

---

# Optische Eigenschaften von InGaAs-Quantenpunkten: Vielteilchen-Beschreibung der Multi-Exziton-Zustände im direkten Vergleich zum Experiment

---

von  
Christian Carmesin





---

# Optische Eigenschaften von InGaAs-Quantenpunkten: Vielteilchen-Beschreibung der Multi-Exziton-Zustände im direkten Vergleich zum Experiment

---

## Masterarbeit

im Fachbereich Physik/Elektrotechnik  
der Universität Bremen

vorgelegt von: Christian Carmesin

geboren am: 03.11.1989, New York

Erster Gutachter: Prof. Dr. Frank Jahnke

Zweiter Gutachter: Prof. Dr. Tim Wehling

Eingereicht am: 15. April 2015



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung und Motivation</b>	<b>1</b>
<b>2. Theoretische Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1. Volumen-Halbleitersysteme . . . . .	4
2.1.1. Kristallstruktur: Einheitszelle . . . . .	4
2.1.2. Elektronen im Kristall: Bloch-Theorem . . . . .	5
2.1.3. Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone . . . . .	6
2.1.4. Bandstruktur des Volumenkristalls . . . . .	7
2.2. Niederdimensionale Halbleitersysteme . . . . .	10
2.3. Halbleiter-Quantenpunkte . . . . .	11
2.3.1. Experimentelle Verfahren zur Herstellung . . . . .	12
2.3.2. Energieniveau-Schema im Quantenpunkt . . . . .	14
2.4. Einteilchen-Zustände im Quantenpunkt . . . . .	16
2.4.1. Effektivmassen-Modell und Einhüllenden-Näherung . . . . .	16
2.4.2. Formulierung des Hamilton-Operators . . . . .	21
2.4.2.1. Einteilchen-Anteil . . . . .	21
2.4.2.2. Wechselwirkungs-Anteil . . . . .	22
2.5. Exakte Diagonalisierung . . . . .	23
2.5.1. Klassifizierung der Eigenzustände . . . . .	23
2.5.2. Aufbauen der Hamilton-Matrix . . . . .	24
2.5.2.1. Diagonalisierung der Blöcke . . . . .	26
2.5.3. Wechselwirkung mit einem Lichtfeld . . . . .	26
2.5.4. Berechnung der optischen Spektren . . . . .	27
2.5.4.1. Ausnutzen von Unterräumen . . . . .	28
2.6. Exzitonen im Quantenpunkt . . . . .	29
2.6.1. Exziton im Volumenkristall . . . . .	30
2.6.2. Exziton-Komplexe im Quantenpunkt . . . . .	30
<b>3. Ergebnisse</b>	<b>33</b>
3.1. Experimentelle Ergebnisse . . . . .	33
3.2. Theoretische Ergebnisse . . . . .	36
3.2.1. Gleiche Oszillatorlängen . . . . .	37
3.2.2. Verschiedene Oszillatorlängen . . . . .	39
3.2.2.1. Diagonaler Hamilton-Operator . . . . .	39
3.2.2.2. Anpassen der Parameter . . . . .	40
3.2.3. Feinstruktur . . . . .	42
3.2.4. Exziton und Biexziton . . . . .	43
3.2.5. Angeregtes Trion . . . . .	45
3.2.5.1. Trion-Linie . . . . .	47
3.2.6. Lage der positiven Trion-Linie . . . . .	47

3.2.7. Einfluss der d-Schale . . . . .	48
3.2.8. Identifizierung der fehlenden Linie . . . . .	50
<b>4. Zusammenfassung</b>	<b>52</b>
<b>5. Ausblick</b>	<b>53</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>i</b>
A.1. Berechnung der Coulomb-Matrixelemente . . . . .	ii
A.1.1. d-Schale . . . . .	iv
A.2. Berechnung der Matrixelemente des Austausch-Hamilton-Operators zur Feinstruktur . . . . .	v
A.2.1. Exziton und Biexziton . . . . .	vi
A.2.2. Angeregtes Trion . . . . .	vii
A.3. Literaturwerte zur Feinstruktur-Aufspaltung . . . . .	ix
<b>Danksagung</b>	<b>xi</b>
<b>Selbstständigkeitserklärung</b>	<b>xiii</b>

# 1. Einleitung und Motivation

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit den optischen Eigenschaften von Halbleiter-Quantenpunkten. Ziel ist es, die optischen Eigenschaften von Quantenpunkten unter Verwendung quantenmechanischer Modelle theoretisch herzuleiten. Diese Arbeit zeichnet sich dadurch aus, dass experimentelle Messungen zu dem hier betrachteten Quantenpunkt vorliegen und somit ein detaillierter Vergleich von Theorie und Experiment möglich ist. Dazu erfolgte eine Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. P. Michler an der Universität Stuttgart, in der die Messungen durchgeführt wurden.

Fortschritte in der Herstellung von Halbleitern im Nanomaßstab haben es ermöglicht, niederdimensionale Systeme zu erzeugen. Diese erhält man, wenn man die Bewegungsfreiheit der Ladungsträger gegenüber einem 3D-Halbleitersystem in einer oder mehreren Dimensionen einschränkt. Liegt die räumliche Ausdehnung der zugrundeliegenden Struktur in allen Raumrichtungen in der Größenordnung der de-Broglie-Wellenlänge, so spricht man von einem Quantenpunkt. Dieser besteht aus einer inselartigen Ansammlung von mehreren tausend Atomen. Durch die Einbettung in ein Halbleiter-Volumenmaterial mit größerer Bandlücke wird durch den Bandversatz ein Einschluss-Potential erzeugt. Dieses Potential bedingt einen Einschluss von Ladungsträgern in allen drei Raumrichtungen, was typischerweise zu einem diskreten Energiespektrum mit delta-artiger Zustandsdichte führt. Eine solche Zustandsdichte ähnelt der von Atomen, weshalb Quantenpunkte in der Literatur auch anschaulich als 'künstliche Atome' bezeichnet werden. Allerdings handelt es sich bei Quantenpunkten um ein komplexes Vielteilchen-System, das aus einer Ansammlung von mehreren tausend Atomen besteht, die wiederum in einen Festkörper eingebunden sind. Der Vorteil von Quantenpunkten liegt in der Abhängigkeit des Einschlusspotentials von der Größe, Geometrie und Materialzusammensetzung sowie Verspannungen. Dadurch ist es möglich, die Quantenpunkt-Eigenschaften durch geeignete Wahl der Wachstumsparameter zu kontrollieren [1, 2, 3]. So lässt sich beispielsweise die Emissionswellenlänge über einen großen Bereich einstellen. Dies ist bereits aus dem einfachen Modell des eindimensionalen quantenmechanischen Potentialtopfes ersichtlich. Wegen der diskreten Zustände zeigen Quantenpunkte eine geringe Temperaturabhängigkeit [4, 5, 6]. Dies sowie die jahrelange industrielle Erfahrung mit III-V-Halbleitern macht Halbleiter-Quantenpunkte zu einem herausragenden Material für optoelektronische Bauelemente [7, 8, 9, 10]. Allerdings sind diesem scheinbar weitreichenden Anwendungspotential Grenzen gesetzt: Die hier beschriebenen Quantenpunkte entstehen durch selbstorganisiertes Wachstum und treten in hohen Flächendichten sowie unterschiedlichen Formen und Größen auf. Da die optischen Eigenschaften von den Wachstumsparametern abhängen, ist es schwierig die Eigenschaften von Ensembles dieser Quantenpunkte zu kontrollieren, was aber für viele Anwendungen wichtig wäre.

Eine denkbare Anwendung von Quantenpunkten ist in der Informationsübertragung. Dazu werden heutzutage Glasfaserkabel verwendet, da diese große Bandbreiten und Über-

tragungsraten bei geringen Verlusten und Störanfälligkeiten ermöglichen [11]. Die Lichtdämpfung, d.h. Absorption und Streuung von Lichtstrahlen, innerhalb der Glasfaser ist wellenlängenabhängig. Daher werden für die Signalübertragung Spektralbereiche verwendet, in denen die Dämpfung minimal ist. Den Bereich 1260 – 1360 nm bezeichnet man als O-Band (Original-Band) und den Bereich 1530 – 1565 nm als C-Band (Conventional-Band) [12]. Um bei diesen Absorptionsminima übertragen zu können, sind Licht-Emitter im passenden Spektralbereich notwendig. Hierfür spielt das InGaAs/GaAs Materialsystem mit einer direkten Bandlücke im infraroten Spektralbereich eine wichtige Rolle. Durch Anpassen der Wachstumsparameter ist es möglich, InGaAs-Quantenpunkte herzustellen, die klassisches Licht der passenden Wellenlängen aussenden [13].

Neben dem Spektralbereich ist die begrenzte Abhörsicherheit ein weiteres Problem bei der klassischen Informationsübertragung. Daher wurden quantenmechanische Methoden entwickelt, die zum einen das Abhören erschweren und zum anderen durch statistische Auswertung der Daten von Sender und Empfänger Hinweise darauf geben, ob die Übertragung abgehört wurde. Dies fällt unter die Bezeichnung Quanten-Kryptografie. Hierzu wurden bereits Protokolle entwickelt, das bekannteste ist das sog. BB84-Protokoll [14]. Für die konkrete Umsetzung werden meist verschränkte Photonenpaare verwendet. Diese können mit Hilfe von Quantenpunkten erzeugt werden [13].

Neben dem bisher diskutierten großen praktischen Anwendungspotential zeichnen sich Quantenpunkte dadurch aus, dass sie mit Hilfe fundamentaler quantenmechanischer Modellsysteme wie dem Teilchen im Potentialkasten und dem quantenmechanischen harmonischen Oszillator beschrieben werden können. Außerdem können mit der Methode der exakten Diagonalisierung Vielteilchen-Effekte der im Quantenpunkt eingeschlossenen Ladungsträger detailliert beschrieben werden. Daher sind Quantenpunkte auch in theoretischer Hinsicht ein interessantes Themengebiet.

Anschließend an diese einleitende Motivation wird ein kurzer Überblick über die Struktur der Arbeit gegeben:

Zunächst werden einige Begriffe und Grundlagen der Festkörper-Theorie anhand von Halbleiter-Volumenmaterialien erläutert. Anschließend daran werden niederdimensionale Halbleiter-Strukturen beschrieben. Dabei sind insbesondere die Eigenschaften sowie die experimentellen Methoden zur Herstellung von selbstorganisierten Quantenpunkten von Interesse. Nachdem die genaue Beschaffenheit dieser Quantenpunkte beschrieben wurde, beginnt die Modellentwicklung. Ausgangspunkt dafür ist eine Beschreibung der Einteilchen-Wellenfunktionen im Quantenpunkt. Diese Einteilchen-Zustände werden durch die Coulomb-Wechselwirkung gekoppelt. Mit der Methode der exakten Diagonalisierung erhält man die zugehörigen Vielteilchen-Zustände. Mit Hilfe der aus der Diagonalisierung gewonnenen Vielteilchen-Zustände lassen sich anhand Fermis Goldener Regel optische Spektren berechnen und daraus die optischen Eigenschaften ableiten.

Zusätzlich zu dieser theoretischen Herleitung der optischen Eigenschaften wurden entsprechende Messungen an der Universität Stuttgart durchgeführt. Im Folgenden werden die Messergebnisse aus Stuttgart kurz vorgestellt:

Zunächst wurden die Emissionslinien der optischen Übergänge im Quantenpunkt anhand eines Photolumineszenz-Spektrums gemessen. Ein wichtiges Ziel dieser Arbeit ist es, dem gemessenen Emissionsspektrum die passenden Übergänge zuzuordnen. Dazu wurde ein Leistungsspektrum des Quantenpunktes aufgenommen, um die an den einzelnen Übergängen beteiligten Teilchenzahlen zu bestimmen. Zusätzlich wurden Kreuzkorrelationen



zwischen den Photonen der einzelnen Linien gemessen, um Informationen über die zeitliche Reihenfolge der Übergänge zu erhalten. Anhand dieser experimentellen Erkenntnisse sowie des theoretischen Modells wurden die Emissionslinien optischen Übergängen im Quantenpunkt zugeordnet. Weiterhin werden anhand von gruppentheoretischen Überlegungen qualitative Aussagen über die Feinstrukturaufspaltung gemacht. Abschließend werden die durch die Arbeit gewonnen Erkenntnisse zusammengefasst.

## 2. Theoretische Grundlagen

### 2.1. Volumen-Halbleitersysteme

#### 2.1.1. Kristallstruktur: Einheitszelle

Die Materialien GaAs und InAs sind Halbleiter, die sich aus Elementen der dritten und der fünften Hauptgruppe des Periodensystems zusammensetzen. Eine solche Verbindung wird deshalb auch als III-V-Halbleiter bezeichnet. Neben den Silizium-Verbindungen gehören GaAs und InAs zu den Materialien, welche mit der höchsten Qualität und Präzision durch epitaktische Verfahren hergestellt werden können [15]. Das zugrundeliegende Gitter von GaAs ist ein kubisch flächenzentriertes (fcc: face centered cubic) Bravais-Gitter (s. Abb. 2.1) mit einer zweiatomigen Basis aus Anionen und Kationen [16]. Eine solche Anordnung nennt man Zinkblendestruktur.

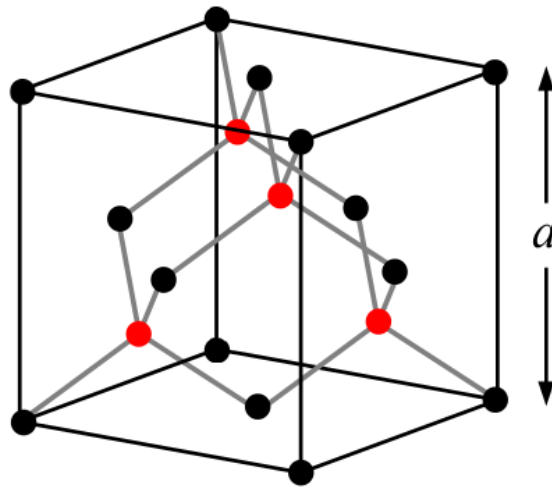


Abbildung 2.1.: Konventionelle Einheitszelle der Zinkblende-Struktur der GaAs-Einheitszelle. Schwarz: Ga, rot: As.. Abb. nach [17].

Für eine kartesische Basis mit Ursprung an einem beliebigen Gitterpunkt lautet ein möglicher Satz primitiver Vektoren:

$$\{\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1, 1, 0), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)\}. \quad (2.1)$$

Dabei ist  $a$  die Kantenlänge der zugehörigen konventionellen Einheitszelle (s. Abb. 2.1). Mit den in Gl. 2.1 festgelegten Basisvektoren kann die Menge aller Gitterpunkte im Bravais-Gitter durch Ortsvektoren in der Form

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad \text{mit } n_i \in \mathbb{N} \quad (2.2)$$

dargestellt werden. Eine periodische Anordnung der Einheitszellen (s. Abb. 2.1) bildet den translationsinvarianten Kristall.

### 2.1.2. Elektronen im Kristall: Bloch-Theorem

Bei der Beschreibung von Elektronen im Kristall handelt es sich prinzipiell um ein Vielteilchen-Problem. Im Rahmen der Bloch-Theorie wird dieses jedoch in ein effektives Einteilchen-Problem überführt, indem ein effektives Potential  $U(\vec{r})$  eingeführt wird [18]. Zur Beschreibung der Elektronen im Kristall geht man von der stationären Schrödinger-Gleichung aus:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (2.3)$$

Dabei ist  $\hat{H}$  der nicht-relativistische Hamilton-Operator eines Systems von  $N_e$  Elektronen in einem periodischen Kristall. Die Separation dieser  $N_e$  Elektronen von der Kerndynamik ist durch die Born-Oppenheimer-Näherung begründet [19]: Wegen des großen Massenunterschieds ist die Bewegung der Kerne sehr viel langsamer als die der Elektronen. Daher wird im Rahmen dieser Näherung angenommen, dass die Elektronen mit Kernladungen an festen Positionen wechselwirken und die Kerne sich im mittleren Feld der Elektronen bewegen. Unter Berücksichtigung der Kern-Elektron-Wechselwirkung  $V_{K-el}$  ergibt sich der nicht-relativistische Hamilton-Operator  $\hat{H}$  eines System von  $N_e$  Elektronen mit der Elektronenmasse  $m_e$  zu:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \left[ -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_e} + V_{K-el}(\vec{r}_i) + \sum_{j>i}^{N_e} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right]. \quad (2.4)$$

Die Eigenzustände  $\Psi$  des Systems erhält man durch Lösen der stationären Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung (s. Gl. 2.3) mit dem Hamilton-Operator (s. Gl. 2.4).

Diese ist eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung und kann wegen der komplexen Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht analytisch gelöst werden. Eine Näherungsmethode ist das Einführen eines effektiven Potentials  $U(\vec{r})$ . Dabei wird ein repräsentatives Elektron mit der Einteilchen-Wellenfunktion  $\psi$  im gemittelten Potential aller anderen Elektronen und Kernen betrachtet. Man erhält somit die folgende effektive Einteilchen-Schrödinger-Gleichung:

$$\left( \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right) \psi = \varepsilon \psi. \quad (2.5)$$

Aufgrund der periodischen Anordnung der Einheitszellen (s. Abb. 2.1) handelt es sich bei  $U(\vec{r})$  um ein gitterperiodisches Potential:

$$U\left(\vec{r} + \sum_i n_i \vec{a}_i\right) = U(\vec{r}). \quad (2.6)$$

Dabei sind die  $n_i$  ganze Zahlen und die  $\vec{a}_i$  die Basisvektoren des zugrundeliegenden Bravais-Gitters (s. Gl. 2.1). Die Lösungen der effektiven Einteilchen-Schrödinger-Gleichung (s. Gl. 2.5) sind die Bloch-Funktionen:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (2.7)$$

Diese setzen sich aus dem Produkt ebener Wellen  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  und gitterperiodischen Blochfaktoren  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  zusammen. Der Index  $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}$  entspricht dabei einem Wellenvektor, der durch das reziproke Gitter festgelegt wird.

### 2.1.3. Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone

Zur Betrachtung der elektronischen Eigenschaften des Volumenkristalls wird im Folgenden das reziproke Gitter eingeführt:

Dazu betrachtet man die zuvor motivierten ebenen Wellen  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ . Diese weisen nicht zwangsläufig die Periodizität des zugrundeliegenden Bravais-Gitters auf (s. Abb. 2.1, s. Gl. 2.2). Die Menge aller Wellenvektoren  $\vec{G}$ , die zu ebenen Wellen mit der Periodizität des Bravais-Gitters führen, nennt man das reziproke Gitter (s. Gl. 2.8) [18]:

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{G}\cdot(\vec{r}+\vec{R})}. \quad (2.8)$$

Mit Hilfe der Definition des reziproken Gitters (s. Gl. 2.8) transformiert sich das fcc-Gitter der GaAs-Einheitszelle (s. Abb. 2.1) in ein kubisch raumzentriertes (bcc: body centered cubic) Gitter im reziproken Raum. Die erste Brillouin-Zone<sup>1</sup> des fcc-Gitters ist somit identisch mit der Wigner-Seitz-Zelle<sup>2</sup> des bcc-Gitters und umgekehrt. In Abb. 2.2 ist die erste Brillouin-Zone von GaAs dargestellt.

Unter den in Abb. 2.2 eingezeichneten Hochsymmetrie-Punkten sind für die im kommenden Abschnitt gezeigte Bandstruktur besonders die Punkte  $\Gamma$ ,  $X$  und  $L$  von Interesse. Für eine kartesische Basis mit Ursprung in einem reziproken Gitterpunkt liegen diese bei

$$\Gamma = (0, 0, 0), \quad X = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0), \quad L = \frac{\pi}{a}(1, 1, 1) \quad \text{und} \quad K = \frac{3\pi}{2a}(1, 1, 0). \quad (2.9)$$

Die Buchstaben  $\Lambda$ ,  $\Delta$  und  $\Sigma$  bezeichnen jeweils die Richtungen  $\langle 1, 1, 1 \rangle$ ,  $\langle 0, 1, 0 \rangle$  und  $\langle 1, 1, 0 \rangle$  im reziproken Raum. Innerhalb der Brillouin-Zone fallen sie dadurch mit Wegen zwischen den Fixpunkten zusammen [17]:

$$\Lambda : \Gamma \rightarrow L, \quad \Delta : \Gamma \rightarrow X, \quad \Sigma : \Gamma \rightarrow K. \quad (2.10)$$

Die Verbindungslinien zwischen den Hochsymmetrie-Punkten  $\Gamma, X, L, U, W$  und  $K$  begrenzen einen Bereich, welcher als irreduzible Brillouin-Zone bezeichnet wird. Aufgrund der Symmetrie und Periodizität des Kristalls ist es möglich, die Betrachtung der elektronischen Eigenschaften im reziproken Raum auf diesen Bereich zu beschränken.

<sup>1</sup>Die Brillouin-Zonen beschreiben symmetrische Polyeder im reziproken Gitter. Nach der ersten Brillouin-Zone wiederholt sich die gesamte Struktur periodisch, sodass es ausreicht alle Prozesse in der ersten Brillouin-Zone zu beschreiben. Daher ist mit dem Begriff Brillouin-Zone im Folgenden stets die erste Brillouin-Zone gemeint.

<sup>2</sup>Das zugehörige Polyeder umschließt denjenigen Raumbereich um einen Gitterpunkt, welcher näher an diesem ist, als an jedem anderen Gitterpunkt.

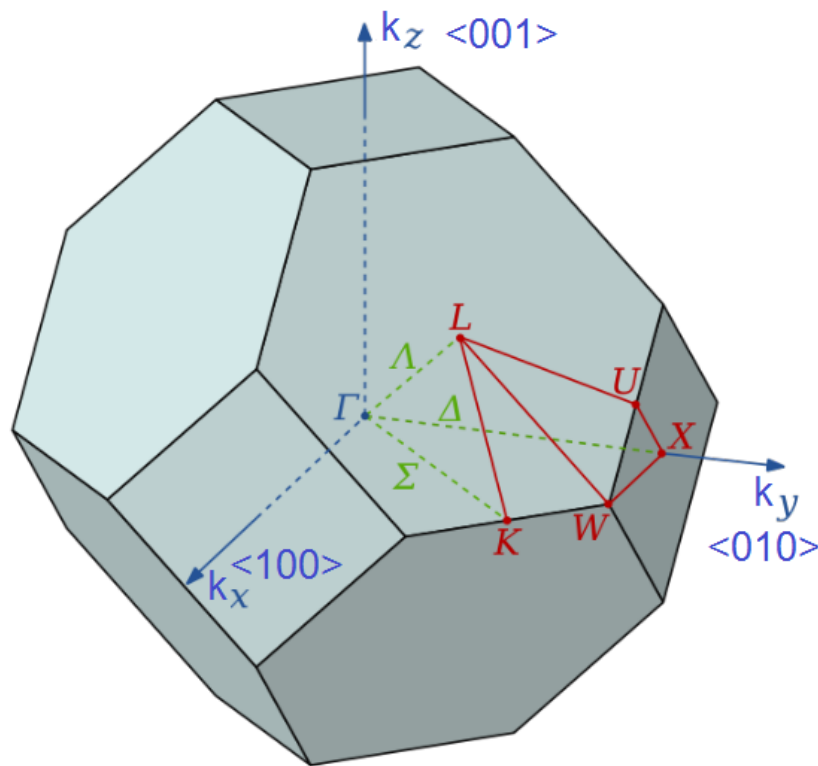


Abbildung 2.2.: Erste Brillouin-Zone des fcc-Gitters. Zusätzlich sind Fixpunkte bzgl. der Symmetrie-Operationen der Punktgruppe (rot) sowie Wege hoher Symmetrie (grün) eingezeichnet. Das durch die Verbindungslinien zwischen diesen Punkten definierte Polyeder entspricht dem irreduziblen Teil der fcc-Brillouin-Zone, Abb. nach [17].

#### 2.1.4. Bandstruktur des Volumenkristalls

Um die elektronischen Eigenschaften eines Volumenkristalls zu charakterisieren, wird üblicherweise eine Auftragung der Energie gegen die Wellenzahl vorgenommen. Eine solche Darstellung nennt man Dispersion. Dazu werden in der dreidimensionalen irreduziblen Brillouin-Zone (s. Abb. 2.2) beispielhaft wie in der Literatur üblich nur die Wege hoher Symmetrie (grün) zwischen den Hochsymmetrie-Punkten (rot) berücksichtigt. Aufgrund des Überlapps der lokalisierten atomaren Energieniveaus entstehen kontinuierliche Energiebänder (s. Abb. 2.3). Daher spricht man von einer sog. Bandstruktur.

