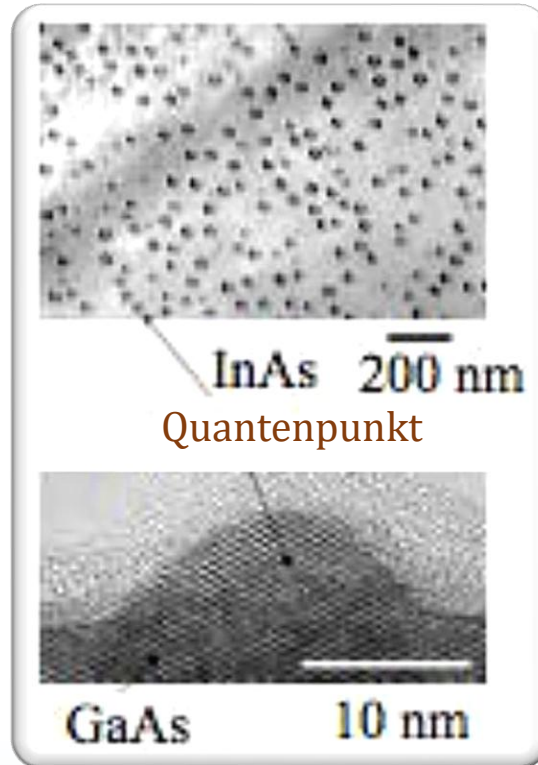


$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{C_{NL}^2 \pi^2}{R^2} \right)$$

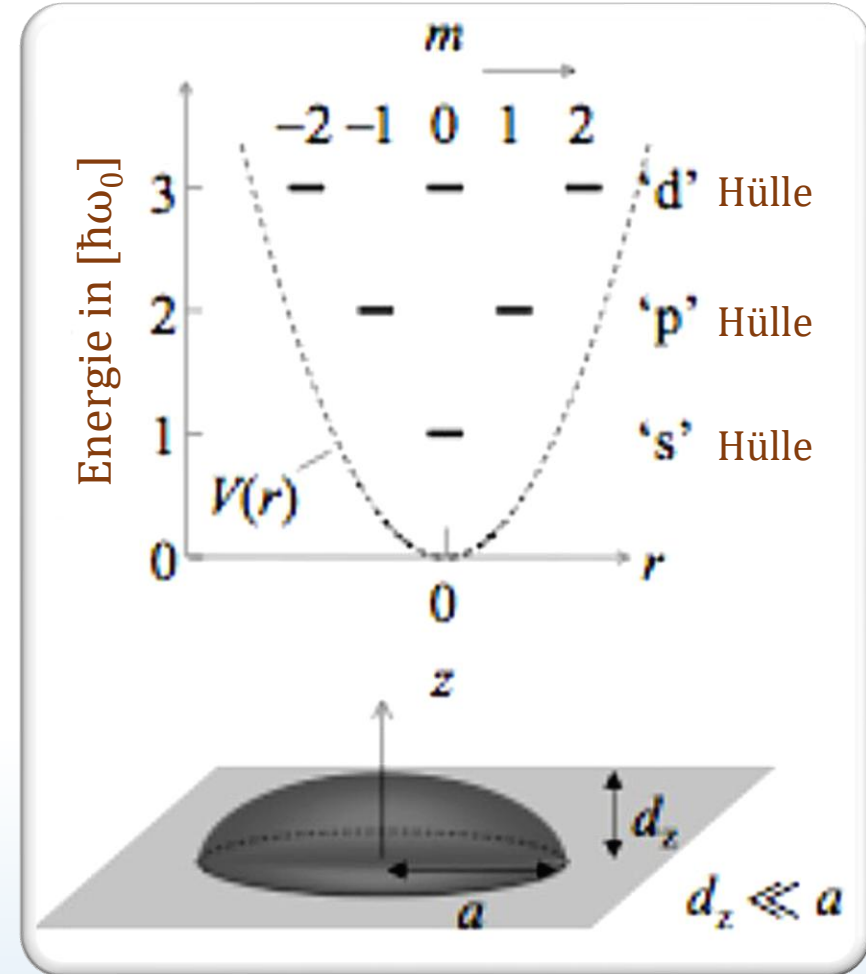
$$\begin{aligned} C_{10} &= 1 \\ C_{11} &= 1.43 \\ C_{12} &= 1.83 \\ C_{20} &= 2 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Zustand	Quantenzahlen		Entartung g	Korrekturfaktor C_{nl}
	n	l		
Grundzustand	1	0	2	1
1. Angeregter	1	1	6	1,43
2. Angeregter	1	2	10	1,83
3. Angeregter	2	0	2	2
4. Angeregter	1	3	14	2,22

Selbstorganische epitaktische Q-Punkte



$$E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n_z^2}{2m^* d_z^2} + (n + 1) \hbar \omega_0$$



4) Linsenförmige Quantendots

Berechnung in Zylinder-Koordinaten(r, Φ, z)

Annäherung des Potentials durch einen harmonischen Oszillator $\rightarrow V(r, \Phi) \approx r^2$

Separate Schrödinger-Gleichungen

In der Ebene:
$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{xy}^2 + \frac{1}{2} m^* \cdot \omega_0^2 \cdot r^2 \right] \psi(r, \Phi) = E^{xy} \psi(r, \Phi)$$

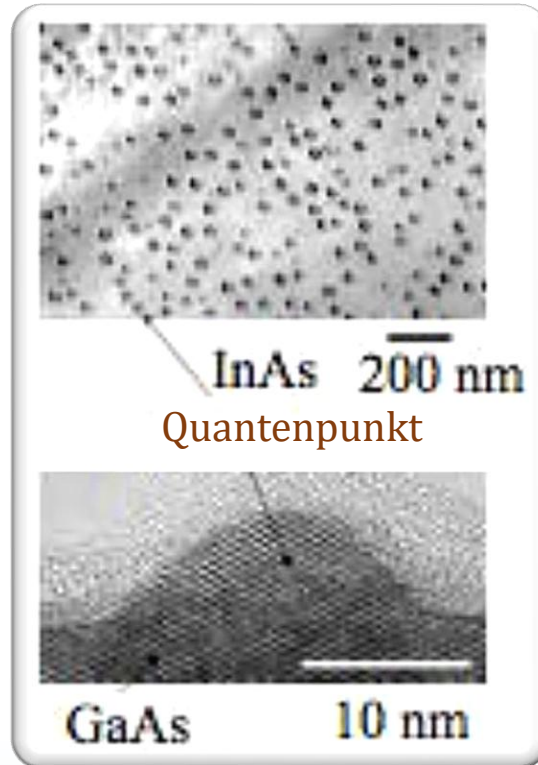
In z-Richtung:
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_{(z)} \right] \varphi_{(z)} = E^z \varphi_{(z)}$$

Gesamtenergie:
$$E = E^{xy} + E^z$$

Aufgrund der kleinen Dimensionen in z-Richtung nur ein Zustand $\rightarrow E_1^z$

$$E^{xy} = (n + 1) \hbar \cdot \omega_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots \rightarrow E_n = E_1^z + (n + 1) \hbar \cdot \omega_0$$

Selbstorganische epitaktische Q-Punkte



$$E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n_z^2}{2m^* d_z^2} + (n + 1) \hbar \omega_0$$