Bei Volumen-Halbleitern liegt die Fermi-Energie in einem Bereich des Spektrums ohne erlaubte Ein-Teilchen-Zustände, der Bandlücke (s. Abb. 2.3). Daher zeichnen sich Halbleiter dadurch aus, dass bei geringen Temperaturen lediglich energetisch unterhalb der Bandlücke liegende Niveaus im Grundzustand mit Elektronen besetzt sind. Hier nennt man das niedrigste unbesetzte Band das Leitungsband und das höchste besetzte das Valenzband. In der Ein-Elektronen-Näherung wird eine elektronische Fehlstelle in den Valenzbändern, die durch Anregung eines Elektrons von einem Valenzband in ein Leitungsband entsteht, als Loch bezeichnet.

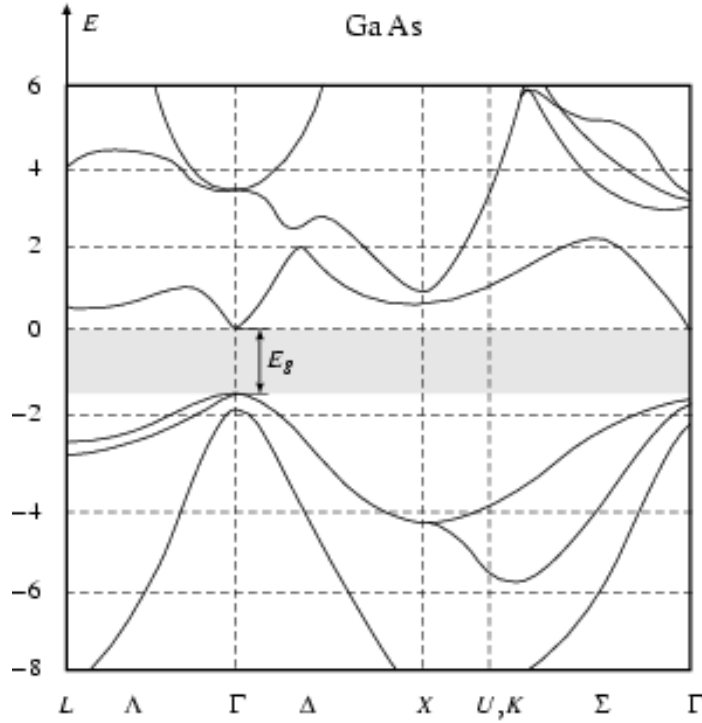


Abbildung 2.3.: Links: Gemessene Tieftemperatur-Bandstruktur von GaAs im reziproken Raum, Abb. aus [16]. Am  $\Gamma$ -Punkt entstehen unterhalb von  $E_g$  drei Valenzbänder und oberhalb ein Leitungsband von Interesse.

In Abb. 2.3 sieht man, dass das Leitungsbandminimum sowie die Valenzbandmaxima am  $\Gamma$ -Punkt liegen und dort eine direkte Bandlücke der Größe  $E_g$  zu finden ist. Somit werden die optischen Eigenschaften insbesondere bei tiefen Temperaturen im Wesentlichen durch die Bandstruktur in der Umgebung des  $\Gamma$ -Punktes bestimmt. Da das Leitungsbandminimum sowie die Valenzbandmaxima um den  $\Gamma$ -Punkt näherungsweise parabelförmig sind, ist eine parabolische Näherung sinnvoll. Dazu wird eine Taylor-Entwicklung der Energie bis zur zweiten Ordnung um  $k = 0$  vorgenommen:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.11)$$

Der Term erinnert an die Dispersion freier Teilchen, wobei nun die sog. effektive Masse  $m^*$  auftaucht. Diese berechnet sich als die zweite Ableitung der Energie nach der Wellenzahl (s. Gl. 2.12) und beschreibt somit die Krümmung der Bänder [16]:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (2.12)$$

In Abb. 2.3 erkennt man, dass die Bänder der Elektronen stärker gekrümmt sind als die der Löcher. In Effektivmassen-Näherung (s. Gl. 2.12) entspricht dies einer höheren effektiven Masse der Löcher gegenüber den Elektronen, was später in den verwendeten Modellen berücksichtigt wird.

In Abb. 2.4 sieht man eine schematische Darstellung der GaAs-Bandstruktur des Volumenkristalls in der direkten Umgebung des  $\Gamma$ -Punktes. Für diesen Bereich sind aus Abb. 2.3 drei Valenzbänder sowie ein Leitungsbandes von Interesse.

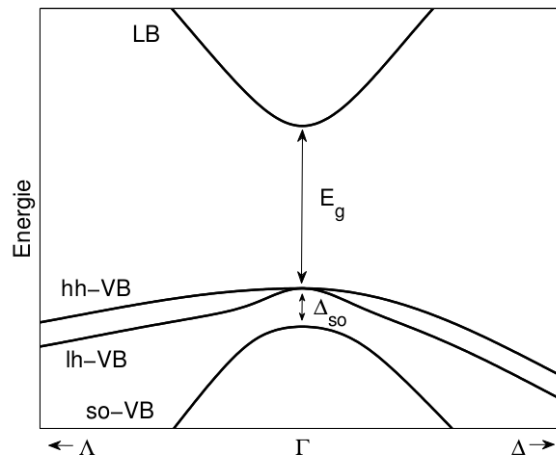


Abbildung 2.4.: Schematische Darstellung der Bandstruktur in der Umgebung des  $\Gamma$ -Punktes mit direkter Bandlücke  $E_g$ . Man erkennt ein Leitungsband (LB) und drei Valenzbänder (VB): Das Schwerloch- (hh-), Leichtloch- (lh-) und Split-Off (so-) -Valenzband. Letzteres ist bei  $\Gamma$  um den Betrag der Spin-Bahn-Aufspaltung  $\Delta_{so}$  abgesenkt (Abb. aus [17]).

In Abb. 2.4 sind die wesentlichen Bänder um den  $\Gamma$ -Punkt dargestellt. Unterhalb des Leitungsbandes (LB) sind drei Valenzbänder zu erkennen. Von denen sind die oberen beiden um  $k = 0$  im Volumenkristall entartet. Bereits um 1950 schätzte allerdings Dresselhaus mit Hilfe von Störungstheorie und Symmetriebetrachtungen die intrinsische Aufhebung der Entartung der Valenzbänder nahe des  $\Gamma$ -Punktes auf maximal  $10^{-4}$  eV [20]. Die Bandlücke  $E_g$  ist dagegen von der Größenordnung eV, sodass die Aufhebung dieser Entartung näherungsweise vernachlässigbar ist. Das obere Band mit der kleineren Krümmung und somit größeren effektiven Masse nennt man Schwerloch-Band (hh-VB: heavy hole valence band) und das darunter liegende wird analog als Leichtloch-Band (lh-VB: light hole valence band) bezeichnet. Das dritte dargestellte Valenzband ist das Split-Off-Band (so-VB: spin-orbit valence band). Dieses ist gegenüber dem Leicht- und Schwerlochband am  $\Gamma$ -Punkt um den Betrag der Spin-Bahn-Aufspaltung  $\Delta_{so}$  abgesenkt.

## 2.2. Niederdimensionale Halbleitersysteme

Ein niederdimensionales Halbleitersystem erhält man, wenn man die Bewegungsfreiheit von Ladungsträgern in einer oder mehreren Raumrichtungen einschränkt. Erreicht man dabei die Größenordnung der de-Broglie-Wellenlänge, so bilden sich in den entsprechenden Richtungen diskrete Eigenzustände aus (s. Abb. 2.5).

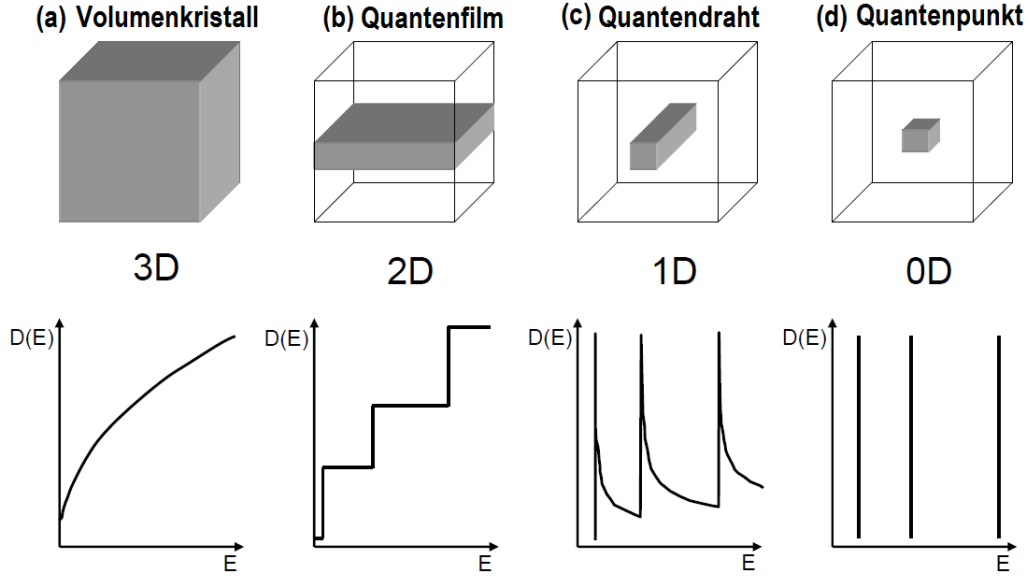


Abbildung 2.5.: Schema der elektronischen Zustandsdichte von Halbleitern verschiedener Dimensionen, Abb. aus [21]. Von links nach rechts: a) 3D: Wurzelfunktion. b) 2D: stufenweise konstant. c) 1D: Kehrwert der Wurzelfunktion. d) 0D: Diskrete Niveaus.

In Abb. 2.5 sieht man die elektronische Zustandsdichte in verschiedenen Dimensionen in parabolischer Näherung  $E(k) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  (s. Gl. 2.11):

In drei Dimensionen liegen die Zustände im  $k$ -Raum auf einer Kugel mit Radius  $k$  und Systemvolumen  $\Omega$ :

$$D(k) = \sum_k \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{4\pi\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk. \quad (2.13)$$

Überführt man Gl. 2.13 mit  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  in ein Integral über die Energie, so erhält man für die elektronische Zustandsdichte einen würfelförmigen Verlauf (s. Abb. 2.5 a):

$$D(E) = \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^\infty dE' \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2mE'}{\hbar^2}} \delta(E - E') = \frac{\Omega m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}. \quad (2.14)$$

In zwei Dimensionen bilden sich in der räumlich eingeschränkten dritten Dimension stehende Wellen. Unter der Annahme eines eindimensionalen unendlich hohen Potentialtopfes mit der Länge  $L_3$  ergeben sich die Eigenenergien  $\frac{\hbar^2 \pi^2 n_3^2}{2mL_3^2}$  mit  $n_3 \in \mathbb{N}$ . Dabei treten jeweils Sprünge in der Zustandsdichte auf, wenn eine zusätzliche Mode und damit höheres  $n_3$  angeregt wird. In den übrigen beiden Dimensionen liegen die Zustände im  $k$ -Raum auf



einem Kreis. Dessen Fläche und somit Zustandsanzahl  $n$  ist proportional zu  $k^2$ . Damit gilt für die Zustandsanzahl  $n \sim E$  und somit für die Zustandsdichte  $D(E) \sim \frac{\partial n}{\partial E} \sim 1$  ein konstanter Verlauf zwischen den Sprüngen (s. Abb. 2.5 b).

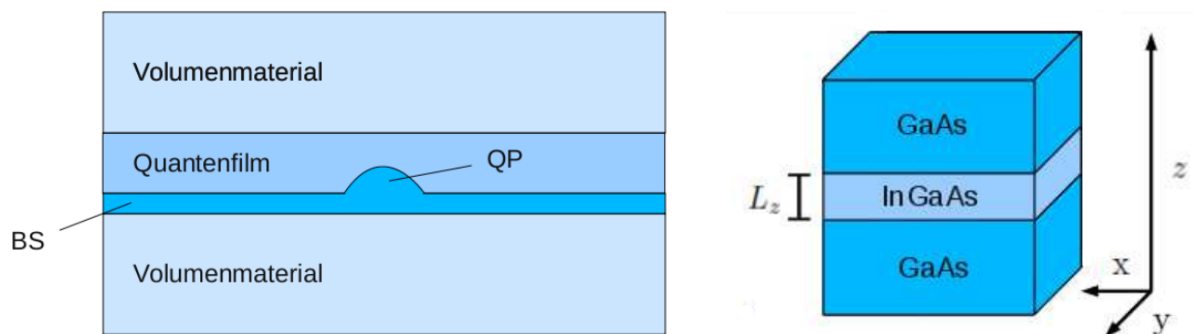
In einer Dimension entstehen die Sprünge in der Zustandsdichte durch stehende Wellen in den beiden räumlich eingeschränkten Dimensionen. In der übrigen Dimension gilt wie bereits zuvor in parabolischer Näherung  $k \sim \sqrt{E}$  (s. Gl. 2.11). Damit gilt für die Zustandsdichte  $D(E) \sim \frac{\partial n}{\partial E} \sim \frac{1}{\sqrt{E}}$  ein reziproker Wurzelverlauf zwischen den Sprüngen (s. Abb. 2.5 c).

In der in Abb. 2.5 (d) dargestellten Struktur bilden sich stehende Wellen in allen drei räumlich eingeschränkten Dimensionen aus. Damit entsteht ein diskretes Spektrum mit delta-förmiger elektronischer Zustandsdichte. Eine solche Struktur nennt man Quantenpunkt.

## 2.3. Halbleiter-Quantenpunkte

Wie in allen Typen von Halbleiter-Nanostrukturen wird in Halbleiter-Quantenpunkten eine Reduzierung der Dimension des Systems dadurch erzeugt, dass ein Halbleitermaterial mit geringer Bandlücke in ein Halbleitermaterial mit größerer Bandlücke eingebettet wird. Dies hat signifikante Veränderungen der Zustandsdichte des Systems und dementsprechend auch seiner optischen Eigenschaften zur Folge. Im Falle von Quantenpunkten erfolgt der Einschluss in allen drei Raumrichtungen, sodass eine diskrete Zustandsdichte erzeugt wird (s. Abb. 2.5 d).

In dieser Arbeit werden selbstorganisiert gewachsene Quantenpunkte aus InGaAs betrachtet, die in eine GaAs-Matrix eingebettet sind. Eine schematische Darstellung einer solchen Struktur sieht man in Abb. 2.6:



(a) Auf einer wenigen Atomlagen dicken Benetzungsschicht (BS) selbstorganisiert gewachsener Quantenpunkt (QP). Diese Struktur ist von einem Quantenfilm überwachsen und von Volumenmaterial umschlossen.

(b) In das Volumenmaterial aus GaAs ist der InGaAs-Quantenfilm der Dicke  $L_z$  eingebettet.

Abbildung 2.6.: Schematische Darstellungen einer selbstorganisiert gewachsenen Quantenpunkt-Struktur: (a) Querschnitt, (b) räumliche Darstellung. (Abb. aus [22])

### 2.3.1. Experimentelle Verfahren zur Herstellung

Da die lateralen Abmessungen von selbstorganisierten Halbleiter-Quantenpunkten im Bereich von einigen Nanometern liegen, ist deren Herstellung äußerst anspruchsvoll. Im Folgenden werden die Molekularstrahlepitaxie sowie das selbstorganisierte Wachstum kurz beschrieben. Die Darstellung dieser experimentellen Methoden erfolgt eng nach [21]. Moderne epitaktische Techniken des Halbleiterwachstums, wie metallorganische chemische Gasphasenabscheidung (MOCVD) oder Molekularstrahlepitaxie (MBE) erlauben das Herstellen von Monolagen. Diese ist die Grundlage zur Herstellung von modernen Bauteilen im Nanomaßstab.

Bei der Molekularstrahlepitaxie (MBE: Molecular Beam Epitaxy) handelt es sich um ein etabliertes Standardverfahren zur Erzeugung dünner Halbleiterschichten auf einem ein-kristallinen Substrat. MBE zeichnet sich gegenüber anderen Epitaxieverfahren durch die Möglichkeit einer sehr präzisen Kontrolle des Wachstumsprozesses und die hohe Güte der weitestgehend defektfreien Schichten aus. Beim epitaktischen Schichtwachstum wird die Anordnung der abgeschiedenen Atome durch die Kristallstruktur des Substratmaterials bestimmt [21, 23].

In welcher Art und Weise sich Atome auf einem Halbleiter abscheiden, wird von mehreren Faktoren festgelegt. Beim Wachstum gleicher Materialien aufeinander ist vor allem die Temperatur entscheidend, da diese die Beweglichkeit der adsorbierten Atome auf der Oberfläche bestimmt. Bei sehr guter thermischer Diffusion können sich komplett geschlossene Monolagen nacheinander abscheiden [24]. Für unterschiedliche Materialien kann ein hochqualitatives Wachstum jedoch nur in speziellen Einzelfällen gelingen, in denen sich das abzuschneidende Material in Kristallstruktur und Gitterkonstante nicht zu stark vom Substrat unterscheidet. Für eine Vielzahl von Materialien ist ein gitterangepasstes Wachstum jedoch nur bedingt möglich, da die im Kristall entstehende Verspannungsenergie zu Versetzungen, Rissen und Defekten führt. Scheidet man mehrere Lagen InAs auf GaAs ab, so kann man unter geeigneten Bedingungen eine besondere Form des Spannungsabbaus im Kristall beobachten, welche als Stranski-Krastanov-Wachstum bezeichnet wird und letztendlich zur Bildung von selbstorganisierten Quantenpunkten führt [25]. Hierbei kommt es trotz der stark unterschiedlichen Gitterkonstanten zu einem versetzungsfreien Aufwachsen der ersten Monolage InAs, welche als Benetzungsschicht bezeichnet wird. Diese Schicht ist in lateraler Richtung stark komprimiert, da sie die um ca. 7 % geringere Gitterkonstante des GaAs annehmen muss. Die laterale Kompression wird dabei durch eine Streckung in Wachstumsrichtung ausgeglichen. Ab einer kritischen Schichtdicke von ca. 1.6 Monolagen kann das Materialsystem einen weiteren Anstieg der Verspannungsenergie nicht mehr kompensieren, und geht in ein dreidimensionales Inselwachstum über (s. Abb. 2.7).

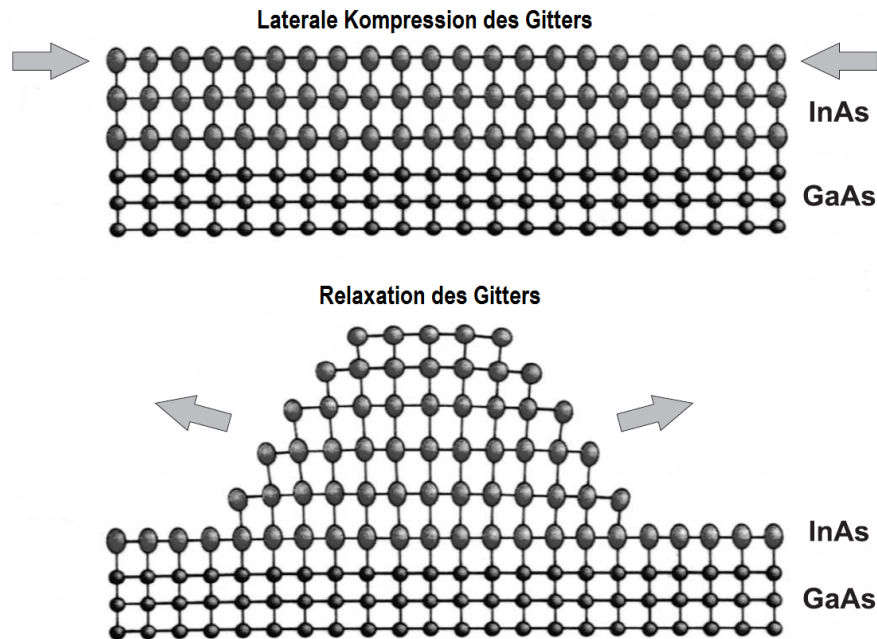


Abbildung 2.7.: Schematische Darstellung des Stranski-Krastanov-Wachstumsmodus (Abb. nach [26]).

Die im Stranski-Krastanov-Prozess entstehenden Nanostrukturen weisen eine relativ homogene Größenverteilung auf, welche durch kurzzeitiges Anbieten von Indium und Arsen nach dem Wachstum zusätzlich verbessert werden kann. Abb. 2.8 zeigt eine Transmissions-Elektronen-Mikroskopie-Aufnahme dieser im Stranski-Krastanov-Modus gewachsenen InAs-Inseln. Typischerweise entstehen Flächendichten von  $10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , was 100 Quantenpunkten auf einem  $\mu\text{m}^2$  entspricht [21].

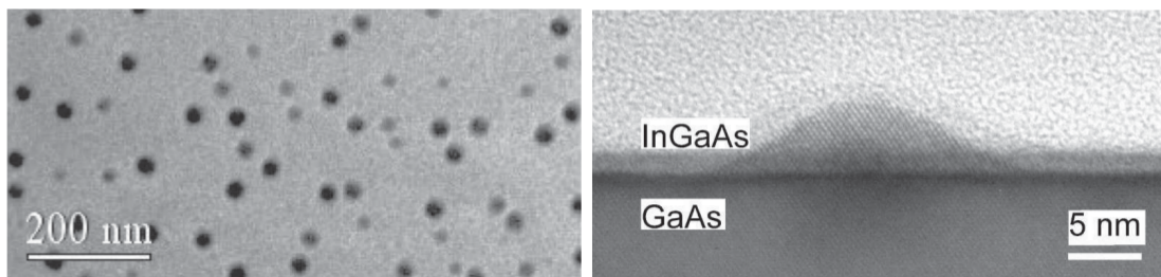


Abbildung 2.8.: Transmissions-Elektronen-Mikroskopie-Aufnahme selbstorganisierter InGaAs-Quantenpunkte. Links: Ensemble von zufällig verteilten Quantenpunkten in der Aufsicht. Diese sind näherungsweise linsenförmig und haben verschiedene Größen. Rechts: Querschnitt eines einzelnen linsenförmigen Quantenpunktes auf einem GaAs-Substrat (Abb. aus [27], Copyright by the American Physical Society).

Sobald die Quantenpunkte mit GaAs überwachsen werden, wird für die Ladungsträger ein dreidimensionales Einschlusspotential erzielt und man erhält elektrisch und optisch aktive Quantenpunkte.

### 2.3.2. Energieniveau-Schema im Quantenpunkt

Nachdem im vorherigen Teil die Beschaffenheit und experimentelle Herstellung von Quantenpunkten beschrieben wurde, werden nun die Energieniveaus im Quantenpunkt analysiert, um anschließend ein passendes theoretisches Modell entwickeln zu können.

Ein Quantenpunkt-System und das zugehörige Energieniveau-Schema ist beispielhaft in Abb. 2.9 dargestellt:

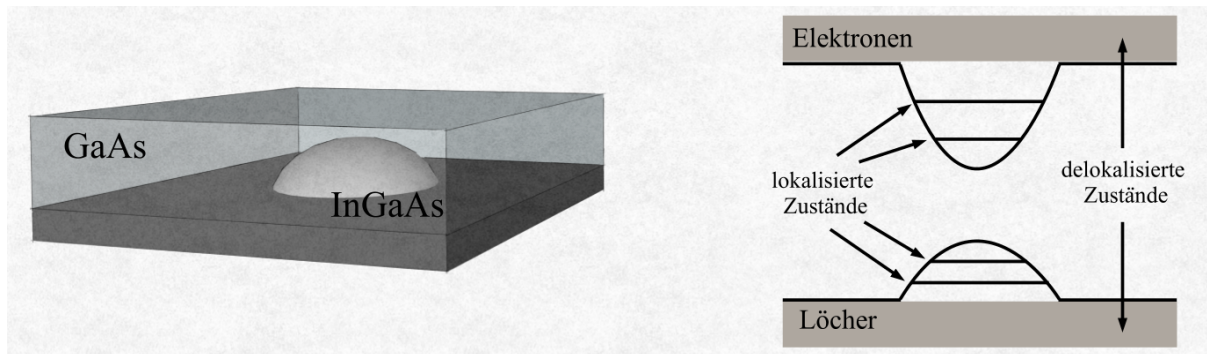


Abbildung 2.9.: Links: Schematische Darstellung eines selbstorganisiert gewachsenen InGaAs-Quantenpunktes (QPs) auf einer entsprechenden Benetzungsschicht (BS), eingebettet im Volumenmaterial aus GaAs.

Rechts: Energieniveau-Schema solcher Quantenpunkte: Die geringere Bandlücke des Materials der BS und des darauf entstandenen QPs gegenüber dem Volumenmaterial führt zu einem Einschluss der Ladungsträger in Wachstumsrichtung. Zudem ist die Ausdehnung des QPs in dieser Richtung größer als die der BS, sodass ein zusätzliches effektives Einschlusspotential in lateraler Richtung im Quantenpunkt relativ zur Bandkante der BS entsteht. Dies führt zu lokalisierten Quantenpunkt-Zuständen für Elektronen im Leitungsband, die sich energetisch unterhalb der Bandkante der BS befinden. Entsprechend bilden sich lokalisierte Lochzustände im Valenzband oberhalb der Bandkante. (Abb. aus [28]).

Aufgrund der starken Verspannung und des Einschluss-Potentials in Wachstumsrichtung ist es in Quantenpunkten in guter Näherung ausreichend, jeweils nur ein Band für die Elektronen und Löcher zu berücksichtigen:

Für das Leitungsband ist diese Näherung unproblematisch, da die hier betrachteten Halbleitermaterialien nahe der Bandlücke im Wesentlichen s-artig sind (s. Abb. 2.3, 2.4). Für die Valenzbänder ist dies aber nicht der Fall, da diese um  $k = 0$  meist p-artig sind [29], wodurch man prinzipiell drei Valenzbänder zu berücksichtigen hat (s. Abb. 2.10):

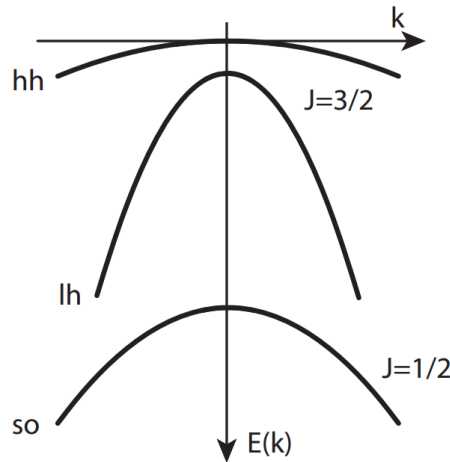


Abbildung 2.10.: Schema zur Aufspaltung des Valenzbandes im Quantenpunkt in Schwerloch-Band (hh) und Leichtloch-Band (lh) mit Gesamtdrehimpuls  $J = 3/2$  sowie Split-off-Band (so) mit Gesamtdrehimpuls  $J = 1/2$ . Die Energieachse ist nach unten gezeichnet, um die energetische Besetzungsreihenfolge der Löcher zu verdeutlichen. (Abb. nach [30])

In Abb. 2.10 erkennt man, dass wie im Volumenkristall (s. Abb. 2.3, 2.4) das Split-Off-Band (so) aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung energetisch nach unten verschoben ist. Allerdings sorgen Verspannungen und Einschlusspotential im Quantenpunkt für eine Aufhebung der Entartung von Leicht- und Schwerlochband um  $k = 0$ . In InAs/GaAs Quantenpunkten beträgt diese Aufspaltung  $\sim 1$  eV [31], wogegen der optisch relevante Energiebereich  $\sim 50$  meV groß ist [32]. Somit ist es ausreichend, sich auf das energetisch niedrigste Band zu beschränken. Das bedeutet, dass Quantenpunkte bei tiefen Temperaturen hauptsächlich durch Schwerlöcher mit der entsprechenden effektiven Masse beschrieben werden können. Daher bezeichnet das Wort Loch im Folgenden stets Zustände des Schwerlochs<sup>3</sup> und der Bandindex wird weggelassen.

<sup>3</sup> Es sei erwähnt, dass es durch gezielte Verspannungen im Quantenpunkt möglich ist, das lh energetisch über das hh zu heben [33].

## 2.4. Einteilchen-Zustände im Quantenpunkt

Ziel dieses Abschnitts ist die Berechnung der in Abb. 2.9 dargestellten Einteilchen-Eigenzustände im Quantenpunkt. Ausgangspunkt für die Berechnung der elektronischen Zustände im Quantenpunkt ist wie beim Volumen-Halbleiter das Lösen der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

$$\left[ -\frac{1}{2m}\Delta + U(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.15)$$

für ein vorgegebenes Einteilchen-Potential  $U(\vec{r})$ . Dies ist i.A. äußerst anspruchsvoll, weshalb Modelle und Methoden unterschiedlicher Genauigkeit entwickelt wurden [17, 34]:

Aktuelle Dichte-Funktional-Methoden sind in der Lage experimentelle Bandstrukturmessungen für Volumenkristalle unterschiedlicher Materialien gut zu reproduzieren. Durch die gebrochene Translationsinvarianz in den Nanostrukturen wächst der Rechenaufwand allerdings erheblich und beschränkt deren praktische Anwendbarkeit auf kleine Systeme [35, 36, 37]. Daher werden oft Kontinuumsansätze wie  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  [38, 39, 40] und Effektivmassen-Modelle [41, 42, 43, 44, 45] verwendet. Die deutlich rechenintensiveren Tight-Binding- [46, 47, 48, 49, 50] und Pseudopotential-Methoden [51], [52] ermöglichen es, Einteilchen-Energien und Wellenfunktionen mit atomarer Auflösung zu bestimmen.

### 2.4.1. Effektivmassen-Modell und Einhüllenden-Näherung

Im InGaAs/GaAs Materialsystem findet man häufig linsenförmige Quantenpunkte mit Durchmessern von 10 – 30 nm und einer Höhe von weniger als 10 nm [53, 2, 54]. Für solche Systeme wurde gezeigt, dass im Vergleich zu den relativ genauen Resultaten von  $\vec{k} \cdot \vec{p}$ - und Tight-Binding-Rechnungen auch die weniger rechenintensiven Effektivmassen-Modelle sinnvoll sind [44]:

Diese beruhen auf der Annahme, dass die optischen Eigenschaften im zugrundeliegenden Material im Wesentlichen durch die Bandstruktur in der Umgebung des  $\Gamma$ -Punktes bestimmt werden. Im Rahmen dessen wird die elektronische Dispersion um  $k = 0$  parabolisch genähert und den Elektronen eine effektive Masse  $m^*$  zugeordnet (s. Gl. 2.12) [55]. Die zugehörigen Einteilchen-Zustände erfüllen im translationsinvarianten Kristallgitter das Bloch-Theorem [56] und lassen sich als Produkt aus ebenen Wellen  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$  und gitterperiodischer Blochfunktion  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  schreiben (s. Gl. 2.6). Da im Rahmen der Effektivmassen-Näherung nur kleine  $k$  betrachtet werden, können die ebenen Wellen als Einhüllenden der vergleichsweise schnell oszillierenden Blochfunktion interpretiert werden.

Im Folgenden ist es das Ziel analog zum Bloch-Theorem für den Volumenkristall eine effektive Einteilchen-Beschreibung für die Quantenpunkt-Nanostruktur zu entwickeln:

Dazu wird die Einhüllenden-Näherung verwendet. Deren wesentliche Annahme ist, dass die Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r})$  nach den Bloch-Faktoren an den Kanten von endlich vielen Bändern  $\lambda$  des jeweiligen Materials entwickelt werden kann [56]:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\lambda} \xi^{\lambda}(\vec{r}) u_{\vec{k}=0}^{\lambda}(\vec{r}). \quad (2.16)$$

Eine solche Entwicklung um  $k = 0$  ist durch die Effektivmassen-Näherung (s. Gl. 2.12)



begründet, die ebenfalls kleine  $k$  voraussetzt. Die Einbettung des Quantenpunktes in das umgebende Volumenmaterial, erzeugt ein Einschluss-Potential  $V_{\text{conf}}(\vec{r})$ , welches sich nur langsam über der Einheitszelle des Kristalls ändert und die Translationsinvarianz bricht. Zudem sorgen dieses Potential sowie Verspannungen dafür, dass es ausreicht, sich um den  $\Gamma$ -Punkt auf ein Band zu beschränken (s. Abb. 2.10) und man erhält somit aus Gl. 2.16:

$$\Psi(\vec{r}) = \xi(\vec{r})u(\vec{r}). \quad (2.17)$$

Diese Einteilchen-Wellenfunktion im Quantenpunkt entspricht der des Bloch-Theorems im Volumkristall, wobei nun die ebenen Wellen durch eine über der Einheitszelle langsam veränderliche Funktion  $\xi(\vec{r})$  ersetzt wurden. Diese erfüllt die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

$$\left[ -\frac{1}{2m}\Delta + V_{\text{conf}}(\vec{r}) \right] \xi(\vec{r}) = \varepsilon \xi(\vec{r}) \quad (2.18)$$

in Effektivmassennäherung für ein sich nur langsam über die Gitterzelle änderndes Einschluss-Potential  $V_{\text{conf}}(\vec{r})$  [56]. Hierbei wird angenommen, dass zur Beschreibung der Ladungsträger die Berücksichtigung der Kontinuumszustände der Benetzungsschicht (s. Abb. 2.9) ausreicht und die Zustände des Volumenmaterials vernachlässigt werden können.

Im Folgenden ist es das Ziel, die effektive Einteilchen-Schrödinger-Gleichung (s. Gl. 2.18) zu lösen. Aufgrund der Zylindersymmetrie des Problems (s. Abb. 2.8) ist es zweckmäßig, dazu in Zylinder-Koordinaten  $(\rho, \varphi, z)$  überzugehen. Weiterhin kann man ausnutzen, dass der Hamilton-Operator aufgrund der Rotationssymmetrie des Potentials um die  $z$ -Achse mit der  $z$ -Komponente des Drehimpuls-Operators vertauscht, so dass man gemeinsame Eigenfunktionen finden kann. Diese sind bekannt und somit reduziert sich die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung (s. Gl. 2.18) auf eine effektiv zweidimensionale Schrödinger-Gleichung für jede Drehimpuls-Quantenzahl  $n$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{n^2}{\rho^2} \right) + V_{\text{conf}}(\rho, z) \right] \tilde{\xi}(\rho, z) = \varepsilon \tilde{\xi}(\rho, z) \quad (2.19)$$

mit

$$\xi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \tilde{\xi}(\rho, z). \quad (2.20)$$

Bedingt durch den starken Einschluss des Quantenpunktes in Wachstumsrichtung  $z$ , im Vergleich zur dazu senkrechten  $x - y$ -Ebene lässt sich die Einhüllende in guter Näherung durch einen Separationsansatz darstellen [57]:

$$\tilde{\xi}(\rho, z) \approx g_\rho(z) f_n(\rho). \quad (2.21)$$

Hierbei wird angenommen, dass sich  $g_\rho(z)$  nur langsam mit  $\rho$  ändert und alle schnellen Variationen in  $f_n(\rho)$  enthalten sind. Daher wird diese Näherung auch als sog. adiabatische Näherung bezeichnet. Unter dieser Voraussetzung vernachlässigt man alle Terme, die Ableitungen von  $g_\rho(z)$  nach  $\rho$  enthalten und gelangt mittels Trennung der Variablen auf folgendes System gekoppelter Schrödinger-Gleichungen [58]:

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{conf}}(\rho, z) \right] g_\rho(z) &= E_0(\rho) g_\rho(z), \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{n^2}{\rho^2} \right) + E_0(\rho) \right] f_n(\rho) &= E_n f_n(\rho). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Die obere Gleichung für die  $z$ -Richtung wird nun für feste  $\rho$  gelöst und das damit ermittelte  $E_0(\rho)$  geht dann als radiales Potential in die untere Gleichung ein. Für festes  $\rho$  beschreibt die obere Gleichung die Bewegung eines Teilchens in einem endlich hohen Potentialkasten. Wenn sich dessen Breite nur langsam mit  $\rho$  ändert, was bei flachen Quantenpunkten der Fall ist, ändern sich auch  $g_\rho(z)$  und  $E_0(\rho)$  nur langsam mit  $\rho$ . Somit ist diese Näherung für flache Quantenpunkte gut erfüllt [58]. Im Folgenden wird der Potentialkasten näherungsweise als unendlich hoch angenommen.

Die Form des radialen Potentials ist beispielhaft in Abb. 2.11 dargestellt.

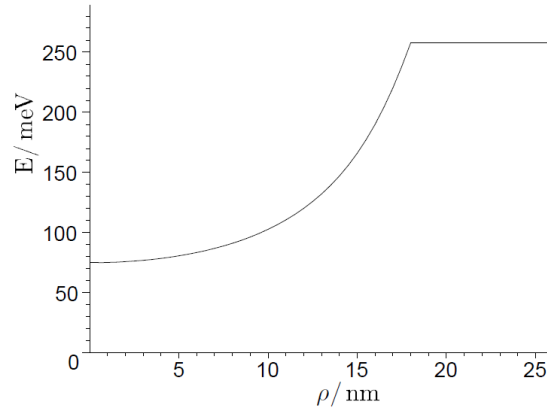


Abbildung 2.11.: Beispielhafter Verlauf des radialen Potentials  $E_0(\rho)$  in meV (Abb. in [58]).

Der Quantenpunkt ist in seinem Zentrum am dicksten (s. Abb. 2.12) und somit hat das radiale Potential bei  $\rho = 0$  sein Minimum. Mit zunehmendem  $\rho$  nimmt die Dicke des Quantenpunktes ab, so dass die entsprechende Eigenenergie  $E_0(\rho)$  zunimmt. Für  $\rho > r_{\text{Kappe}}$  ist die Dicke schließlich gleich konstant der Höhe der Benetzungsschicht, was zu einem konstanten Potential in diesem Bereich führt.

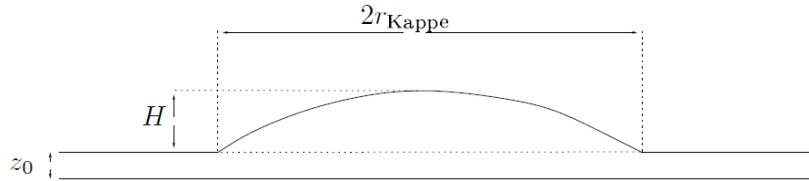


Abbildung 2.12.: Querschnitt der Quantenpunkt-Geometrie mit Dicke der Benetzungsschicht  $z_0$  und Höhe des Quantenpunktes  $H$  (Abb. in [58]).

Für in den in Abb. 2.11 dargestellten Verlauf ist naheliegend, das Potential um  $\rho = 0$



durch eine Parabel zu approximieren:

$$E_0(\rho) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m h(\rho)^2}. \quad (2.23)$$

Hierbei bezeichnet  $h(\rho)$  die Höhe des Quantenpunktes im Abstand  $\rho$  vom Ursprung. Wenn  $R$  der Radius der Kugel ist, welche die Kappe des Quantenpunktes definiert, ergibt sich [58]:

$$h(\rho) = \sqrt{R^2 - \rho^2} - R + H + z_0 \quad \text{mit} \quad R = \frac{H^2 + r_{\text{Kappe}}^2}{2H}. \quad (2.24)$$

Eine Taylor-Entwicklung um  $\rho = 0$  liefert [58]:

$$E_0(\rho) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{1}{(H + z_0)^2} \left( 1 + \frac{2}{(1 + \frac{z_0}{H})(1 + \frac{r_{\text{Kappe}}^2}{H^2})} \left( \frac{\rho}{H} \right)^2 + \dots \right). \quad (2.25)$$

Darin lässt sich der Vorfaktor von  $\rho^2$  mit  $\frac{m\omega^2}{2}$  identifizieren. Ein solches Parabel-Potential entspricht einem harmonischen Oszillator. Somit lässt sich für die beiden gekoppelten Schrödinger-Gleichungen (s. Gl. 2.22) in der oben durchgeführten Näherung für flache Quantenpunkte der folgende Einteilchen-Hamilton-Operator  $H_0$  formulieren:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{conf}}(\vec{r}) = \underbrace{\frac{p_\rho^2 + p_\varphi^2}{2m} + V_{\text{Oszillator}}(\rho, \varphi)}_{H_{\text{Oszillator}}} + \underbrace{\frac{p_z^2}{2m} + V_{\text{Topf}}(z)}_{H_{\text{Topf}}}. \quad (2.26)$$

Im Folgenden werden für die beiden Hamilton-Operatoren  $H_{\text{Oszillator}}$  und  $H_{\text{Topf}}$  die zugehörigen Differentialgleichungen aufgestellt. Dazu wird jeweils der Impulsoperator  $p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial j}$  eingesetzt. Für den harmonischen Oszillator erhält man somit:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{m\omega^2}{2} \rho^2 \right) \varphi_n(\varphi, \rho) = E_n \varphi_n(\varphi, \rho). \quad (2.27)$$

Für den Potentialtopf erhält man:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{Topf}}(z) \right) \Lambda(z) = E_n \Lambda(z) \quad \text{mit} \quad V_{\text{Topf}}(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } |z| < \frac{L}{2} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.28)$$

Die normierten Lösungen des Potentialtopfes (s. Gl. 2.28) lauten:

$$\Lambda(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \left( \pi \frac{z}{L} \right). \quad (2.29)$$

Durch einen Separationsansatz lassen sich die Eigenfunktionen als Produkt der Oszillator- und der Potentialtopf-Eigenfunktion angeben:

$$\xi_i(\vec{r}) = \varphi_i(\rho, \varphi) \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \left( \pi \frac{z}{L} \right). \quad (2.30)$$

Dabei bezeichnet  $\varphi_i(\rho, \varphi)$  die  $i$ -te Eigenfunktion des zweidimensionalen harmonischen Oszillators. Im Folgenden werden zunächst drei gebundene Zustände für die Elektronen und

Löcher betrachtet. Tatsächlich hängt die Anzahl der gebundenen Einteilchen-Zustände von der Form und Tiefe des Einschluss-Potentials sowie vom Abstand zur Bandkante der Benetzungsschicht ab. Später werden daher zusätzliche Zustände berücksichtigt und die jeweils berechneten Ergebnisse mit den experimentellen Messungen verglichen, um das Modell anzupassen. Unter Verwendung der Oszillatorlänge  $l_k = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  und der inversen Länge  $\beta = \frac{1}{l_k}$  lauten die ersten drei Oszillator-Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned}\varphi_1(\rho, \phi) &= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}, \\ \varphi_2(\rho, \phi) &= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} (\beta \rho) e^{+i\phi}, \\ \varphi_3(\rho, \phi) &= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} (\beta \rho) e^{-i\phi}.\end{aligned}\tag{2.31}$$

Für gleiche Oszillatorlängen eines Elektrons und eines Lochs sind deren Wellenfunktionen identisch. Dies bedeutet bei vorgegebener effektiver Masse eines Elektrons und eines Lochs unterschiedliche Oszillatorenergien des Elektrons und Lochs. Diese Annahme vereinfacht das Modell erheblich, wird aber später fallen gelassen, um die Parameter besser an das Experiment anpassen zu können. Das entsprechende Energieschema für das hier beschriebene Modell ist in Abb. 2.13 dargestellt:

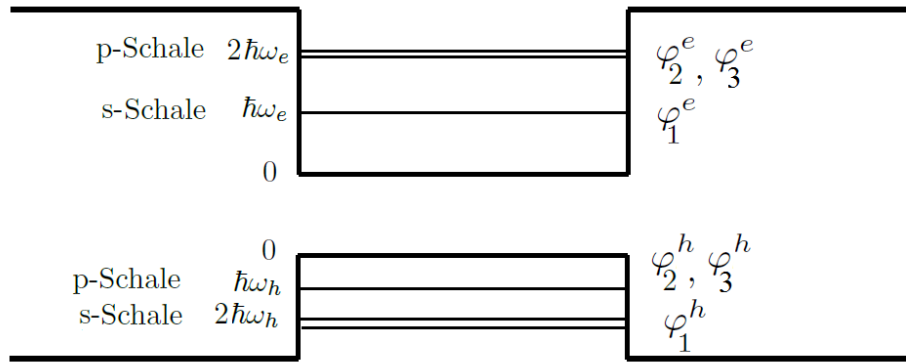


Abbildung 2.13.: Energieniveaus für ein Elektron und ein Loch im Rahmen des Einschlusspotential-Modells für gleiche Oszillatorlängen  $l_k^e = l_k^h = l_k$ . Beispielhaft sind zunächst jeweils drei Wellenfunktionen für Elektronen und Löcher eingezeichnet. Die entarteten  $\varphi_2$ -,  $\varphi_3$ -Zustände sind symbolisch als nicht entartet mit einer Doppellinie eingezeichnet. Die Bezeichnungen der s- und p-Schale beziehen sich analog zum Atom auf die Drehimpuls-Quantenzahl. Man erkennt, dass die Oszillatorenergien eines Lochs geringer als die eines Elektrons sind. Abb. nach [58].

Somit sind die in Abb. 2.13 dargestellten Zustände durch einen passenden Einteilchen-Hamilton-Operator charakterisiert und durch die zugehörigen Eigenfunktionen beschrieben.

### 2.4.2. Formulierung des Hamilton-Operators

Ziel dieses Abschnitts ist es nicht nur Einteilchen-Zustände, sondern auch wechselwirkende Zustände zu beschreiben. Dazu werden zunächst der Einteilchen-Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung und anschließend der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator aufgestellt.

#### 2.4.2.1. Einteilchen-Anteil

Die elektronischen Einteilchen-Zustände im Quantenpunkt werden in erster Quantisierung durch den Hamilton-Operator  $H_0$  beschrieben (s. Gl. 2.26). Die entsprechende Formulierung in zweiter Quantisierung lautet:

$$H_0 = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \left[ -\frac{1}{2m} \Delta + V_{\text{conf}}(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) \quad (2.32)$$

Darin sind  $\Psi(\vec{r})$  und  $\Psi^\dagger(\vec{r})$  Feldoperatoren, wobei  $\Psi^\dagger(\vec{r})$  ein Teilchen am Ort  $\vec{r}$  erzeugt. Entsprechend vernichtet  $\Psi(\vec{r})$  dieses Teilchen. Diese Feldoperatoren werden nach den Eigenfunktionen  $\psi_i(\vec{r}) = \xi_i(\vec{r})u(\vec{r})$  (s. Gl. 2.17) des Einteilchen-Hamilton-Operators  $H_0$  (s. Gl. 2.26) entwickelt:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \sum_i \xi_i(\vec{r})u(\vec{r})a_i, \\ \Psi^\dagger(\vec{r}) &= \sum_i \xi_i(\vec{r})^*u(\vec{r})^*a_i^\dagger. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Darin erzeugt der fermionische Operator  $a_i^\dagger$  ein Elektron im Einteilchen-Zustand  $|i\rangle$  mit der Wellenfunktion  $\xi_i(\vec{r})^*u(\vec{r})$ . Analog vernichtet  $a_i$  den Zustand  $|i\rangle$  mit der Wellenfunktion  $\xi_i(\vec{r})u(\vec{r})$ . In der in Gl. 2.33 verwendeten Basis ist der wechselwirkungsfreie Hamilton-Operator  $H_0$  diagonal:

$$H_0 = \sum_{i\sigma} \epsilon_i^v v_{i\sigma}^\dagger v_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i^c c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (2.34)$$

Hierbei erzeugen die  $c_{i\sigma}^\dagger$  ein Elektron im Leitungsband (s. Gl. 2.30), wobei  $\sigma$  die Spinquantenzahl bezeichnet und die Werte  $\pm\frac{1}{2}$  annimmt. Entsprechend vernichten die  $c_{i\sigma}$  diesen Zustand. Analog dazu erzeugen die  $v_{i\sigma}^\dagger$  ein Elektron im Valenzband. Entsprechend vernichten die  $v_{i\sigma}$  diesen Zustand. Die  $\epsilon_i^c$  bezeichnen die Einteilchen-Energien der Elektronen im Leitungsband, wogegen die  $\epsilon_i^v$  die Energien im Valenzband beschreiben.

Durch die Anregung eines Elektrons vom Valenzband in das Leitungsband  $c_{i\sigma}^\dagger v_{i\sigma}$  entsteht eine elektronische Fehlstelle im Valenzband. Diese kann als die Erzeugung eines Lochs  $h_{i-\sigma}^\dagger$  mit entgegen gesetztem Spin betrachtet werden. Entsprechend kann die Anregung des Elektrons als  $e_{i\sigma}^\dagger$  geschrieben werden. Damit kann der gesamte Anregungsprozess auch durch  $e_{i\sigma}^\dagger h_{i-\sigma}^\dagger$  beschrieben werden. Eine solche Darstellung bezeichnet man als Elektron-Loch-Bild (*eh*-Bild). Entsprechend bezeichnet man die Darstellung  $c_{i\sigma}^\dagger v_{i\sigma}$  mit Leitungs- und Valenzband als *cv*-Bild. Geht man vom *cv*-Bild zum *eh*-Bild über, so entspricht die Anregung eines Elektrons vom Valenzband in das Leitungsband  $c_{i\sigma}^\dagger v_{i\sigma}$  im *cv*-Bild der Erzeugung eines Elektrons-Loch-Paares  $e_{i\sigma}^\dagger h_{i-\sigma}^\dagger$  im *eh*-Bild. Dies führt auf die folgende

Transformationsvorschrift:

$$\begin{pmatrix} c_{i\sigma}^\dagger \\ c_{i\sigma} \\ v_{i\sigma}^\dagger \\ v_{i\sigma} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} e_{i\sigma}^\dagger \\ e_{i\sigma} \\ h_{i-\sigma} \\ h_{i-\sigma}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Unter Verwendung der Kommutator-Relation für Fermionen  $[a_i, a_j^\dagger]_+ = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$  lässt sich der transformierte Einteilchen-Hamilton-Operator  $H_0$  in Normalordnung bestimmen. Darunter versteht man eine Darstellung, bei der alle Erzeuger links von den Vernichtern stehen. Beim Herstellen der Normalordnung werden die Einteilchen-Beiträge, die durch das Permutieren der Operatoren entstehen vernachlässigt. Der Grund dafür ist, dass diese Terme die Wechselwirkung der Löcher und der Elektronen mit dem vollen Valenzband beschreiben und diese Wechselwirkung bereits in der Bandstrukturrechnung enthalten ist und damit in die daraus bestimmten effektiven Massen eingeht. Somit ergibt sich der Einteilchen-Hamilton-Operator im  $eh$ -Bild zu:

$$H_0 = \sum_{i\sigma'} \epsilon_i^h h_{i\sigma'}^\dagger h_{i\sigma'} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i^e e_{i\sigma}^\dagger e_{i\sigma}. \quad (2.36)$$

#### 2.4.2.2. Wechselwirkungs-Anteil

Der Einteilchen-Hamilton-Operator (s. Gl. 2.36) enthält keine Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern. Sind jedoch mindestens zwei Teilchen vorhanden, so tritt Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern auf. Im Folgenden wird der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung aufgestellt.

Da die Coulomb-Wechselwirkung eine Zweiteilchen-Wechselwirkung darstellt, sind prinzipiell alle Permutationen von zwei Elektronen und zwei Löchern denkbar, allerdings werden im Folgenden nur die aufgrund der Zylinder-Symmetrie von Null verschiedenen Beiträge aufgeführt. In erster Quantisierung lautet der Hamilton-Operator der Coulomb-Wechselwirkung:

$$H_{WW} := \int d^3r \int d^3r' \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r}') \tilde{V}(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \Psi(\vec{r}). \quad (2.37)$$

Hierin bezeichnet  $\tilde{V}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\vec{r} - \vec{r}'|}$  das Coulomb-Potential,  $\Psi^\dagger$  und  $\Psi$  Feldoperatoren,  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante im Vakuum sowie  $\epsilon_r$  die relative Dielektrizitätskonstante im Halbleitermaterial. Der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator  $H_{WW}$  in zweiter Quantisierung lautet im  $cv$ -Bild:

$$\begin{aligned} H_{WW} = & \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} \tilde{V}_{ij,kl}^{cccc} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{k\sigma'} c_{l\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} \tilde{V}_{ij,kl}^{vvvv} v_{i\sigma}^\dagger v_{j\sigma'}^\dagger v_{k\sigma'} v_{l\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} \tilde{V}_{ij,kl}^{vccv} v_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{k\sigma'} v_{l\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} \tilde{V}_{ij,kl}^{cvcv} c_{i\sigma}^\dagger v_{j\sigma'}^\dagger v_{k\sigma'} c_{l\sigma}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Dabei kompensiert der Faktor  $\frac{1}{2}$  jeweils die Doppelzählung. Beim Übergang in das  $eh$ -Bild werden alle Einteilchen-Beiträge, die durch das Permutieren der Erzeuger und Vernichter entstehen, vernachlässigt. Der Grund hierfür ist wie beim Einteilchen-Anteil, dass diese Terme die Wechselwirkung der Löcher und der Elektronen mit dem vollen Valenzband

beschreiben und diese Wechselwirkung bereits in der Bandstrukturrechnung enthalten ist und damit in die daraus bestimmten effektiven Massen eingeht. Somit lautet der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator im  $eh$ -Bild:

$$\begin{aligned}
 H_{WW} = & \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ij,kl}^{eeee} e_{i\sigma}^\dagger e_{j\sigma'}^\dagger e_{k\sigma'} e_{l\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{kl,ij}^{hhhh} h_{k\sigma}^\dagger h_{l\sigma'}^\dagger h_{i\sigma'} h_{j\sigma} \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{lj,ki}^{heeh} h_{l\sigma}^\dagger e_{j\sigma'}^\dagger e_{k\sigma'} h_{i\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ik,jl}^{ehhe} e_{i\sigma}^\dagger h_{k\sigma'}^\dagger h_{j\sigma'} e_{l\sigma}.
 \end{aligned} \tag{2.39}$$

Darin stehen die ersten beiden Summanden für die repulsive Wechselwirkung zwischen gleichen Ladungsträgern und die letzten beiden Summanden für die attraktive Elektron-Loch-Wechselwirkung. Das Vorzeichen ergibt sich durch Anwenden der Transformation (s. Gl. 2.35) in Gl. 2.38 und anschließendes Herstellen der Normalordnung mit Hilfe der entsprechenden Kommutator-Relationen für Fermionen. Die Stärke der Wechselwirkung hängt von den Coulomb-Matrix-Elementen  $V_{ijkl}$  ab, die im Anhang mit Hilfe der Einteilchen-Wellenfunktionen in Einhüllende-Näherung (s. Gl. 2.17) berechnet werden. Der volle Hamilton-Operator setzt sich aus dem diagonalen Einteilchen-Anteil  $H_0$  (s. Gl. 2.36) und dem Wechselwirkungsanteil  $H_{WW}$  (s. Gl. 2.39) zusammen:

$$H = H_0 + H_{WW}. \tag{2.40}$$

## 2.5. Exakte Diagonalisierung

Unter exakter Diagonalisierung, auch CI (Configuration Interaction) genannt, versteht man die volle Diagonalisierung einer Vielteilchen-Hamilton-Matrix (s. Gl. 2.40). Dabei stehen auf der Diagonalen die Einteilchen-Energien (s. Gl. 2.36) und auf den Nebendiagonalen die Wechselwirkungsbeiträge (s. Gl. 2.39). Das Aufbauen der Hamilton-Matrix ist in der Praxis allerdings nur für endliche Systeme mit endlicher Teilchenzahl möglich. Daher muss man das System einschränken und Wechselwirkungen vernachlässigen. In dieser Arbeit werden zunächst drei und später sechs Modellzustände im Quantenpunkt betrachtet. Diese Zustände entsprechen den oben berechneten Oszillatorfunktionen. Mit den dafür bestimmten Wellenfunktionen werden die Coulomb-Matrix-Elemente berechnet.

### 2.5.1. Klassifizierung der Eigenzustände

Sortiert man die Einteilchen-Basiszustände nach guten Quantenzahlen<sup>4</sup>, so wird die Hamiltonsche Matrix blockdiagonal in diesen Quantenzahlen. Dies ist besonders geschickt, da die numerische Diagonalisierung einer Matrix mit einer dünnen Bandbreite besonders schnell ist. Zudem lassen sich die Blöcke einzeln diagonalisieren. Als gute Quantenzahlen erweisen sich die Teilchenzahl  $n$ , Zahl der Elektronen  $n_e$ , Zahl der Löcher  $n_h$ , der Gesamtspin  $S$  sowie dessen Quadrat  $S^2$ .

<sup>4</sup>Darunter versteht man Quantenzahlen, die mit dem Hamilton-Operator vertauschen.

Im Folgenden wird kurz begründet, warum diese Quantenzahlen mit dem Hamilton-Operator  $H = H_0 + H_{WW}$  vertauschen. Dies wird beispielhaft anhand des Besetzungszahl-Operators der Elektronen  $n_e$  gezeigt: Bildet man den Kommutator von  $n_e$  mit  $H_0 = \sum_i \epsilon_i^h v_i^\dagger v_i + \sum_i \epsilon_i^e c_i^\dagger c_i$ , so vertauscht die Besetzungszahl der  $n_e$  Elektronen mit der Besetzungszahl  $n_h$  der Löcher, da die Operatoren jeweils auf die andere Teilchensorte wirken. Außerdem vertauscht jeder Operator mit sich selbst. Daher vertauscht  $n_e$  mit  $H_0$ . Bleibt zu zeigen, dass  $n_e$  mit  $H_{WW}$  kommutiert. Dazu ist zu zeigen, dass  $n_e$  jeweils mit den zwei Erzeugern und Vernichtern der vier Summanden von  $H_{WW}$  vertauscht. Mit der  $hh$ -Wechselwirkung kommutiert  $n_e$  ohnehin, da es sich um eine andere Teilchensorte handelt. Daher reicht es zu zeigen, dass  $n_e$  mit dem Operator bestehend aus einem Elektronen-Erzeuger und einem Elektronen-Vernichter vertauscht. Dann kommutiert  $n_e$  auch mit zwei Elektronen-Erzeugern und zwei Elektronen-Vernichtern. Um dies zu zeigen, wird folgende Kurzrechnung vorgenommen:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha} \sum_{ij} e_{\alpha}^{\dagger} e_{\alpha} e_i^{\dagger} e_j &= \sum_{\alpha} \sum_{ij} e_{\alpha}^{\dagger} (\delta_{i\alpha} - e_i^{\dagger} e_{\alpha}) e_j = \sum_{ij} e_i^{\dagger} e_j - \sum_{\alpha} \sum_{ij} e_{\alpha}^{\dagger} e_i^{\dagger} e_{\alpha} e_j \\
&= \sum_{ij} e_i^{\dagger} e_j - \sum_{\alpha} \sum_{ij} e_i^{\dagger} e_{\alpha}^{\dagger} e_j e_{\alpha} \\
&= \sum_{ij} e_i^{\dagger} e_j - \sum_{\alpha} \sum_{ij} e_i^{\dagger} (\delta_{j\alpha} - e_j e_{\alpha}^{\dagger}) e_{\alpha} \\
&= \sum_{\alpha} \sum_{ij} e_i^{\dagger} e_j e_{\alpha}^{\dagger} e_{\alpha}.
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Damit vertauscht  $n_e$  mit einem Elektronen-Erzeuger und einem Elektronen-Vernichter. Nach der obigen Argumentation muss dann auch  $n_e$  mit  $H_{WW}$  vertauschen. Eine analoge Betrachtung zeigt, dass ebenso  $n_h$  mit  $H$  kommutiert. Wenn  $H$  mit  $n_e$  und  $n_h$  kommutiert, dann auch mit der Gesamtteilchenzahl  $n = n_e + n_h$ , die durch die Coulomb-Wechselwirkung erhalten bleibt.

Entsprechend kann unter Verwendung der Drehimpuls-Algebra gezeigt werden, dass der Gesamtspin und dessen Quadrat ebenfalls mit dem  $H$  vertauschen. Dies ist bereits physikalisch zu erwarten, da der Hamilton-Operator der Coulomb-Wechselwirkung diagonal bzgl. des Spins ist und keine Änderung dieser Quantenzahl verursachen kann. Somit muss  $H$  mit dem Spinoperator vertauschen, da der Gesamtspin eine Erhaltungsgröße darstellt.

Eine weitere gute Quantenzahl wäre der Gesamtdrehimpuls der Elektronen und Löcher  $l_z^e + l_z^h$  in  $z$ -Richtung. Diese Quantenzahl vertauscht zwar aufgrund der Zylindersymmetrie des Modells mit dem Hamilton-Operator, aber auf eine Sortierung diesbezüglich wurde verzichtet, da eine solche Symmetrie ein Spezialfall ist und beispielsweise bei einer Tight-Binding-Rechnung hinfällig würde.

### 2.5.2. Aufbau der Hamilton-Matrix

In dem zugrundeliegenden Modell werden je drei Oszillator-Zustände (s. Gl. 2.31)  $\{s, p+, p-\}$  für Elektronen (e) und Löcher (h) mit je zwei Spineinstellungen ( $\uparrow, \downarrow$ ) berücksichtigt. Jeder dieser 12 Einteilchen-Zustände kann besetzt oder unbesetzt sein. Dies liefert somit  $2^{12} = 4096$  Vielteilchen-Basiszustände. Die Reihenfolge der 12 Zustandsnummern der

Einteilchen-Zustände in den Basiszuständen ist beliebig und wurde in dieser Arbeit wie folgt festgelegt:

$$|s_{\uparrow}^e, p+\uparrow, p-\uparrow, s_{\uparrow}^h, p+\uparrow, p-\uparrow, s_{\downarrow}^e, p+\downarrow, p-\downarrow, s_{\downarrow}^h, p+\downarrow, p-\downarrow\rangle. \quad (2.42)$$

Da jeder dieser Einteilchen-Zustände entweder besetzt oder unbesetzt ist, bietet sich eine Binärdarstellung für die Darstellung der Basis an. Aufgrund der Darstellung der besetzten und unbesetzten Zustände mit Nullen und Einsen wird diese Ausgangsbasis Fock-Basis genannt. Die Wahl der Reihenfolge der 4096 Basiszustände ist zunächst beliebig, darf aber später nicht mehr verändert werden, da die Hamilton-Matrix bzgl. einer eindeutig festgelegten Fock-Basis aufgebaut wird. Wie oben diskutiert, wurden diese 4096 Zustände nach guten Quantenzahlen so sortiert, dass die Hamilton-Matrix blockdiagonal wird. Aufgrund dieser Struktur können die einzelnen Blöcke der Matrix separat wie folgt aufgebaut werden:

Hierzu benötigt man die Matrixdarstellungen der Erzeuger und Vernichter in der zugehörigen Fock-Basis. Im Folgenden wird die Berechnung der Matrixdarstellung des Vernichters kurz erläutert:

In der Matrix eines Vernichters stehen nur Einträge in der  $i$ -ten Zeile und in der  $j$ -ten Spalte, wenn der  $j$ -te Basiszustand vernichtet und daraus der  $i$ -te Basiszustand erzeugt wird. Diese Einträge sind betragsmäßig Eins und hängen von der zugehörigen Permutation ab. In der hier verwendeten Fock-Basis entspricht dies einer Verkettung von Transpositionen: Wird beispielsweise die  $k$ -te Zustandsnummer im Zustand  $j$  vernichtet, so ist zu prüfen, wie viele Zustandsnummern vor  $k$  besetzt sind. Dann ist eine Transposition mit jeder dieser  $\chi$  Zustandsnummern durchzuführen, sodass der zugehörige Eintrag in der Matrix  $(-1)^\chi$  beträgt. Dies soll an einem Beispiel verdeutlicht werden:

Angenommen es soll der Zustand  $|\text{final}\rangle = |1, 0, 0, \dots\rangle$  aus dem Zustand  $|\text{initial}\rangle = |1, 1, 0, \dots\rangle$  erzeugt werden. Nun sei der Zustand  $|\text{final}\rangle$  der dritte Basisvektor und der Zustand  $|\text{initial}\rangle$  der fünfte. Dann lässt sich daraus eine Sparse-Matrix<sup>5</sup> erzeugen, die einen Eintrag in der dritten Zeile und fünften Spalte enthält. Der Eintrag dieses Matrixelements ist Minus Eins, da in  $|\text{initial}\rangle$  die zweite Zustandsnummer vernichtet wird. Da in  $|\text{initial}\rangle$  aber die erste Zustandsnummer besetzt ist, so ist  $\chi = 1$  Transposition notwendig und es ergibt sich  $(-1)^\chi = (-1)^1 = -1$  für den Eintrag in der Matrix.

Analog zu dem hier für den Vernichter beschriebenen Vorgehen lassen sich die entsprechenden Matrixelemente der Erzeuger berechnen.

Will man die Hamilton-Matrix nun nach Blöcken aufbauen, so ist zu beachten, dass die einzelnen Erzeuger und Vernichter Blöcke verschiedener Teilchenzahl koppeln, da sie entweder die Gesamtzahl um eins erhöhen oder erniedrigen. Um Unterblöcke gleicher Teilchenzahl zu erhalten, müssen daher statt einzelnen Erzeugern und Vernichtern jeweils Paare der Form  $e_i^\dagger e_j$  und  $h_i^\dagger h_j$  konstruiert werden. Somit wird sicher gestellt, dass man im Unterblock zu gleicher Teilchenzahl bleibt. Für jeden solcher Unterblöcke lassen sich die Einteilchen-Einträge  $e_i^\dagger e_i$  und  $h_i^\dagger h_i$  leicht angeben. Die Matrixelemente der Hamilton-Matrix erhält man durch Absummieren der an der Wechselwirkung beteiligten Zustände  $ijkl$ . Für die Beschreibung dieser Zweiteilchen-Wechselwirkung sind vier Operatoren notwendig. Daher werden jeweils zwei Paare der Erzeuger und Vernichter ( $e_i^\dagger e_j$

<sup>5</sup>Dies ist eine dünn besetzte Matrix, in der aus Speicherplatzgründen nur die von Null verschiedenen Elemente angegeben werden. Außerdem sind Operationen wie Matrixmultiplikation von Sparse-Matrizen schneller als die entsprechenden Operationen mit konventionellen Matrizen.



sowie  $h_i^\dagger h_j$ ) hintereinander angewendet. Dabei treten die Terme  $\sum_{ijkl} V_{ijkl} e_i^\dagger e_j e_k^\dagger e_l$  und  $\sum_{ijkl} V_{ijkl} h_i^\dagger h_j h_k^\dagger h_l$  auf, bei denen noch Normalordnung<sup>6</sup> hergestellt werden muss. Um dies zu erreichen, müssen die entsprechenden Kommutator-Relationen zwischen den einzelnen Erzeugern- und Vernichtern gleicher Teilchensorte beachtet werden. Für die Elektronen erhält man somit:

$$\sum_{ijkl} V_{ijkl} e_i^\dagger e_j e_k^\dagger e_l = - \sum_{ijkl} V_{ijkl} e_i^\dagger e_k^\dagger e_j e_l + \sum_{ijl} V_{ijjl} e_i^\dagger e_l. \quad (2.43)$$

Analog erhält man für die Löcher:

$$\sum_{ijkl} V_{ijkl} h_i^\dagger h_j h_k^\dagger h_l = - \sum_{ijkl} V_{ijkl} h_i^\dagger h_k^\dagger h_j h_l + \sum_{ijl} V_{ijjl} h_i^\dagger h_l. \quad (2.44)$$

Die Terme attraktiver Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen und zwei Löchern ergeben durch Vertauschung von Loch- und Elektron-Operatoren:

$$- \sum_{ijkl} V_{ijkl} e_i^\dagger e_j h_k^\dagger h_l = - \sum_{ijkl} V_{ijkl} e_i^\dagger h_k^\dagger e_j h_l. \quad (2.45)$$

### 2.5.2.1. Diagonalisierung der Blöcke

Die so aufgebauten einzelnen Unterblöcke der Hamilton-Matrix sind vergleichsweise klein gegenüber der vollen 4096 x 4096-Matrix. Daher wird die Diagonalisierung erheblich schneller von statten gehen, da diese mit  $N^3$  skaliert, wenn  $N$  die Anzahl der Basiszustände ist. Für eine spätere Betrachtung mit d-Schale und  $2^{24} \approx 16 \cdot 10^6$  Basiszuständen ist eine solche Zerlegung in Blöcke aus Speicherplatz- und Rechenzeitgründen unbedingt erforderlich. Die Diagonalisierung wurde numerisch mit Hilfe des Programmpaketes Matlab durchgeführt. Aufgrund der Zerlegung in einzelne Blöcke war der Rechenaufwand bei  $2^{12}$  Basiszuständen vernachlässigbar. Bei  $2^{24}$  Zuständen erfolgte die Diagonalisierung in wenigen Minuten.

### 2.5.3. Wechselwirkung mit einem Lichtfeld

Nachdem die Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander bereits im Hamilton-Operator  $H = H_0 + H_{WW}$  enthalten ist, wird nun die Wechselwirkung der Ladungsträger mit einem klassischen Lichtfeld beschrieben. Dazu wird die sog. Dipol-Näherung verwendet. Diese ist sinnvoll, da die Wellenlänge (im sichtbaren Bereich  $\sim 500$  nm) groß gegenüber der typischen Ausdehnung eines Quantenpunktes ( $\sim 1$  nm) ist. Im Rahmen dieser Näherung lautet der Hamilton-Operator der Licht-Materie-Wechselwirkung [58]:

$$H_D = \vec{E} \sum_{i,j,\sigma} \langle i | - e \vec{r} | j \rangle a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}. \quad (2.46)$$

Dabei bezeichnen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  Einteilchen-Eigenzustände zum Hamilton-Operator, der die Materie beschreibt, und  $a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}$  Übergänge in der Materie sowie  $\vec{E}$  das elektrische Feld. Die Matricelemente  $\langle i | - e \vec{r} | j \rangle$  werden nun wie schon bereits die Coulomb-Matricelemente (s. Gl. A.2) in der Einhüllenden-Näherung (s. Gl. 2.17) ausgewertet:

<sup>6</sup>Unter Normalordnung versteht man eine Schreibweise, bei der die Erzeuger links und die Vernichter rechts stehen.



$$\begin{aligned}
\langle i| - e\vec{r}|j\rangle &= \int d^3r \xi_i^*(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}) (-e\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) u_j(\vec{r}) \\
&= \sum_{\vec{R}_k} \int_{\text{EZ}} d^3r \xi_i^*(\vec{r} + \vec{R}_k) u_i^*(\vec{r}) (-e \cdot [\vec{r} + \vec{R}_k]) \xi_j(\vec{r} + \vec{R}_k) u_j(\vec{r}) \\
&\approx \sum_{\vec{R}_k} \xi_i^*(\vec{r} + \vec{R}_k) \xi_j(\vec{r} + \vec{R}_k) V_{\text{EZ}} \\
&\quad \cdot \left[ \underbrace{\frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{\text{EZ}} d^3r u_i^*(\vec{r}) (-e\vec{r}) u_j(\vec{r})}_{=:\vec{d}} + \underbrace{\frac{1}{V_{\text{EZ}}} (-e\vec{R}_k) \int_{\text{EZ}} d^3r u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r})}_{-e\vec{R}_k \delta_{ij}} \right] \\
&\approx \vec{d} \underbrace{\int d^3r \xi_i^*(\vec{r}) \xi_j(\vec{r})}_{P_{ij}} + \text{Intraband-Beiträge}.
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Im ersten Schritt wurde die Integration über den ganzen Raum in eine Summe über die einzelnen Elementarzellen (EZ) zerlegt und die Periodizität der Blochfaktoren  $u$  verwendet. Im nächsten Schritt wurde angenommen, dass sich die Einhüllenden nur langsam über eine Gitterzelle ändern, sodass sie vor das Integral gezogen werden können. Der zweite Term in der eckigen Klammer liefert eine Orthogonalitätsrelation der Blochfaktoren. Dieser Term entspricht Intraband-Beiträgen und wird im Folgenden vernachlässigt, da hier nur das sichtbare Spektrum von Interesse ist. Somit erhält man insgesamt den Dipol-Hamilton-Operator in der Einhüllenden-Näherung im  $cv$ -Bild [58]:

$$H_D = \sum_{i,j,\sigma} \vec{E} \cdot \vec{d} \cdot P_{ij} c_{i\sigma}^\dagger v_{j\sigma} + h.c. \quad . \tag{2.48}$$

Dabei steht  $h.c.$  für den hermitesch konjugierten Term und  $P = \sum_{i,j} P_{ij} c_{i\sigma}^\dagger v_{j\sigma} + h.c.$  für den Dipol-Operator. Die Dipol-Auswahlregeln berechnen sich als Überlapp der Oszillator-Wellenfunktionen aus Gl. 2.31:

$$P_{ij} = \int d^3r \xi_i^{c*}(\vec{r}) \xi_j^v(\vec{r}). \tag{2.49}$$

Da die Darstellung der Wellenfunktionen im  $cv$ -Bild ist, so ist auch die Darstellung des Dipol-Hamilton-Operators im  $cv$ -Bild. Da die Gesamtbetrachtung wie zuvor beim Hamilton-Operator  $H = H_0 + H_{WW}$  im  $eh$ -Bild erfolgen soll, wird im folgenden Abschnitt die entsprechende Transformation vorgenommen.

## 2.5.4. Berechnung der optischen Spektren

In diesem Abschnitt wird die Berechnung der optischen Spektren betrachtet. Dazu wird Fermis Goldene Regel verwendet. In dieser Näherung ist die Übergangsrate vom Anfangszustand  $|\Psi_i\rangle$  in den Endzustand  $|\Psi_f\rangle$  unter Einfluss eines optischen Feldes der Frequenz  $\omega$  gegeben durch [59]:

$$\Gamma_{\Psi_i \rightarrow \Psi_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[ |\langle \Psi_f | H_D | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) + |\langle \Psi_f | H_D | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) \right]. \quad (2.50)$$

Dabei sind sowohl  $\Psi_i$  als auch  $\Psi_f$  Eigenzustände des Hamilton-Operators  $H = H_0 + H_{WW}$ . Unter Verwendung des Hamilton-Operators in der Dipol-Näherung (s. Gl. 2.48) erhält man:

$$\Gamma_{\Psi_i \rightarrow \Psi_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |Ed|^2 \left[ |\langle \Psi_f | P | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) + |\langle \Psi_f | P | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) \right]. \quad (2.51)$$

Zu berechnen sind nun die Matrixelemente  $\langle \Psi_f | P | \Psi_i \rangle$ . Wenn  $\Psi_j^{N_X}$  die Menge der Eigenzustände in der diagonalisierten Basis mit  $N_X$  Exzitonen und  $\varphi_j^{N_X}$  die Menge der Eigenzustände in der Fock-Basis mit  $N_X$  Exzitonen sind, so können die Übergangsmatrixelemente  $M = \langle \varphi_\alpha^{N_X+1} | P | \varphi_\beta^{N_X} \rangle$  in der bekannten Fock-Basis berechnet werden und anschließend mittels Basistransformation in der neuen diagonalisierten Basis dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f^{N_X+1} | P | \Psi_i^{N_X} \rangle &= \langle \Psi_f^{N_X+1} | \left( \sum_\alpha |\varphi_\alpha^{N_X+1}\rangle \langle \varphi_\alpha^{N_X+1}| \right) P \left( \sum_\beta |\varphi_\beta^{N_X}\rangle \langle \varphi_\beta^{N_X}| \right) | \Psi_i^{N_X} \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \Psi_i^{N_X+1} | \varphi_\alpha^{N_X+1} \rangle \langle \varphi_\alpha^{N_X+1} | P | \varphi_\beta^{N_X} \rangle \langle \varphi_\beta^{N_X} | \Psi_f^{N_X} \rangle = V^{-1} \cdot M \cdot V. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Im ersten Schritt wurden zwei vollständige Einsen eingeschoben, jeweils für den Hilbertraum mit  $N_X$  und  $N_X + 1$  Exzitonen. Die Basiswechselmatrizen  $V^{-1}$  und  $V$  werden aus der exakten Diagonalisierung gewonnen. Dabei transformiert die Matrix  $V^{-1}$  von der Fock-Basis in die neue Basis und entsprechend  $V$  die Transformationsmatrix zurück in die Fock-Basis. Die Übergangsmatrixelemente bzgl. der Fock-Basis für die Absorption von Photonen berechnen sich zu:

$$\langle \varphi_\alpha^{N_X+1} | P | \varphi_\beta^{N_X} \rangle = \sum_{ij} P_{ij} \langle \varphi_\alpha^{N_X+1} | e_i^\dagger h_j^\dagger | \varphi_\beta^{N_X} \rangle. \quad (2.53)$$

Darin sind die Dipol-Auswahlregeln in Form des Überlapps der Wellenfunktionen  $P_{ij}$  enthalten (s. Gl. 2.49).

Analog zu der hier beschriebenen Rechnung für die Absorption von Photonen erhält man die Übergangsmatrixelemente für die Emission, indem man jeweils ein entsprechendes Elektron-Loch-Paar vernichtet.

### 2.5.4.1. Ausnutzen von Unterräumen

Im Abschnitt zur exakten Diagonalisierung wurde beschrieben, wie die Hamilton-Matrix aus voneinander unabhängigen Unterblöcken zu gleicher Teilchenzahl aufgebaut und diagonalisiert werden kann. Bei der Wechselwirkung mit Photonen kann, wie oben gezeigt wurde, entweder ein Elektron-Loch-Paar erzeugt oder vernichtet werden. Die folgende Diskussion wird beispielhaft für die Emission eines Photons geführt:

Der einfachste Fall beschreibt den Übergang von einem mit einem Exziton gefüllten Quantenpunkt in den Vakuum-Zustand:  $1X \rightarrow 0X$ . Somit ist für die Ausgangszustände nur der Unterraum zur Teilchenzahl  $n_i = 2$  von Interesse. Damit ein Exziton vorliegt, müssen die beiden Teilchen genau ein Elektron und ein Loch sein. Damit schränkt man die möglichen Ausgangszustände im Unterraum zur Teilchenzahl  $n_i = 2$  auf einen weiter reduzierten Unterraum mit  $n_i^e = n_i^h = 1$  ein. Dieser zerfällt entsprechend der guten Quantenzahlen in weitere Unterräume, was die numerische Berechnung erheblich vereinfacht, für die folgende Diskussion aber nicht relevant ist.

Die Zahl der möglichen Startkonfigurationen wird weiter eingeschränkt, wenn man annimmt, dass sich der Quantenpunkt vor der Absorption in einem der Grundzustände befindet. Das bedeutet, dass als Startkonfigurationen nur diejenigen Vielteilchen-Konfigurationen berücksichtigt werden, deren Energie minimal ist. Für den  $1X$ -Zustand bedeutet dies, dass nur s-artige Konfigurationen in Frage kommen. Es sei angemerkt, dass diese Vielteilchen-Konfigurationen Eigenzustände zu  $H = H_0 + H_{WW}$  sind, d.h. nicht mehr einfach antisymmetrisierte Produktzustände, sondern Mischungen davon sind. Dennoch ist zu erwarten, dass der niedrigste  $1X$ -Zustand sich aus den Einteilchen-Zuständen der s-Schale zusammensetzt. Daher wird dieser Vielteilchen-Zustand als s-artig bezeichnet. Eine solche Einschränkung der Startkonfigurationen ist dadurch begründet, dass die Relaxation innerhalb eines Quantenpunktes auf kleineren Zeitskalen stattfindet als der Übergang zwischen verschiedenen Exziton-Konfigurationen. Wenn mehrere Grundzustands-Konfigurationen auftreten, so wird über diese Startkonfigurationen gemittelt, wobei alle Konfigurationen mit einer Wahrscheinlichkeit von Eins eingehen. Tatsächlich ist es jedoch so, dass diese Wahrscheinlichkeiten durch die thermische Besetzung gegeben sind. Demnach sind höher angeregte Zustände entsprechend der Fermi-Funktion unwahrscheinlicher besetzt, wodurch höher angeregte Exziton-Komplexe zunehmend unwahrscheinlicher auftreten. Diese Tatsache würde zu Korrekturen in den Linienhöhen führen, was in dieser Arbeit allerdings nicht berücksichtigt wird, da hier überhaupt erstmal die prinzipielle energetische Reihenfolge der Spektrallinien von Interesse ist.

Nach der Emission des einzigen Exzitons ist der Quantenpunkt mit keinem Teilchen mehr gefüllt. Somit ist für die Endzustände nur der Unterraum zur Teilchenzahl  $n_f = 0$  von Interesse. In diesem Fall beinhaltet das nur einen Zustand ohne Besetzung, den man Vakuum-Zustand nennt. Für höhere Anregungen bedeutet dies aber, dass prinzipiell alle Übergänge in den Unterraum mit der entsprechenden Teilchenzahl denkbar sind. Ob diese tatsächlich stattfinden wird durch die Dipol-Auswahlregeln festgelegt (s. Gl. 2.49). Man erkennt am Beispiel für den Übergang  $1X \rightarrow 0X$ , dass hierfür nur die Unterräume zu den Teilchenzahlen  $n_i = 2$  und  $n_f = 0$  relevant sind und alle weiteren Unterräume bei diesem Übergang nicht berücksichtigt werden müssen. Allgemein bedeutet dies, dass für neutrale Exzitonen jeweils nur die beiden Unterräume zu der passenden geradzahligen Teilchenanzahl berücksichtigt werden müssen. Analog ist es bei der Betrachtung einfach geladener Exzitonen ausreichend sich auf die beiden Unterräume zu den passenden ungeradzahligen Teilchenzahlen zu beschränken.

## 2.6. Exzitonen im Quantenpunkt

Bevor Exzitonen und Exziton-Komplexe im Quantenpunkten betrachtet werden, wird kurz auf Exzitonen im Volumenkristall eingegangen.

### 2.6.1. Exziton im Volumenkristall

Die elementare Anregung in einem Halbleiter wird im Einteilchen-Bild durch das Heben eines Elektrons aus dem gefüllten Valenzband in das leere Leitungsband dargestellt. Das Fehlen eines Elektrons im Valenzband wird als Loch bezeichnet. Ein solches Loch (h) ist ein Quasi-Teilchen mit entgegen gesetzter Ladung und entgegen gesetztem Spin bzgl. des entfernten Elektrons (e). Aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern werden diese miteinander gekoppelt. Ein einzelnes Elektron-Loch-Paar mit Coulomb-Wechselwirkung bezeichnet man als Exziton (X). Dessen Energie durch  $H_X = H_e + H_h + H_{\text{Coul}}$  beschrieben.

Man unterscheidet dabei zwischen zwei Arten von Exzitonen: Der eine Grenzfall sind stark gebundene Exzitonen. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Wechselwirkung im Wesentlichen durch den Überlapp der an einem Gitterplatz lokalisierten Ladungswolken beschrieben werden kann. Sie treten daher eher in ionischen Materialien und Verbindungen mit hoher Bindungsenergie auf. Solche stark gebundenen Exzitonen werden als sog. Frenkel-Exzitonen bezeichnet [60] und sind in den hier untersuchten III-V-Halbleitern nicht von Bedeutung.

Der andere Grenzfall beschreibt Exzitonen mit schwächerer Bindung und größerem Abstand. Diese Art von Exzitonen treten in den meisten Halbleitern auf und werden als Wannier-Exzitonen bezeichnet [60]. In Halbleiter-Volumenkristallen lassen sie sich quantenmechanisch analog zum Wasserstoff-Atom mit Hilfe einer Schwerpunkt- und Relativkoordinate beschreiben:

Die attraktive Elektron-Loch-Wechselwirkung führt zu einer Absenkung der Gesamtenergie. In parabolischer Näherung mit effektiver Masse (s. Gl. 2.12) erhält man für die Exzitonen-Energie  $E_X$ :

$$E_X = E_g - R_y \frac{\mu}{\varepsilon_r^2 n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (2.54)$$

Dabei bezeichnen  $E_g$  die Bandlücke,  $R_y = 13.6 \text{ eV}$  die Rydberg-Konstante,  $n$  die Hauptquantenzahl,  $k$  die Wellenzahl,  $\varepsilon$  die statische Dielektrizitätskonstante,  $\hbar = h/(2\pi)$  das reduzierte Planck'sche Wirkungsquantum sowie  $M = m_{\text{eff}}^e + m_{\text{eff}}^h$  die Exzitonenmasse. Außerdem beschreibt  $1/\mu = 1/m_{\text{eff}}^e + 1/m_{\text{eff}}^h$  die reduzierte effektive Masse.

Die verschiedenen Energieniveaus des Exzitons bilden eine Art Rydberg-Serie mit Abständen von  $1/n^2$ , ähnlich wie beim Wasserstoff-Atom. In beiden Fällen führt die attraktive Elektron-Loch-Wechselwirkung zu einer Absenkung der Gesamtenergie. Daher hat das gebundene Elektron-Loch-Paar jeweils eine etwas geringere Energie als der ungebundene Zustand. Allerdings ist die Bindungsenergie des Wannier-Exzitons meist kleiner und die räumliche Ausdehnung größer als beim Wasserstoffatom. Das liegt an dem Einfluss des umgebenden Festkörpers, der die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch teilweise abschirmt. Diese Abschirmung wird bei der Beschreibung des Wannier-Exzitons durch eine effektive Dielektrizitätskonstante berücksichtigt. Um die Analogie des Exzitons zum Wasserstoff-Atom zu verdeutlichen, wird für die räumliche Ausdehnung ein Exziton-Bohr-Radius  $a_B^X = a_B^H \frac{\varepsilon}{\mu}$  eingeführt.

### 2.6.2. Exziton-Komplexe im Quantenpunkt

Voraussetzung für die Lichtemission ist die Besetzung der lokalisierten Zustände im Quantenpunkt mit Elektronen und Löchern. Ausgehend davon können unterschiedliche Konfi-

gurationen gebildet werden, indem die verschiedenen Einteilchen-Zustände mit Ladungsträgern besetzt werden. Diese Einteilchen-Zustände sind die Basiszustände der quantenmechanischen Beschreibung und bestimmen die möglichen Konfigurationen des elektronischen Systems. Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern ändert die Konfigurationsenergien und damit auch die Übergangsenergien um typischerweise einige meV [32].

Zur Diskussion wird ein Quantenpunkt mit zwei gebundenen spinentarteten Zuständen für Elektronen und Löcher betrachtet (s. Abb. 2.14):

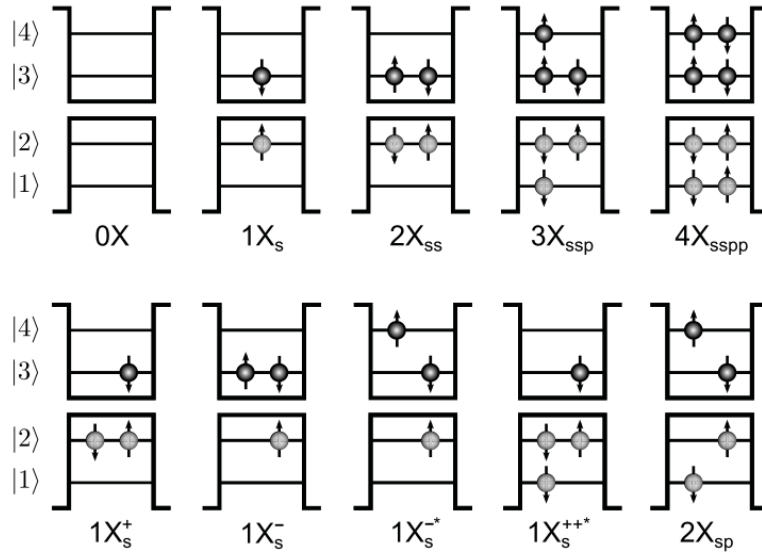


Abbildung 2.14.: Beispiele für mögliche Konfigurationen in einem Quantenpunkt mit einer p- und s-Schale für Elektronen ( $|4\rangle$  und  $|3\rangle$ ) und Löcher ( $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ ). Gezeigt sind der Vakuum-Zustand  $0X$  sowie Konfigurationen, bei denen eine Rekombination an der s-Schale möglich ist. Dies ist für das s-Exziton  $1X_s$ , das Grundzustand-Biexziton  $2X_{ss}$ , den Zustand  $3X_{ssp}$ , den vollständig gefüllten Quantenpunkt  $4X_{sspp}$  sowie weitere geladene und angeregte geladene Zustände der Fall. Geladene Zustände werden mit der entsprechenden Ladung im Exponenten versehen, wogegen angeregte geladene Zustände zusätzlich mit \* gekennzeichnet und auch als 'heiße Zustände' bezeichnet werden. Abb. nach [32].

Der Grundzustand dieses Quantenpunkt-Systems ist durch ein leeres Leitungsband und ein volles Valenzband charakterisiert. Durch das Heben eines Elektrons aus dem gefüllten Valenzband in das leere Leitungsband entsteht ein Exziton<sup>7</sup>  $X$ . In Absorptionsexperimenten bei niedrigen Temperaturen sieht man die Energieabsenkung der Exzitonen bzgl. der Bandkante anhand einer Serie scharfer Resonanzen energetisch direkt unterhalb der Bandlücke des zugrundeliegenden Halbleiter-Materials.

Abgesehen von einem Exziton, das aus einem Elektron-Loch-Paar zusammengesetzt ist, können in einem Quantenpunkt auch höhere exzitonische Komplexe, bestehend aus mehreren Elektronen und Löchern, auftreten (s. Abb. 2.14). Ein Beispiel dafür sind geladene

<sup>7</sup>Die vollständigen Bezeichnungen der Exziton-Komplexe sind in Abb. 2.14 angegeben: Damit beschreibt  $1X_s$  das s-Exziton. Da im Weiteren nur s-artige Komplexe betrachtet werden, wird für das s-Exziton die Kurzschreibweise  $X$  eingeführt.

Exzitonen ( $X^+$ ,  $X^-$ ). Diese bestehen aus einem Elektron-Loch-Paar sowie einem weiteren Ladungsträger. Daher werden sie auch Trionen genannt. Ein positiv geladenes Trion  $X^+$  besteht aus einem Exziton und einem zusätzlichen Loch. Entsprechend besteht ein negativ geladenes Trion  $X^-$  aus einem Exziton und einem zusätzlichen Elektron. Ein weiteres Beispiel sind Biexzitonen<sup>8</sup> ( $XX$ ), bestehend aus zwei Elektron-Loch-Paaren.

Durch Rekombination eines Elektron-Loch-Paares ist es möglich, dass aus einem dieser Komplexe ein niedrigerer Komplex im Quantenpunkt entsteht. Ein Biexziton kann beispielsweise durch Rekombination eines Elektron-Loch-Paares unter Aussenden eines Photons in ein Exziton zerfallen. Die Biexziton-Linie im Spektrum eines einzelnen Quantenpunktes wird bei einer Energie beobachtet, die sich von der der Exziton-Linie um den Betrag der Biexziton-Bindungsenergie unterscheidet. Diese Bindungsenergie ist auf die zusätzliche Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Konfigurationen der Ladungsträger zurückzuführen.

---

<sup>8</sup>Analog zum s-Exziton wird für das Grundzustand-Biexziton  $2X_{ss}$  die Kurzschreibweise  $XX$  eingeführt.

## 3. Ergebnisse

### 3.1. Experimentelle Ergebnisse

Für mögliche Anwendungen sind bei Quantenpunkten insbesondere die optischen Eigenschaften von Interesse. Um diese zu untersuchen, kann man das System nicht resonant mit einem optischen Puls anregen. Dies ist beispielsweise bei Photolumineszenz (PL)-Messungen der Fall. Aktuell wurde ein InGaAs-Quantenpunkt von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Michael Jetter von der Universität Stuttgart hergestellt. Dieser Quantenpunkt wurde von der Gruppe von Prof. Dr. Peter Michler, ebenfalls an der Universität Stuttgart, spektroskopiert. Dabei wurden verschiedene Emissionslinien gemessen (s. Abb. 3.2 a), von denen eine zunächst nicht gedeutet werden konnte. Ziel dieser Arbeit ist es, den Quantenpunkt theoretisch zu modellieren und insbesondere diese unerklärte Linie zu deuten.

Bei einer PL-Messung werden Elektronen durch optische Anregung aus dem Valenz- in das Leitungsband des umgebenden Volumenmaterials gehoben, sodass Löcher zurückbleiben. Von diesen quasi-kontinuierlichen Zuständen findet eine schnelle Relaxation der Ladungsträger in die Benetzungsschicht des Quantenpunktes statt [61], von wo aus sie weiter in die energetisch tiefer liegenden Zustände des Quantenpunktes relaxieren können (s. Abb. 3.1).

Beim anschließenden Relaxationsprozess rekombinieren Elektronen und Löcher im Quantenpunkt und setzen die verbleibende Energiedifferenz frei. Diesen Prozess nennt man Photolumineszenz. Um bei einer PL-Messung Störeffekte wie Phononen möglichst zu unterdrücken und scharfe Linien zu messen, wird die Messung bei tiefen Temperaturen durchgeführt [30]. Mit einer solchen Tieftemperatur-Messung wurde das folgende PL-Spektrum des Quantenpunktes gemessen. In Abb. 3.2 (a) ist eine Auftragung der Intensität gegen die Energie gezeigt.

Links ist das gemessene PL-Spektrum in einem Energie-Intensitäts-Diagramm dargestellt. Man erkennt eine Vielzahl von Emissionslinien, die im Energieintervall von 1014 meV bis 1024 meV liegen. Mit einer Analyse des zugehörigen Leistungsspektrums (s. Abb. 3.2 b) lässt sich feststellen, welche der gemessenen Linien Exziton- bzw. Biexziton-Komplexen zuzuordnen sind [62]:

Die Intensität der PL-Linie eines Exzitons ist proportional zur Wahrscheinlichkeit ein Exziton zu erzeugen. Zusätzlich ist diese Wahrscheinlichkeit proportional zur Anregungsstärke. Daher ist eine Steigung von  $m = 1$  in einem doppelt-logarithmischen Plot der PL-Intensität gegen die Anregungsstärke zu erwarten. Die Intensität der PL-Linie eines Biexzitons ist proportional zur Erzeugung eines zweiten Exzitons, wenn bereits ein Exziton vorhanden ist. Wenn die Wahrscheinlichkeit der Erzeugung eines zweiten Exzitons unabhängig von der des ersten ist, so ist die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung eines Biexzitons das Quadrat der beiden Einzelerzeugungswahrscheinlichkeiten der Exzitonen.



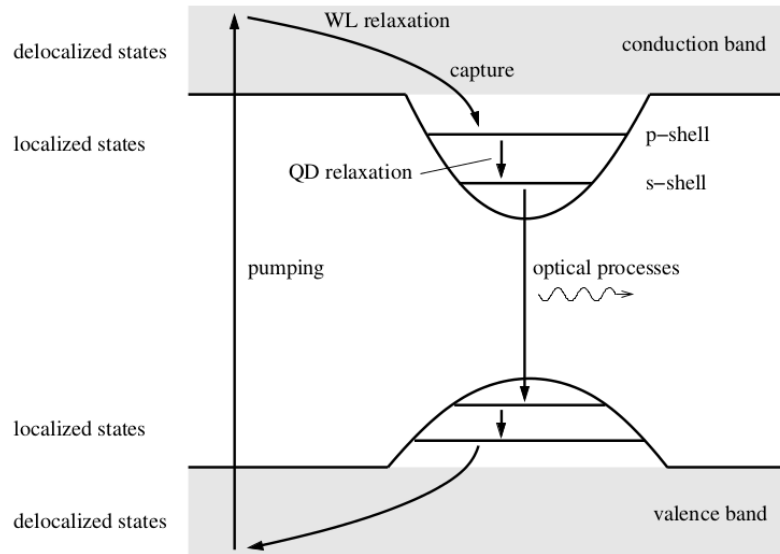


Abbildung 3.1.: Schematische Darstellung des Anregungsprozesses und der anschließenden Relaxation. Nicht resonante Anregung erzeugt Ladungsträger in höher angeregten delokalisierten Zuständen, von wo aus diese in die Benetzungsschicht (WL) und anschließend weiter in den Quantenpunkt (QD) relaxieren (Abb. in [61]).

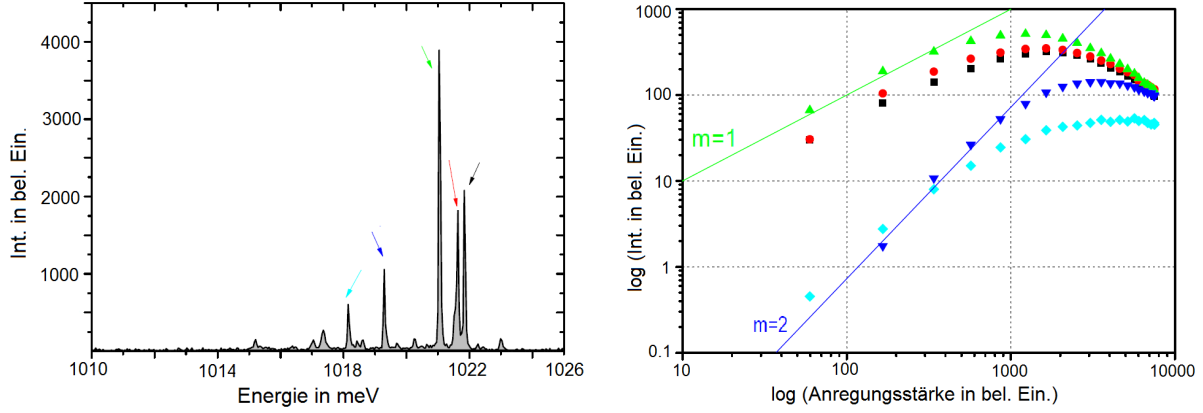
Damit ist eine Steigung von  $m = 2$  im doppelt-logarithmischen Plot zu erwarten. Da in dem Leistungsspektrum (s. Abb. 3.2 b) der dominanten Linien nur Steigungen von  $m = 1$  und  $m = 2$  auftreten, die charakteristisch für Exziton- bzw. Biexziton-Komplexe sind, ist es ausreichend, sich bei der Analyse auf solche Komplexe zu beschränken.

Um Informationen über mögliche Zerfallskaskaden im Spektrum zu erhalten, wird ein Aufbau nach Hanbury-Brown-Twiss (HBT) verwendet (s. Abb. 3.3).

In einem solchen Experiment wird das zu untersuchende Licht auf einen 50/50 Strahlteiler geschickt. Dann wird jeder der zwei Teilstrahlen durch einen Filter geschickt und auf einen Photodetektor fokussiert. Durch Einstellen der Transmission eines Filters auf die Energie der ersten Linie  $\hbar\omega_1$  und die des anderen Filters auf  $\hbar\omega_2$  ist es möglich, ein Photon 1 mit der Energie  $\hbar\omega_1$  als Startsignal zur Zeit  $t$  und ein Photon 2 mit  $\hbar\omega_2$  als Stoppsignal zur Zeit  $t' = t + \tau$  zu verwenden und die Zahl der Detektionen als Funktionen der Verzögerungszeit  $n(\tau)$  zwischen den beiden Signalen zu messen.

Durch vielfache Wiederholung des Experiments erhält man die bedingte Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon 2 mit der Energie  $\hbar\omega_2$  erzeugt wird, nachdem der erste Rekombinationsprozess unter Aussendung eines Photons 1 der Energie  $\hbar\omega_1$  bereits stattgefunden hat. Durch Einfügen einer Zeitverzögerung in den Strahlengang des Stop-Detektors ist es möglich, auch 'negative Zeitdifferenzen' zu messen: Wählt man beispielsweise eine Zeitverzögerung von 30 ns und misst eine Zeitdifferenz von 10 ns, so kann man schlussfolgern, dass die Emission von Photon 2, das am Stop-Detektor gemessen wird, 20 ns vor der Emission von Photon 1 auftritt, das den Start-Detektor ausgelöst hat. Einem solchen Prozess wird dann die Zeitverzögerung  $\tau = -20$  ns zugeschrieben.





(a) Gemessenes PL-Spektrum des Quantenpunktes. Dargestellt ist die Intensität in beliebigen Einheiten gegen die Energie.

(b) Zu den links jeweils farbig markierten Emissionslinien gehöriges Leistungsspektrum in doppelt-logarithmischer Auftragung.

Abbildung 3.2.: Emissionslinien (links) mit zugehörigem Leistungsspektrum (rechts). Messung und Abbildung freundlicherweise von Jan Kettler (Universität Stuttgart) zur Verfügung gestellt.

Wenn die Verzögerungszeit  $\tau$  zwischen den Photonenpaaren sehr viel kleiner als die mittlere Zeit zwischen Detektionen ist, so ist  $n(\tau)$  proportional zur Paarkorrelationsfunktion  $g^{(2)}(\tau)$  der beiden Photonen [8]. Der Verlauf der Paarkorrelationsfunktion hängt von der Lichtquelle ab (s. Abb. 3.4).

Bei einer kohärenten Lichtquelle  $g^{(2)}(\tau) = 1$  sind die Photonen komplett unkorreliert (s. Abb. 3.4 a). Dagegen sind die Photonen bei Super-Poisson-Licht  $1 < g^{(2)}(\tau) < 2$  korreliert und es ist wahrscheinlich, zwei Photonen gleichzeitig zu detektieren (s. Abb. 3.4 b). Hierbei spricht man von 'bunching'. Im Gegensatz dazu sind die Photonen bei Sub-Poisson-Licht  $g^{(2)}(\tau) < 1$  anti-korreliert und es ist unwahrscheinlich, zwei Photonen gleichzeitig zu detektieren (s. Abb. 3.4 c), man spricht von 'anti-bunching' [8].

In Abb. 3.5 (a) ist beispielhaft das Ergebnis einer Kreuzkorrelationsmessung nach HBT zwischen der Exziton- und Biexziton-Linie dargestellt.

Der konstante Verlauf für große  $|\tau|$  in Abb. 3.5 (a) an den äußeren Rändern ist unkorreliert und für die Analyse der Emissionslinien im Quantenpunkt nicht relevant. Der Bereich um Null dagegen ist von zentraler Bedeutung: Für positive  $\tau$  um Null tritt 'bunching' auf, da es wahrscheinlich ist, ein Photon einer Biexziton-Linie vor einem Photon einer Exziton-Linie zu detektieren. Dagegen erhält man für negative  $\tau$  um Null 'anti-bunching', da die Wahrscheinlichkeit gering ist, ein Photon einer Exziton-Linie vor einem Photon einer Biexziton-Linie zu detektieren [62, 8]. Ein solches Verhalten deutet stark auf Zerfallskaskaden hin, bei denen ein Photon einer Emissionslinie stets nach dem Photon einer anderen Emissionslinie detektiert wird, wie es auch beim Zerfall des Biexzitons in ein Exziton zu erkennen ist (s. Abb. 3.5 a). Solche Kreuzkorrelationsmessungen wurden zwischen allen Linien durchgeführt und die Abhängigkeiten in Abb. 3.5 (b) dargestellt.

Anhand des Leistungsspektrums (s. Abb. 3.2 b) und der Kreuzkorrelationen (s. Abb. 3.5 b) lässt sich auf die folgenden beiden Zerfallskanäle schließen:

Der rote lange Pfeil in Abb. 3.5 (b) zeigt den Zerfall eines Biexziton-Komplexes in einen

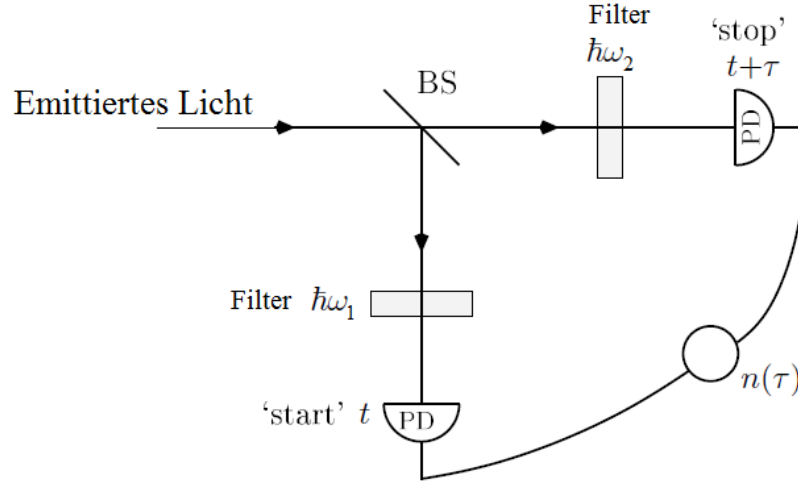


Abbildung 3.3.: Kreuzkorrelationsmessung nach HBT: Der einfallende Strahl wird durch einen nicht-polarisierenden 50/50 Strahlteiler (BS) geteilt. Jeder der zwei geteilten Strahlen passiert einen Filter und wird auf einen Photodetektor (PD) fokussiert. Die Zahl der Detektionen als Funktion der Verzögerungszeit  $n(\tau)$  zwischen den Strahlen wird gemessen. (Abb. nach [62])

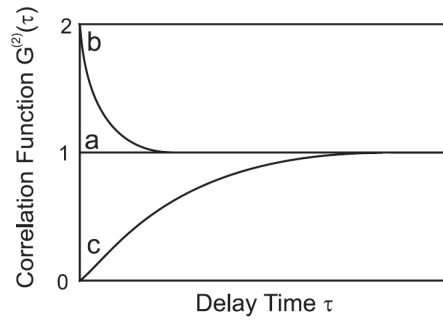


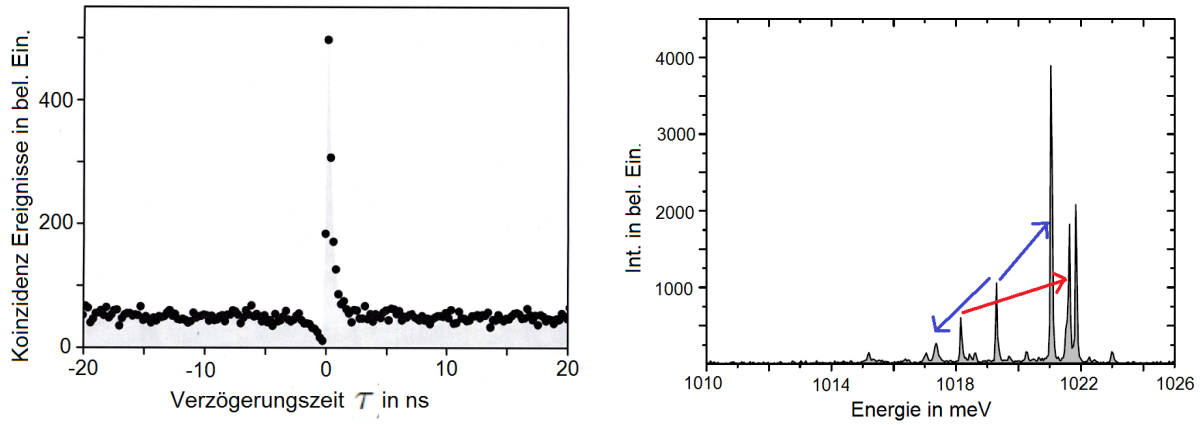
Abbildung 3.4.: Photon Paarkorrelationsfunktion  $g^{(2)}(\tau)$  einer kohärenten Lichtquelle a, einer Super-Poisson-Quelle b und einer Sub-Poisson-Quelle c. (Abb. in [8])

Exziton-Komplex und keine weiteren Korrelationen zu anderen Linien. Daher wird dieses Linienpaar dem Übergang von  $XX$  nach  $X$  zugeordnet.

Die beiden blauen Pfeile in Abb. 3.5 (b) zeigen den Zerfall einer Linie in zwei weitere. Da aufgrund des Leistungsspektrums nur Exziton- und Biexziton-Komplexe in Frage kommen (s. Abb. 3.2), muss es sich bei diesem Zerfallskanal um ein geladenes Biexziton handeln. Ob es sich dabei um ein negativ oder positiv geladenes Biexziton handelt, wird im folgenden Abschnitt mit Hilfe eines theoretisch berechneten Spektrums bestimmt.

## 3.2. Theoretische Ergebnisse

Im Folgenden wird das Emissionsspektrum des vorliegenden InGaAs-Quantenpunktes theoretisch modelliert. Ausgangspunkt dafür sind typische Parameter für dieses Materialsystem aus vorherigen Berechnungen optischer Spektren [58, 62]. Mit Hilfe der theoretisch



(a) Beispielhafte Korrelationsmessung zwischen der Exziton- und Biexziton-Linie. (b) Korrelierte Emissionslinien, Pfeilrichtung gibt Zerfallsweg an.

Abbildung 3.5.: Beispielhaftes Ergebnis einer HBT-Messung für die Exziton- bzw. Biexziton-Linie (links). Korrelierte Emissionslinien (rechts). Messung und Abbildung freundlicherweise von Jan Kettler (Universität Stuttgart) zur Verfügung gestellt.

berechneten Spektren werden den gemessenen Emissionslinien Übergänge zugeordnet.

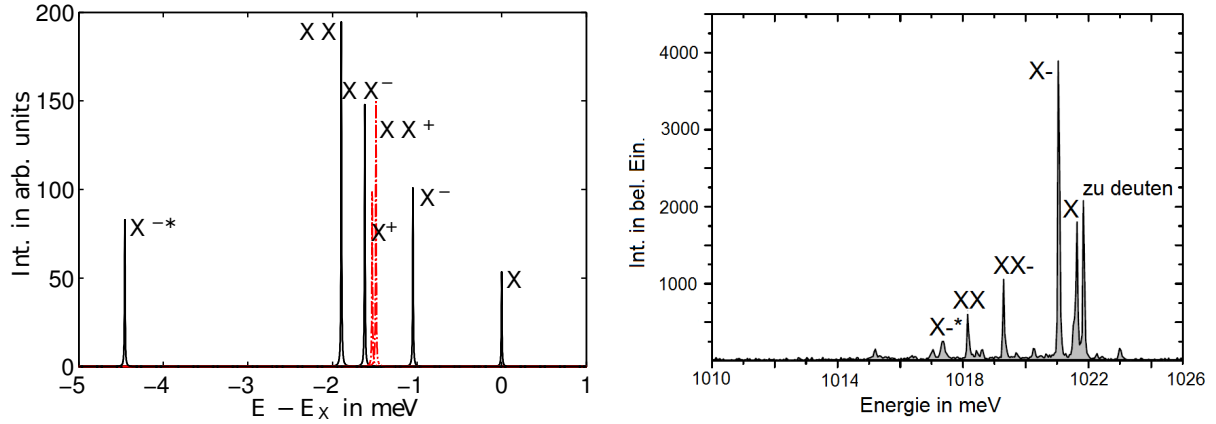
### 3.2.1. Gleiche Oszillatorlängen

In diesem Abschnitt wird das Emissionsspektrum vorläufig und vereinfacht für den Fall gleicher Oszillatorlängen  $l_k = l_k^e = l_k^h$  von Elektronen  $l_k^e$  und Löchern  $l_k^h$  untersucht. Dies hat den Vorteil, dass bei gegebener effektiver Loch- und Elektronenmasse  $m_h$  bzw.  $m_e$  die Bewegung in x-y-Richtung nur noch von  $l_k$  abhängt. Alle anderen Größen wie die Oszillatorenergien der Elektronen  $\varepsilon^e = \hbar\omega_e$  und Löcher  $\varepsilon^h = \hbar\omega_h$  werden durch  $l_k$  festgelegt. Denn bei gleichen Oszillatorlängen  $l_k^e = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e\omega_e}} = l_k^h = \sqrt{\frac{\hbar}{m_h\omega_h}} = l_k$  wird bei vorgegebener Masse der Elektronen und Löcher das Verhältnis  $\frac{\varepsilon_e}{\varepsilon_h}$  der Oszillatorenergien festgelegt. Eine alternative Wahl für eine einparametrische Abhängigkeit wäre das Festlegen gleicher Oszillatorenergien  $\varepsilon^e = \varepsilon^h$  der Elektronen und Löcher, was aber aufgrund der unterschiedlichen effektiven Massen (s. Gl. 2.12) weniger realistisch ist. In Tabelle 3.1 sind die verwendeten Parameter für den Modell-Quantenpunkt aufgelistet:

eff. Masse der Elektronen	$m_e = 0.065 m_0$
eff. Masse der Löcher	$m_h = 0.17 m_0$
Dielektrizitätskonstante	$\epsilon_r = 13.69$
Oszillatorlänge ( $l_k^e = l_k^h = l_k$ )	$l_k = 5.4 \text{ nm}$
Quantenfilmdicke	$L = 4 \text{ nm}$

Tabelle 3.1.: Typische Parameterwerte für den Modell-Quantenpunkt. Dabei bezeichnet  $m_0$  die Elektronenmasse im Vakuum [58].

Unter Verwendung der in Tab. 3.1 aufgelisteten Parameter ergab sich das folgende theoretisch berechnete Emissionsspektrums (s. Abb. 3.6 a):



(a) Emissionsspektrum für  $l_k^e = l_k^h = 5.4$  nm. Dargestellt ist die Intensität in beliebigen Einheiten gegen die Energie. Die Energie wurde bzgl. der Exziton-Energie  $E_x$  aufgetragen.

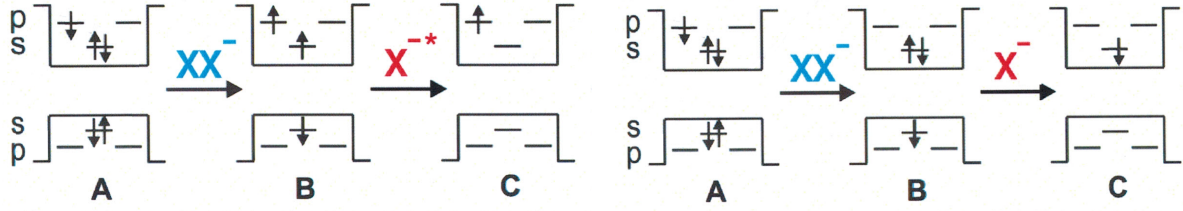
(b) Zum Vergleich das gemessene PL-Spektrum. Die relativ starke Linie rechts des Exzitons konnte bisher nicht gedeutet werden.

Abbildung 3.6.: Vergleich des vorläufig berechneten Emissionsspektrum (links) mit dem Experiment (rechts). Links sind die Linien zu  $X^{+}$  und  $XX^{+}$  rot und gestrichelt eingezeichnet, um zu verdeutlichen, dass diese nicht zum gemessenen Spektrum rechts passen. Im Experiment (rechts) konnte die relativ starke Linie rechts des Exzitons bisher nicht gedeutet werden. Messung und Abbildung freundlicherweise von Jan Kettler (Universität Stuttgart) zur Verfügung gestellt.

Man erkennt in Abb. 3.6, dass das theoretische berechnete Spektrum prinzipiell zu den gemessenen Linien passt. Zudem kann man folgern, dass die gemessenen Linienkomplexe zu Konfigurationen mit negativer Ladung gehören, da für physikalisch realistische effektive Massen der Elektronen und Löcher (s. Tab. 3.1) die Linien zu den negativ geladenen Konfigurationen prinzipiell in der richtigen Reihenfolge im Spektrum auftreten und die Linien zu den positiv geladenen nicht.

Somit handelt es sich neben dem Biexziton-Exziton-Linienpaar in Abb. 3.5 (b) um Linien zu Zerfallskaskaden eines negativ geladenen Biexzitons  $XX^{-}$ . Die Besetzung von  $XX^{-}$  setzt sich wie folgt zusammen: Aufgrund der Messung bei tiefen Temperaturen ist die Fermi-Funktion näherungsweise stufenförmig. Daher wird zunächst der  $XX$ -Zustand realisiert. Dieser entspricht einer Besetzung des s-Zustandes mit zwei Elektronen und zwei Löchern, wobei diese aufgrund des Pauli-Prinzips jeweils entgegengesetzte Spins haben. Für ein negativ geladenes Biexziton muss noch ein weiteres Elektron in der p-Schale hinzukommen. Dieses Elektron wird exemplarisch mit Spin down diskutiert (s. Abb. 3.7). Für diese Konfiguration des Zustandes  $XX^{-}$  treten die folgenden beiden Zerfallskanäle auf:

In Abb. 3.7 (a) gelangt man von Konfiguration A zur Konfiguration B durch Rekombination eines Elektron-Loch-Paares gleicher Schale mit entgegengesetztem Spin. Einen solchen Übergang nennt man dipol-erlaubt, da durch den entgegengesetzten Spin der Gesamtdrehimpuls von  $\pm 1$  für die Erzeugung eines Photons bereit gestellt werden kann. Nur dipol-erlaubte Übergänge sind im Spektrum sichtbar. Der Übergang von B nach C ist ebenfalls dipol-erlaubt, weil auch hier ein entsprechendes Elektron-Loch-Paar vernichtet



(a) Konfiguration A: negativ geladenes Biexziton  $XX^-$ . Konfiguration B: angeregtes negativ geladenes Exziton  $X^{-*}$ . Konfiguration C: Elektron in der p-Schale  $\varepsilon_p^e$ .  
 (b) Konfiguration A: negativ geladenes Biexziton  $XX^-$ . Konfiguration B: negativ geladenes Trion  $XX^-$ . Konfiguration C: Elektron in der s-Schale  $\varepsilon_s^e$ .

Abbildung 3.7.: Mögliche Zerfallskaskaden für ein einfach negativ geladenes Biexziton  $XX^-$ . Die Bezeichnungen der Linien beziehen sich auf die Ausgangskonfigurationen (Abb. nach [63]).

wird.

In Abb. 3.7 (b) ist der Übergang von A nach B nicht dipol-erlaubt, da keine Gesamtdrehimpuls-Differenz von  $\pm 1$  auftritt. Von B nach C erhält man wieder einen dipol-erlaubten Übergang durch Vernichtung eines entsprechenden Elektron-Loch-Paares.

Neben der bereits prinzipiellen Übereinstimmung der gemessen und theoretisch berechneten Emissionslinien befindet sich neben der Exziton-Linie allerdings eine noch unerklärte Linie (s. Abb. 3.6). Ziel ist im Folgenden diese Linie theoretisch zu modellieren. Dazu wird im nächsten Abschnitt zunächst eine Anpassung der Parameter vorgenommen.

### 3.2.2. Verschiedene Oszillatorlängen

In diesem Abschnitt wird eine Anpassung der Oszillatorlängen der Elektronen und Löcher anhand der Linienabstände im gemessenen Emissionsspektrum vorgenommen. Hierzu wird zunächst ein effektiver diagonalen Hamilton-Operator nach [62] aufgebaut.

#### 3.2.2.1. Diagonaler Hamilton-Operator

Betrachtet man die Coulomb-Matrix-Elemente, so erkennt man, dass die direkten  $V_{ij,ji} = D_{ij} = D_{ji}$  die größten sind (s. Tab. A.2). Deren Beitrag zu  $H_{WW}$  kann ausschließlich durch die Besetzungszahlen der Elektronen  $n_i^e = e_i^\dagger e_i$  und Löcher  $n_i^h = h_i^\dagger h_i$  ausgedrückt werden. Da die  $n_i$  in der Eigenbasis von  $H_0$  diagonal sind, so sind die durch  $n_i$  ausgedrückten Beiträge ebenfalls diagonal. Das gleiche gilt für die Austausch-Matrix-Elemente  $V_{ij,ij} = X_{ij} = X_{ji}$  mit  $i \neq j$ . Damit erhält man folgenden diagonalen Hamilton-Operator  $H_{\text{diag}}$ :

$$\begin{aligned}
 H_{\text{diag}} = & \sum_i \left( \varepsilon_i^e - \frac{1}{2} D_{ii} \right) n_i^e + \sum_i \left( \varepsilon_i^h - \frac{1}{2} D_{ii} \right) n_i^h \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij} (n_i^e - n_i^h) (n_j^e - n_j^h) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \sigma} X_{ij} (n_{i,\sigma}^e n_{j,\sigma}^e + n_{i,\sigma}^h n_{j,\sigma}^h).
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Dabei steht  $n_i^e$  für  $n_{i\uparrow}^e + n_{i\downarrow}^e$  und entsprechend  $n_i^h$  für  $n_{i\uparrow}^h + n_{i\downarrow}^h$ . Anhand des in diesem Abschnitt aufgebauten diagonalen Hamilton-Operators  $H_{\text{diag}}$  (s. Gl. 3.1) werden im nächsten Abschnitt die Modell-Parameter näherungsweise daran angepasst.

### 3.2.2.2. Anpassen der Parameter

Dem experimentellen Spektrum liegen geladene Biexziton-Kaskaden zugrunde (s. Abb. 3.7). Anhand der Energiebilanzen der Konfigurationen A, B und C im linken Bild (s. Abb. 3.7) ausgedrückt durch den diagonalen Hamilton-Operator  $H_{\text{diag}}$  kann näherungsweise auf Linienabstände und Matrixelemente geschlossen werden.

So ergibt sich für die Konfiguration A eine Energie von  $E_A = 2E_s^X + \varepsilon_p^e - X_{sp}$ . Dies entspricht zweimal der s-Exzitonen Bindungsenergie  $E_s^X$ , der elektronischen Einteilchen Energie der p-Schale  $\varepsilon_p^e$  und der s-p-Austausch-Wechselwirkung  $X_{sp}$  zwischen Elektronen mit gleichem Spin. Entsprechend ergeben sich  $E_B = E_s^X + \varepsilon_p^e - X_{sp}$  und  $E_C = \varepsilon_p^e$ .

Eine solche Addition der einzelnen Energiebeiträge vernachlässigt Vielteilchen-Effekte. Einer davon ist die Biexziton-Bindungsenergie, die ausschließlich durch die Wechselwirkung mit allen anderen möglichen Konfigurationen der Ladungsträger der restlichen Zustände entsteht. Daher ist es notwendig diese Bindungsenergie mit zu berücksichtigen. Bei Beschränkung auf die s-und-p-Schale und die oben verwendeten Parameter ergibt sich eine Biexziton-Bindungsenergie von etwa  $\Delta \approx 2 \text{ meV}$  für das neutrale und etwa  $\Delta^{XX-} \approx 1.2 \text{ meV}$  für das geladene Biexziton. Wird diese Bindungsenergie in der Energiebilanz der Konfiguration A berücksichtigt, so ergibt sich  $E_A = 2E_s^X + \varepsilon_p^e - X_{sp} - \Delta^{XX-}$ . Damit erhält man die folgenden Emissionsenergien:

$$\begin{aligned} E_{XX-} &= E_A - E_B = E_s^X - \Delta^{XX-} \\ E_{X-*} &= E_B - E_C = E_s^X - X_{sp}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Daraus lässt sich der Linienabstand der beiden Linien  $E_{XX-}$  und  $E_{X-*}$  zu  $X_{sp} - \Delta^{XX-}$  ermitteln. Das Austausch-Integral  $X_{sp} \approx 4.9 \text{ meV}$  ist deutlich größer als die Biexzitonen-Bindungsenergie  $\Delta \approx 2 \text{ meV}$ . Dies erklärt die energetische Reihenfolge der Linien  $E_{X-*} < E_{XX-}$ :

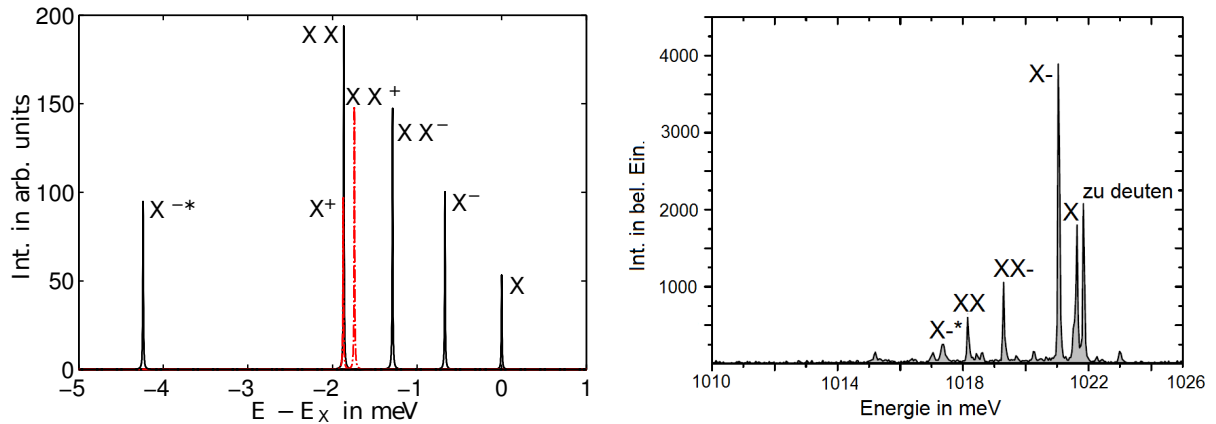
Diese Reihenfolge wird nicht nur durch die für InGaAs Quantenpunkte typischen Parameterwerte (s. Tab. 3.1) verursacht, sondern kann auch allgemein physikalisch begründet werden [63]: Dazu vergleicht man das Biexziton im Quantenpunkt mit dem Heitler-London-Ansatz für das Wasserstoff-Molekül. Im Wasserstoff-Molekül nehmen die beiden positiven Ladungen einen optimalen Abstand ein, sodass sich die negativen Ladungen dazwischen anordnen können. Im Quantenpunkt ist eine solche geometrische Flexibilität wegen der diskreten lokalisierten Zustände nicht möglich. Hier befinden sich die Ladungsträger in den niedrigsten zur Verfügung stehenden Zuständen. Für den Spezialfall gleicher Oszillatorlängen der Elektronen und Löcher ist das Exziton nicht nur lokal, sondern auch global elektrisch neutral, sodass die zwei Exzitonen überhaupt nicht miteinander wechselwirken. Dies würde zu einer verschwindenden Bindungsenergie des Exzitons führen. In Wirklichkeit sorgen Korrekturen von höheren Zustandskonfigurationen für eine Umordnung der Ladungen. Der energetische Preis dafür ist aber so hoch, dass diese Zustandsmischungen klein bleiben. Damit bleibt auch die Biexziton-Bindungsenergie klein. Dies ist ein typisches Ergebnis bei der Berechnung von Quantenpunkt-Spektren [62, 60, 63, 58]. Diese Analyse trifft nicht nur auf die Bindungsenergie des Exzitons, sondern sogar noch

mehr auf das geladene Biexziton zu, da das Auftreten des zusätzlichen Ladungsträgers die möglichen höheren Konfigurationen einschränkt und somit die Bindungsenergie stärker absenkt. Damit ist es kein Zufall, sondern vielmehr eine physikalische Tatsache, dass sich für die verwendeten Parameter (s. Tab. 3.1) sowie kleinen Variationen davon stets  $X_{sp} > \Delta > \Delta^{XX-}$  ergibt. Damit findet man die  $X^{*-}$ -Linie bei niedrigeren Energien als die  $XX^{-}$ -Linie (s. Abb. 3.6, 3.8).

Andersherum lassen sich aus dem experimentellen Spektrum die Energiedifferenzen der Linien ablesen und daraus Rückschlüsse auf die Matrixelemente und Bindungsenergien ziehen. Man erhält:

$$\begin{aligned}\Delta^{XX} &= E_s^X - E_s^{XX} \approx 3,44 \text{ meV} \\ E_{XX-} &\approx E_s^X - \Delta^{XX-} \Rightarrow \Delta^{XX-} \approx 2,26 \text{ meV} \\ E_{X^{*-}} &\approx E_s^X - X_{sp} \Rightarrow X_{sp} \approx 4,26 \text{ meV}.\end{aligned}\tag{3.3}$$

Im Bezug auf die in Gl. 3.3 ermittelten Werte, werden die Oszillatorlängen der Elektronen  $l_k^e$  und Löcher  $l_k^h$  im obigen Modell variiert, um das experimentelle Spektrum möglichst gut abzubilden. Damit die eingestellten Größen realistisch im Sinne der effektiven Massen  $m_e < m_h$  bleiben, muss nach wie vor  $\epsilon_i^e > \epsilon_i^h$  gelten und damit  $l_k^e < l_k^h$ . Dies liefert folgendes Spektrum:



(a) Spektrum mit angepassten Parametern:  $l_k^e = 5.3 \text{ nm}$  und  $l_k^e = 5.5 \text{ nm}$ . Die Energie wurde bzgl.  $E_x$  aufgetragen.

(b) Zum Vergleich das gemessene PL-Spektrum.

Abbildung 3.8.: Vergleich des theoretisch angepassten Emissionsspektrums (links) mit dem Experiment (rechts). Links sind die Linien zu  $X^+$  und  $XX^+$  erneut rot und gestrichelt eingezeichnet, um zu verdeutlichen, dass diese nicht zum gemessenen Spektrum rechts passen. Es bleibt weiterhin eine Linie zu deuten. Messung und Abbildung freundlicherweise von Jan Kettler (Universität Stuttgart) zur Verfügung gestellt.

Beim Anpassen der Oszillatorlängen fällt auf, dass die Werte für Elektronen  $l_k^e = 5.3 \text{ nm}$  und Löcher  $l_k^h = 5.5 \text{ nm}$  nahe beieinander liegen. Dieses Verhalten ist charakteristisch für einen großen Quantenpunkt [60, 64]. Ein typischer großer Quantenpunkt emittiert bei Wellenlängen  $> 1000 \text{ nm}$ . Im experimentellen Spektrum liegt die Emissionslinie des



s-Exzitions bei etwa  $1020 \text{ meV} \hat{=} 1213 \text{ nm}$ . Diese Übereinstimmung bestätigt, dass die Wahl nahezu gleicher Oszillatorlängen für Elektronen und Löcher sinnvoll ist.

Mit dem bisher durchgeführten Verfahren wurden das zugrunde liegende Modell auf das gemessene PL-Emissionsspektrum abgebildet und die Linienabstände bzgl. des experimentellen Spektrums optimiert. Was darin allerdings auffällt, ist eine bisher unerklärte relativ starke Linie, die etwa  $0,2 \text{ meV}$  über der Exzitonen-Linie liegt (s. Abb. 3.8 b). Um diese zu deuten, wird im Folgenden die Feinstruktur untersucht.

### 3.2.3. Feinstruktur

Bei den bisherigen Betrachtungen wurde von einem idealen Quantenpunkt ausgegangen, der eine kontinuierliche Zylindersymmetrie  $C_{\infty v}$  aufweist [65]. Diese Punktgruppe beinhaltet eine unendlichzählige Drehachse und unendlich viele vertikale Spiegelebenen. Tatsächlich wird diese kontinuierliche Zylindersymmetrie aber durch die unterliegende Struktur reduziert, da der Quantenpunkt selber aus einzelnen Atomen besteht. Dies führt zu einer  $C_{2v}$ -Symmetrie mit zweizähliger Drehachse. Solche Anisotropien im Kristall können experimentell gemessen werden und man erhält polarisationsabhängige Spektren. Durch Differenzbildung der Energien gleicher Linien bei unterschiedlicher Polarisation erhält man die Feinstruktur-Aufspaltung. In Abb. 3.9 sind die experimentell gemessenen Feinstruktur-Aufspaltungen der einzelnen Linien eingetragen.

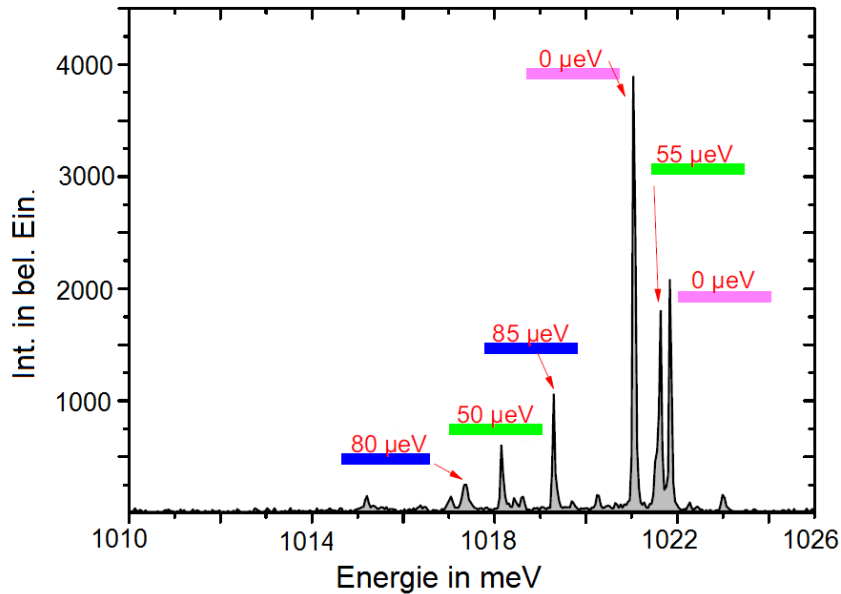


Abbildung 3.9.: Gemessene Feinstruktur-Aufspaltung der Linien. Man erkennt, dass drei verschiedene Blöcke von Feinstrukturen auftreten: Erstens eine Feinstruktur von  $0 \mu\text{eV}$  bei der Trion-Linie und der unbekannten Linie, zweitens etwa  $50 \mu\text{eV}$  bei der Exziton- und Biexziton-Linie und drittens etwa  $80 \mu\text{eV}$  bei den Linien des geladenen Biexziton-Komplexen  $XX^-$  und  $X^{*-}$ . Messung und Abbildung freundlicherweise von Jan Kettler (Universität Stuttgart) zur Verfügung gestellt.

Im Folgenden wird die Größe der Feinstruktur-Aufspaltung qualitativ abgeschätzt und



mit den Linien im Spektrum (s. Abb. 3.9) verglichen. Dabei orientiert sich die Analyse eng an [60]. Dazu wird ein effektiver Austausch-Hamilton-Operator aufgestellt. Um die Diskussion zu vereinfachen, wird der Begriff Pseudospin eingeführt: Pseudospin ist ein Trick, der es erlaubt Spin-  $3/2$  -Teilchen wie ein Spin-  $1/2$  -Teilchen zu behandeln. In diesem Fall haben die schweren Löcher einen Gesamtdrehimpuls von  $|\pm\frac{3}{2}\rangle$ . Hierfür wird mit Hilfe des Pseudospins folgende Zuordnung vorgenommen:  $|j_z\rangle = |\pm\frac{3}{2}\rangle \mapsto |i_z\rangle = |\mp\frac{1}{2}\rangle$ . Der Hamilton-Operator für die Feinstruktur einer Zinkblende-Struktur kann gruppentheoretisch mit Hilfe der Theorie der Invarianten aufgestellt werden und lautet [66]:

$$H^{ex} = \underbrace{2\Delta_0 I_z S_z}_{H_0} + \underbrace{\Delta_1 (I_x S_x - I_y S_y)}_{H_1} + \underbrace{\Delta_2 (I_x S_x + I_y S_y)}_{H_2}. \quad (3.4)$$

Dabei sind  $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$  der Gesamtspin der Elektronen und  $\vec{I} = (I_x, I_y, I_z)$  der Gesamtpseudospin der Löcher und  $\Delta_i$  Konstanten. Die zugehörigen Einteilchen-Operatoren sind  $s$  und  $i$ .

### 3.2.4. Exziton und Biexziton

Um die Matrixdarstellung von  $H^{ex}$  in der Basis der Projektion in z-Richtung des Gesamtdrehimpulses  $|F_z\rangle = |s_z\rangle + |j_z\rangle$  mit  $s_z \in \{\pm\frac{1}{2}\}$ ,  $j_z \in \{\pm\frac{3}{2}\}$  zu finden, müssen alle auftretenden Matrixelemente  $H_{ij}^{ex} = \langle F_z^i | H^{ex} | F_z^j \rangle$  berechnet werden. Im Pseudospin-Bild bedeutet dies  $|M_z\rangle = |s_z\rangle + |i_z\rangle$  mit  $s_z \in \{\pm\frac{1}{2}\}$ ,  $i_z \in \{\mp\frac{1}{2}\}$ . Dabei ist der Vorzeichenwechsel von  $|i_z\rangle = |\mp\frac{1}{2}\rangle$  gegenüber  $|j_z\rangle = |\pm\frac{3}{2}\rangle$  zu beachten. Die vier möglichen Exziton-Konfigurationen lauten damit:

$$\begin{aligned} |F_z\rangle &= |s_z, i_z\rangle \\ |-2\rangle &= |-1/2, +1/2\rangle \\ |-1\rangle &= |+1/2, +1/2\rangle \\ |+1\rangle &= |-1/2, -1/2\rangle \\ |+2\rangle &= |+1/2, -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Um die Matrixdarstellung von  $H^{ex}$  in der Basis von  $|F_z\rangle$  zu erhalten, müssen die auftretenden Matrixelemente  $H_{ij}^{ex} = \langle F_z^i | H^{ex} | F_z^j \rangle$  berechnet werden. Diese Berechnung der Matrixelemente ist im Anhang zu finden. Man erhält damit:

$$H^{ex} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Delta_0 & \Delta_1 & 0 & 0 \\ \Delta_1 & \Delta_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta_0 & \Delta_2 \\ 0 & 0 & \Delta_2 & -\Delta_0 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Dabei entsprechen die Zeilen und Spalten jeweils den Zuständen  $|F_z\rangle = |+1\rangle, |-1\rangle, +2\rangle$  sowie  $-2\rangle$  in dieser Reihenfolge. Damit hebt der Hamilton (s. Gl. 3.6) die vierfache Entartung des Exziton-Grundzustandes durch Aufspalten in zwei Doublet-Zustände auf. Hierbei lässt sich eine Aufspaltung von  $\pm\Delta_1/2$  für die ersten beiden Zustände  $|\pm 1\rangle$  und eine Aufspaltung von  $\pm\Delta_2/2$  für die letzten beiden Zustände  $|\pm 2\rangle$  ablesen. Die Zustände zu  $|\pm 1\rangle$  heißen helle Zustände, da diese an die Photonen mit Drehimpuls  $|\pm 1\rangle$  koppeln. Das heißt, sie können in ein Photon zerfallen oder durch Absorption eines Photons erzeugt

werden. Somit sind sie optisch aktiv und können experimentell gemessen werden. Da dies bei den Zuständen  $|\pm 2\rangle$  nicht der Fall ist, sind diese nicht optisch aktiv und man nennt sie dunkle Zustände. Eine Übersicht über die Aufspaltung des Exziton-Grundzustandes ist in Abb. 3.10 dargestellt:

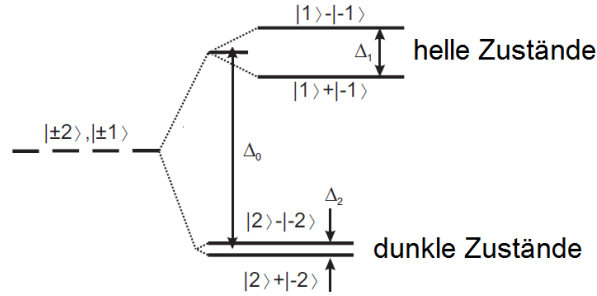


Abbildung 3.10.: Energieschema für den Exziton-Grundzustand im Quantenpunkt: Links ohne Austausch-Wechselwirkung, rechts mit Austausch-Wechselwirkung. Die Zustände  $|F_z\rangle$  bezeichnen die Gesamtdrehimpuls-Projektion in z-Richtung. (Abb. nach [60])

In Abb. 3.10 erkennt man, dass es zwei Möglichkeiten für die Besetzung eines hellen Exziton-Zustandes gibt, die um  $\Delta_1$  aufspalten. Beide können durch Emission eines Photons in den Vakuumzustand zerfallen. Die zugehörigen Linien im Spektrum sind dann um  $\Delta_1$  zueinander verschoben. Da die hellen Zustände aber eine Linearkombination der Zustände  $|\pm 1\rangle$  sind, ist das beim Zerfall ausgesendete Licht eine Superposition der beiden zirkular polarisierten Photonen und damit linear polarisiert.

Das Biexziton hat dementsprechend zwei unterschiedliche Zerfallswege in das Exziton. Der Biexziton Grundzustand entspricht  $|F_z = 0\rangle$  und somit einer closed-shell Konfiguration, da die s-Schale jeweils doppelt und damit voll besetzt ist. Der Endzustand des Übergangs führt jedoch zu unterschiedlichen Resonanzen im Spektrum, da das Biexziton in einen der beiden hellen Exziton-Zustände zerfallen kann. Folglich sieht man auch hier wie beim Exziton zwei linear polarisierte Linien im Spektrum, die zueinander um den Betrag der Feinstruktur verschoben sind. Da sowohl der Biexziton- als auch der Vakuum-Zustand die Konfiguration  $|F_z = 0\rangle$  aufweisen und der zweite am Zerfall beteiligte Zustand jeweils der Exziton-Zustand ist, sind die Feinstruktur-Aufspaltungen für das Exziton und das Biexziton in etwa gleich groß (s. Abb. 3.11).

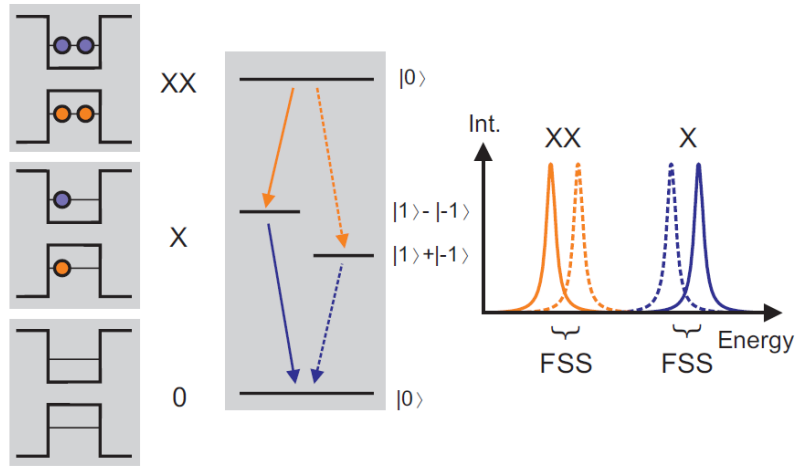


Abbildung 3.11.: Schema für den  $XX \rightarrow X \rightarrow 0$  Zerfall. Links: Besetzungen im Einteilchen-Bild. Mitte: Übergänge im Vielteilchen-Bild. Rechts: Zugehöriges Emissionsspektrum, dabei sind die Linien um die Feinstruktur-Aufspaltung (FSS) zueinander verschoben (Abb. nach [60]).

Dies erklärt das Messen einer ähnlichen Feinstruktur der Exziton- und Biexziton-Linie (s. Abb. 3.9). Dabei entspricht die Aufspaltung von ca.  $50 \mu\text{eV}$  in etwa der Aufspaltung  $\Delta_1$ .

Außerdem ist der in Abb. 3.11 skizzierte Prozess in der Quanten-Kryptografie von Bedeutung, wobei die Größe der Feinstruktur den beschränkenden Faktor darstellt [67]. Für die Quanten-Kryptografie benötigt man verschränkte Photonenpaare. Diese lassen sich aus Biexziton-Exziton-Zerfallskaskaden ( $|XX\rangle \rightarrow |X\rangle \rightarrow |0\rangle$ ) in InGaAs-Quantenpunkten erzeugen: Dazu wird zunächst der Biexziton-Zustand  $|XX\rangle$  angeregt. Dieser kann in einen der beiden fast entarteten Exziton-Zustände zerfallen. Beim Zerfall des Biexzitons in eines der beiden Exzitonen ( $|XX\rangle \rightarrow |X\rangle$ ) ist die Polarisation des ausgesendeten Photons durch den Spin dieses Exziton-Zustandes festgelegt. Beim Übergang ( $|X\rangle \rightarrow |0\rangle$ ) wird ein Photon mit entgegen gesetzter Polarisation ausgesendet. In einem idealen Quantenpunkt sind die beiden entarteten Exziton-Zustände ununterscheidbar, sodass die beiden Photonen verschränkt sind. Der Grad der Verschränkung ist dabei durch die Feinstruktur-Aufspaltung des Exziton-Zustandes beschränkt: Aufgrund der unterschiedlichen Spinkonfigurationen spaltet der Exziton-Zustand durch Asymmetrien im Kristall um den Betrag der Feinstruktur auf. Ist diese Aufspaltung zu groß, so sind die beiden Zerfallswege ununterscheidbar und die Photonen nicht mehr verschränkt.

### 3.2.5. Angeregtes Trion

Nun wird der zweite Feinstruktur-Block mit einer Aufspaltung von etwa  $80 \mu\text{eV}$  untersucht. Dazu wird das angeregte Trion  $X^{-*}$  analysiert. Dies erfolgt analog zu der Untersuchung des Exzitons, ist aber etwas komplizierter, weil hier nun drei Teilchen beteiligt sind. Die auftretenden Konfigurationen sind in Tab. 3.2 aufgelistet:

Einteilchen-Drehimpuls und Einteilchen-Spins $ j_z, s_z^1, s_z^2\rangle$	Gesamt- drehimpuls $ F_z\rangle$	Einteilchen-Pseudospin und Einteilchen Spins $ i_z, s_z^1, s_z^2\rangle$	Gesamt- pseudospin $ M_z\rangle$
$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{5}{2}\rangle_T$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_T$
$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{5}{2}\rangle_T$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}\rangle_T$
$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}\rangle_T$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_T$
$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle -  \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}\rangle_S$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle -  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_S$

Tabelle 3.2.: Vier der acht Zustände des angeregten Trions in den verschiedenen Notationen. Die restlichen vier Zustände erhält man durch Multiplizieren der dargestellten Zustände mit -1. In den Zuständen mit den drei Einteilchen-Quantenzahlen stellt die erste jeweils den Loch-Zustand und die letzten beiden jeweils die beiden Elektronen-Zustände dar. Die drei Triplett-Zustände sind mit T und der Singlett-Zustand mit S indiziert.

Da die Austauschwechselwirkung zwischen zwei identischen Teilchen stärker ist als zwischen verschiedenen Teilchen, wird die Wechselwirkung näherungsweise in zwei Teile zerlegt:

Zuerst die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und anschließend die Wechselwirkung dieses Komplexes mit dem Loch. Dazu werden die zwei Einteilchen-Spins  $s_z^1$  und  $s_z^2$  zu einem Gesamtspin  $S$  zusammengefasst. Die Spin-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen gibt die bekannte Singlett-Triplett-Struktur. Diese kommt wie folgt zustande: Ein System mit Gesamtspin  $S$  hat die Spinmultiplizität  $2S + 1$  und damit diese Anzahl linear unabhängiger Zustände zu dem selben Eigenwert  $S$ . Diese unterscheiden sich aber in der Orientierung des Spins bzgl. einer ausgezeichneten Achse, die im Folgenden ohne Einschränkung die z-Achse sein wird. Bei zwei Elektronen können sich die beiden halbzahligen Einzel spins  $s_z^1 = \pm 1/2$  und  $s_z^2 = \pm 1/2$  entweder zum Gesamtspin  $S = 0$  addieren, dann beträgt die Multiplizität  $2 \cdot 0 + 1 = 1$  und man erhält einen Singlett-Zustand  $|S, S_z\rangle = |0, 0\rangle$ . Die andere Möglichkeit ist, dass sich  $s_z^1 = \pm 1/2$  und  $s_z^2 = \pm 1/2$  zum Gesamtspin  $S = 1$  addieren, dann beträgt die Multiplizität  $2 \cdot 1 + 1 = 3$  und man erhält drei linear unabhängige Triplet-Zustände  $|1, \pm 1\rangle$  sowie  $|1, 0\rangle$ .

Um die Matrixdarstellung von  $H^{ex}$  in der Basis von  $|F_z\rangle$  zu erhalten, müssen die auftretenden Matrixelemente  $H_{ij}^{ex} = \langle F_z^i | H^{ex} | F_z^j \rangle$  berechnet werden. Diese Berechnung der Matrixelemente ist im Anhang zu finden. Man erhält damit:

$$H^{ex} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_1/\sqrt{2} & \Delta_2/\sqrt{2} \\ \Delta_1/\sqrt{2} & \Delta_0 & 0 \\ \Delta_2/\sqrt{2} & 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Dann entsprechen die Zeilen und Spalten jeweils den Zuständen  $|F_z\rangle = |\mp \frac{3}{2}\rangle, |\pm \frac{1}{2}\rangle$  sowie  $|\mp \frac{5}{2}\rangle$  in dieser Reihenfolge. Diese werden im Folgenden vereinfacht mit  $|\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle$  und  $|\frac{5}{2}\rangle$  bezeichnet. Die Eigenwerte der Matrix (s. Gl. 3.7) haben eine komplexe Struktur. Es wurde allerdings gezeigt, dass  $\Delta_2$  üblicherweise kleine Werte annimmt [68]. Für InAs Quantenpunkte liegen typische Werte zwischen 0 und  $0.5 \Delta_1$  [69]. Somit ist es sinnvoll, in der Matrix  $\Delta_2 \approx 0$  zu nähern. Dann erhält man für den Eigenraum zu  $|F_z\rangle = |\frac{5}{2}\rangle$  den

Eigenwert  $\lambda_{5/2}$  sowie für den Eigenraum zu  $|F_z\rangle = |\frac{1}{2}\rangle$  und  $|F_z\rangle = |\frac{3}{2}\rangle$  die zwei Eigenwerte  $\lambda_{1/2, 3/2}$ :

$$\begin{aligned}\lambda_{5/2} &= -\Delta_0 \\ \lambda_{1/2, 3/2} &= \frac{1}{2} \left( \Delta_0 \pm \Delta_1 \cdot \sqrt{2 + \frac{\Delta_0^2}{\Delta_1^2}} \right).\end{aligned}\quad (3.8)$$

Der Übergang vom Zustand  $XX^-$  mit der Konfiguration  $|\pm\frac{1}{2}\rangle$  nach  $|\pm\frac{5}{2}\rangle$  ist optisch nicht aktiv, da sich der Gesamtdrehimpuls um  $\pm 2$  ändert. Somit werden zum Vergleich mit dem Experiment (s. Abb. 3.9) nur die Zustände  $|\frac{1}{2}\rangle$  und  $|\frac{3}{2}\rangle$  betrachtet. Diese liefern eine Aufspaltung  $\pm \left| \Delta_1 \cdot \sqrt{2 + \frac{\Delta_0^2}{\Delta_1^2}} \right|$ . Für  $\Delta_0 > 0$  und  $\Delta_1 \neq 0$  ist  $\left| \Delta_1 \cdot \sqrt{2 + \frac{\Delta_0^2}{\Delta_1^2}} \right| > |\Delta_1|$ . Damit ist die Feinstruktur-Aufspaltung der  $X^{*-}$ -Linie stets größer als die Aufspaltung der Exziton- bzw. Biexziton-Linie. Durch eine Messung von etwa  $80 \mu\text{eV}$  bei der  $X^{*-}$ -Linie gegenüber etwa  $50 \mu\text{eV}$  bei der Exziton- und Biexziton-Linie wurde dieser Zusammenhang experimentell bestätigt (s. Abb. 3.9).

### 3.2.5.1. Trion-Linie

Der Trion-Zustand besteht aus einem Elektron-Loch-Paar und einem zusätzlichen Ladungsträger im Grundzustand. Da die beiden Ladungsträger mit gleichem Vorzeichen eine geschlossene Schale bilden, ist ihr Gesamtspin Null aufgrund des Pauli-Prinzips. Der Gesamtspin des Trions ist somit gleich dem Spin des einzelnen Ladungsträgers und damit halbzahlilig. Für ein negativ geladenes Trion  $X^-$  erhält man folglich den Gesamtdrehimpulszustand  $|F_z\rangle = |\pm\frac{3}{2}\rangle$  mit dem Gesamtdrehimpuls des Schwerlochs. Nach Rekombination des Elektron-Loch-Paares bleibt ein einzelnes Elektron im Gesamtdrehimpulszustand  $|F_z\rangle = |\pm\frac{1}{2}\rangle$  übrig. Nach Kramers Theorem sind Zustände mit halbzahliligem Gesamtspin in elektrischen Feldern mindestens zweifach entartet [70]. Somit spalten die Übergänge  $|\pm\frac{3}{2}\rangle \rightarrow |\pm\frac{1}{2}\rangle$  nicht auf, da jeweils Anfangs- und Endkonfiguration energetisch entartet sind. Folglich spaltet die  $X^-$ -Linie nicht auf (s. Abb. 3.9).

Da bei der bisher ungedeuteten Linie ebenso wie der  $X^-$ -Linie keine Feinstruktur-Aufspaltung gemessen wurde, wird im nächsten Abschnitt der Vermutung nachgegangen, dass es sich bei der unerklärten Linie um eine  $X^+$ -Linie handelt.

### 3.2.6. Lage der positiven Trion-Linie

Mit dem bisher durchgeführten Verfahren wurden die aus den CI-Rechnungen erhaltenen Emissionslinien mit dem gemessenen PL-Emissionsspektrum verglichen und durch geeignete Parameterwahl die Linienabstände bzgl. des experimentellen Spektrums optimiert. Was dabei allerdings auffällt, ist eine bisher unerklärte relativ starke Linie, die etwa  $0,2 \text{ meV}$  über der Exziton-Linie liegt (s. Abb. 3.8 b) und keine Feinstruktur-Aufspaltung aufweist (s. Abb. 3.9). Die große Intensität und verschwindende Aufspaltung lassen zunächst eine Trion-Linie vermuten. Da die negativ geladene Trion-Linie  $X^-$  bereits im Spektrum identifiziert wurde, wird der Vermutung einer positiv geladenen Trion-Linie  $X^+$  nachgegangen. Dazu wurden verschiedene Oszillatorlängen für Elektronen und Löcher modelliert und deren Einfluss auf die energetische Lage der Linien untersucht.

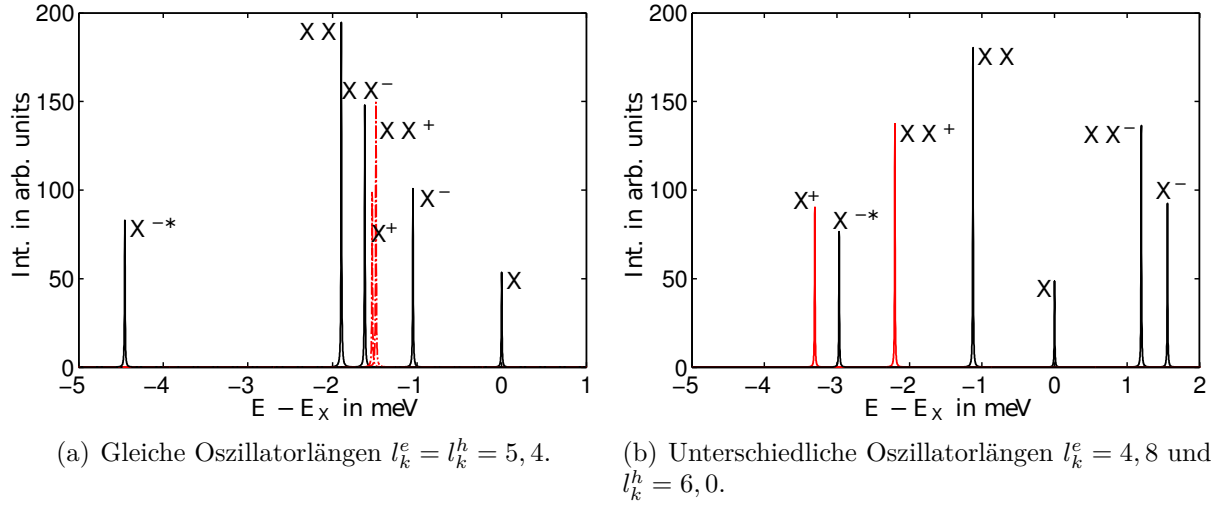


Abbildung 3.12.: Man erkennt, dass bei gleichen Oszillatorlängen der Elektronen und Löcher (links) die geladenen Linien zwischen den neutralen  $X$ - und  $XX$ -Linien liegen. Mit größer werdendem Unterschied in den Oszillatorlängen (rechts) 'wandern' die Linien positiver und negativer Ladung im Spektrum entgegengesetzt nach außen.

Man erkennt in Abb. 3.12, dass sich die beiden Trion-Linien  $X^-$  und  $X^+$  entweder bei ähnlichen Oszillatorlängen innerhalb der beiden neutralen  $X$  und  $XX$  Linien befinden (s. Abb. 3.12 a) oder bei größerem Unterschied in entgegengesetzte Richtungen des Spektrums nach außen 'wandern' (s. Abb. 3.12 b). Ein solches Verhalten stimmt mit Untersuchungen in [62] überein. Zudem ist diese Reihenfolge der Linien aus elektrostatischer Sicht im Bezug auf Ladungsneutralität plausibel, entspricht aber nicht dem Verhalten der beiden Linien im experimentellen Spektrum. Trotz vieler Parametereinstellungen ist es nicht gelungen, die beiden geladenen Trion-Linien  $X^-$  und  $X^+$  auf einer Seite des Spektrums um das Exziton herum anzuordnen, wie es in der PL-Messung der Fall zu sein scheint (s. Abb. 3.8 b).

Zusammenfassend kann man bisher über die unerklärte Linie sagen, dass diese relativ stark ist, energetisch knapp oberhalb der Exziton-Linie gemessen wurde und keine Feinstruktur-Aufspaltung zeigt. Diese Indizien für eine  $X^+$ -Linie stehen im Gegensatz zu den bisher theoretisch ermittelten Spektren, in denen die geladenen Trion-Linien entweder paarweise innerhalb der beiden neutralen  $X$ - und  $XX$ -Linien auftreten oder an entgegengesetzten Enden des Spektrums zu finden sind. Um diesem scheinbaren Widerspruch nachzugehen, wird das Modell erweitert und der Einfluss der d-Schale untersucht.

### 3.2.7. Einfluss der d-Schale

Um die Existenz der positiven Trion-Linie  $X^+$  weiter zu prüfen, wurde der Einfluss der d-Schale auf die Lage der Linien untersucht (s. Abb. 3.13), da hierbei eine zusätzliche Renormierung und damit mögliche Umordnung der Linien zu erwarten ist. Eine Liste mit den Überlapps der hierfür verwendeten Wellenfunktionen findet sich im Anhang (s. Tab. A.3).

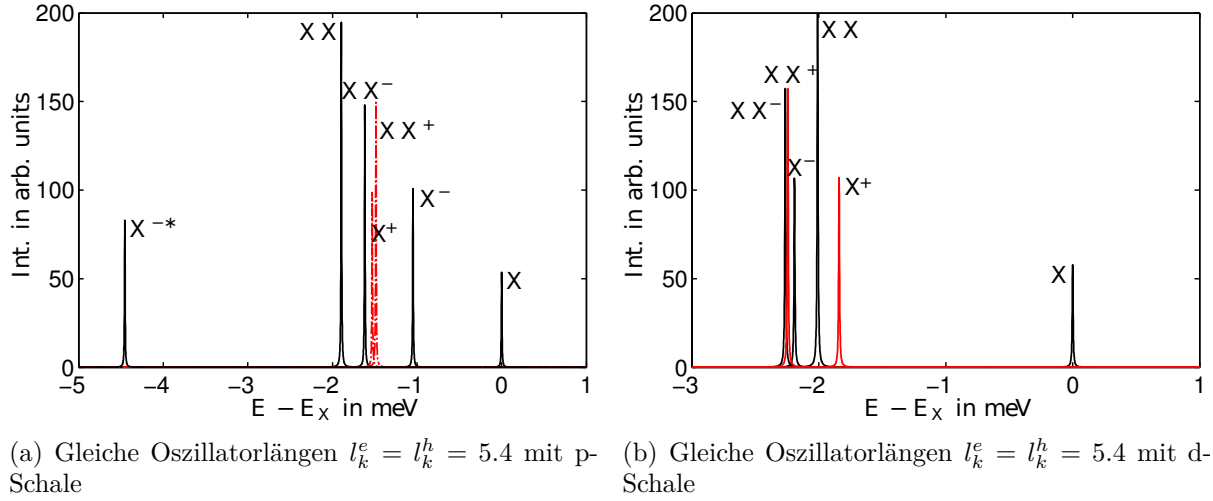
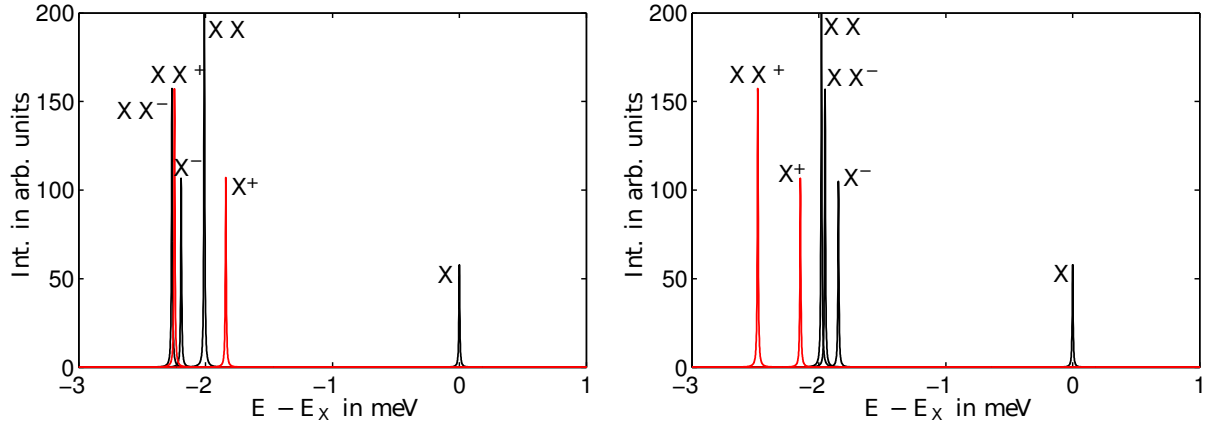


Abbildung 3.13.: Einfluss der d-Schale: Renormierung der Linien zu niedrigeren Energien (rechts). Die Energie wurde jeweils bzgl.  $E_x$  aufgetragen. Man erkennt, dass die neutralen Linien ( $X$  und  $XX$ ) am schwächsten abgesenkt werden. Damit 'schiebt' das Exziton die geladenen Linien zum energetisch tieferliegenden Biexziton.

In Abb. 3.13 erkennt man, dass bei Berücksichtigung der d-Schale die Emissionslinien zu niedrigeren Energien renormiert werden. Eine solche Renormierung durch den Einfluss der d-Schale wurde bereits an ähnlichen Quantenpunkten theoretisch vorhergesagt [62]. Auffällig ist, dass die neutralen Linien ( $X$  und  $XX$ ) nur wenig abgesenkt werden, wogegen die geladenen stärker abgesenkt werden und als Block im Spektrum zu finden sind. Dieses Verhalten stimmt mit Ergebnissen aus der Literatur überein [71]. Zusätzlich wurde der Einfluss der d-Schale für verschiedene Oszillatorlängen untersucht. Ein Spektrum mit d-Schale und den oben angepassten Oszillatorlängen ist in Abb. 3.14 dargestellt:



(a) Gleiche Oszillatorlängen:  $l_k^e = l_k^h = 5.4$  mit d-Schale

(b) Angepasste Oszillatorlängen:  $l_k^e = 5.3$  und  $l_k^h = 5.5$  mit d-Schale

Abbildung 3.14.: Einfluss der d-Schale: Links: Gleiche Oszillatorlängen, rechts: Verschiedene Oszillatorlängen. Die Energie wurde bzgl.  $E_x$  aufgetragen. Man erkennt, dass in beiden Fällen die neutralen Linien ( $X$  und  $XX$ ) am schwächsten abgesenkt werden und das Exziton die geladenen Linien zum Biexziton 'schiebt'. Auffällig ist, dass die Linien der positiv und negativ geladenen Trionen ihre Reihenfolge um das Biexziton tauschen für verschiedene Oszillatorlängen.

Man erkennt in Abb. 3.14, dass in beiden Fällen die Linien zu niedrigeren Energien renormiert werden. Auffällig ist, dass die Linien der positiv und negativ geladenen Trionen für verschiedene Oszillatorlängen ihre Reihenfolge um das Biexziton tauschen. Dieses Verhalten stimmt mit Berechnungen von [71] überein.

Die Tatsache, dass die geladenen Linien um die Exziton-Linie energetisch hin zur Biexziton-Linie abgesenkt werden, lässt darauf schließen, dass in dem untersuchten Quantenpunkt keine d-Schale vorliegt, da im PL-Spektrum einige Linien direkt neben der Exziton-Linie und sogar darüber gemessen wurden.

Da selbst unter Berücksichtigung der d-Schale (s. Abb. 3.13 3.14) die theoretischen Ergebnisse eindeutig gegen eine  $X^+$ -Linie sprechen, scheidet die positive Trion-Linie  $X^+$  als möglicher Kandidat für die Erklärung der zu deutenden Linie aus.

### 3.2.8. Identifizierung der fehlenden Linie

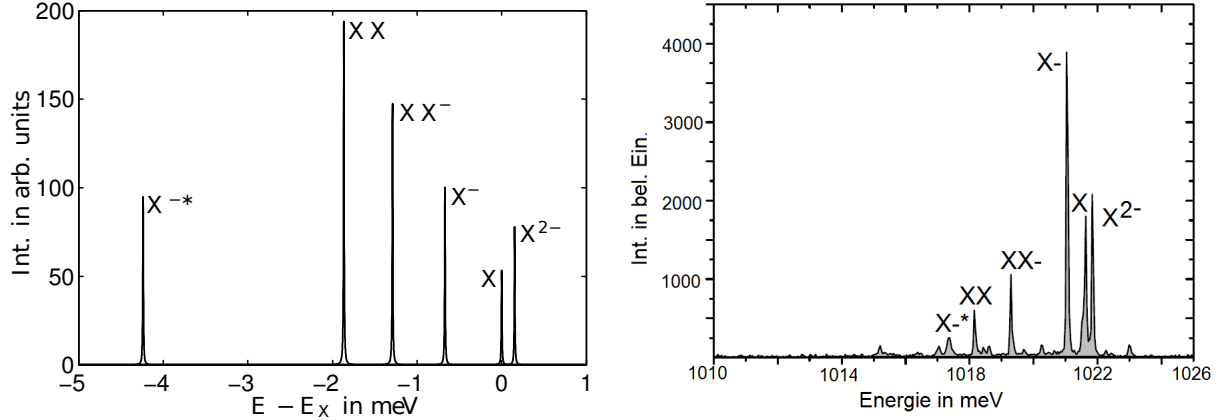
Da die positive Trion-Linie  $X^+$  als möglicher Kandidat ausscheidet, bleiben nicht mehr viele Möglichkeiten aus dem Exziton- bzw. Biexziton-Komplex. Da im Quantenpunkt scheinbar negative Ladungen bevorzugt auftreten, liegt als nächstes die Vermutung einer doppelt geladenen  $X^{2-}$  Linie nahe.

Die theoretische Analyse der Zustände eines doppelt negativ geladenen Exzitons ließe sich analog zur obigen Diskussion des effektiven Austausch-Hamilton-Operators (s. Gl. 3.4) durchführen, allerdings ist die Mischung der beteiligten Zustände relativ komplex und es ergibt sich nicht zwingend eine Feinstruktur-Aufspaltung von Null. Daher wird hier auf eine detaillierte Analyse verzichtet. Es sei aber erwähnt, dass bereits für doppelt geladene Exzitonen eine verschwindende Feinstruktur gemessen wurde [64]. Eine Unter-



suchung von M. Ediger et al. [72] zeigt, dass die unpolarisierten Linien beim doppelt geladenen Exziton die stärksten sind. Dies begründet die Plausibilität der möglicherweise verschwindenden Feinstruktur-Aufspaltung der  $X^{2-}$ -Linie.

Zur Berechnung des Spektrums wird aufgrund der bisherigen Erkenntnisse von den Oszillatorlängen  $l_k^e = 5.3 \text{ nm}$  und  $l_k^e = 5.5 \text{ nm}$  sowie einer p-Schale ausgegangen. In Abb. 3.15 ist ein Spektrum mit  $X^{2-}$  Linie dargestellt.



(a) Spektrum mit angepassten Oszillatorlängen:  $l_k^e = 5.3 \text{ nm}$  und  $l_k^e = 5.5 \text{ nm}$  sowie  $X^{2-}$  Linie. Die Energie wurde bzgl.  $E_x$  aufgetragen.

(b) Zum Vergleich das gemessene PI-Spektrum.

Abbildung 3.15.: Vergleich des berechneten Emissionsspektrum (links) mit dem Experiment (rechts). Man erkennt eine relativ gute Übereinstimmung im Bezug auf die Zuordnung und Abstände der Linien. Messung und Abbildung freundlicherweise von Jan Kettler (Universität Stuttgart) zur Verfügung gestellt.

In Abb. 3.15 erkennt man eine relativ gute Übereinstimmung von Experiment und Theorie im Bezug auf die Zuordnung und Abstände der Linien. Somit wird die bisher zu deutende Linie im Emissionsspektrum einem doppelt negativ geladenen Exziton  $X^{2-}$  zugeschrieben. Es fällt allerdings auf, dass die Bindungsenergien des Biexzitons  $XX$  sowie des geladenen Biexzitons  $XX^{-}$  nicht vollkommen mit dem Experiment übereinstimmen. Diese Diskrepanzen sind auf die bei der Berechnung gemachten Annahmen und durchgeführten Näherungen zurückzuführen. Dennoch lässt sich insgesamt eine gute Übereinstimmung von Abb. 3.15 (a) und (b) erkennen.

## 4. Zusammenfassung

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde der Begriff Quantenpunkt und die damit zusammenhängenden Eigenschaften erklärt. Danach wurden experimentelle Methoden zu dessen Herstellung kurz beschrieben. Anhand der Beschaffenheit und Symmetrie des Quantenpunktes wurde ein theoretisches Modell entwickelt, um die Einteilchen-Zustände im Quantenpunkt zu beschreiben.

Anschließend wurde mit der Methode der exakten Diagonalisierung eine detaillierte Beschreibung der Ladungsträger im Quantenpunkt vorgenommen. Mit Fermis Goldener Regel wurden mit den aus der Diagonalisierung gewonnen Vielteilchen-Zuständen optische Spektren berechnet. Mittels dieser Spektren wurden ein an der Universität Stuttgart hergestellter Quantenpunkt theoretisch modelliert und die Linien dem experimentell gemessenen Spektrum zugeordnet:

Dazu wurden das in Stuttgart aufgenommene Leistungsspektrum sowie Kreuzkorrelationsmessungen verwendet, um die auftretenden Zerfallskaskaden zu identifizieren und damit die passenden Linien zu modellieren.

Hierbei war zunächst eine wesentliche Linie unerklärt. Diese liegt in der Nähe des Exzitons und zeigt eine verschwindende Feinstruktur. Obwohl dies zunächst stark auf eine Trion-Linie hindeutete, wurde gezeigt, dass diese Linie dem Zerfall eines doppelt geladenen Exzitons entspricht. Damit wurden alle wesentlichen Linien im Experiment je einem Übergang zugeordnet und theoretisch erklärt. Dabei stimmen die Abstände der modellierten Linien mit denen der gemessenen Linien auf bis etwa  $\pm 1$  meV überein.

Auffallend war, dass die gemessenen Linien drei Blöcke von Feinstruktur-Aufspaltungen zeigen:  $0 \mu\text{eV}$ ,  $50 \mu\text{eV}$  und  $80 \mu\text{eV}$ . Um diese Messungen zu deuten, wurde gruppentheoretisch ein effektiver Austausch-Hamilton-Operator aufgestellt und damit die Feinstruktur-Aufspaltungen der einzelnen Linien qualitativ abgeschätzt. Anhand der Spinkonfigurationen wurde somit gezeigt, dass die gemessenen Feinstruktur-Aufspaltungen kein Zufall waren, sondern, dass sowohl das paarweise Auftreten als auch die energetische Reihenfolge physikalisch zu begründen sind. Einzig bei der gemessenen Aufspaltung von  $0 \mu\text{eV}$  der doppelt geladenen Exziton-Linie ergibt sich theoretisch nicht zwingend Null und es muss auf Literatur zu Experimenten verwiesen werden.

## 5. Ausblick

Um die Bindungsenergien des Biexzitons  $XX$  sowie des geladenen Biexzitons  $XX^-$  genauer bestimmen zu können, ist eine detailliertere Beschreibung der Wellenfunktionen nötig. Hierzu könnte beispielsweise die Annahme des zylindersymmetrischen Quantenpunktes fallen gelassen und die Wellenfunktionen mit Hilfe einer rechenintensiveren Tight-Binding-Rechnung in atomarer Auflösung bestimmt werden. Dies hätte zwei wesentliche Effekte zur Folge: Zum einen treten aufgrund der Symmetriebrechung nun zusätzlich Austauschterme der Form  $V_{ijkl}^{eh eh}$  und  $V_{ijkl}^{he he}$  auf, die allerdings betragsmäßig sehr viel kleiner als die übrigen Matrixelemente sind. Diese Austauschterme sorgen für eine Aufspaltung der beiden Zustände in der p-Schale, was einige Doppelpeaks im Spektrum erklären könnte. Eine solche Aufspaltung kann bereits qualitativ mit dem zugrundeliegenden Oszillatormodell erzeugt werden, indem die Oszillatorlänge für eine der beiden p-Schalen minimal verändert wird. Der andere zusätzliche wesentliche Effekt einer Tight-Binding-Rechnung ist eine Bandmischung von lh- und hh-Band. Dies könnte man nicht mit dem zugrundeliegenden Oszillatormodell erzeugen. Zusammenfassend würde man demnach erwarten, dass eine mögliche Tight-Binding-Rechnung zwar die Reihenfolge und energetische Lage der Linien nicht prinzipiell verändern, aber den relativen Abstand der einzelnen Linien zur Exziton-Linie anpassen und insgesamt eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment liefern wird.



# Literaturverzeichnis

- [1] S. Fafard, Z. R. Wasilewski, C. Ni. Allen, D. Picard, M. Spanner, J. P. McCaffrey, and P. G. Piva. Manipulating the energy levels of semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, 59:15368–15373, Jun 1999.
- [2] K. Jacobi. Atomic structure of inas quantum dots on gaas. *Progress in Surface Science*, 71(5-8).
- [3] J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures. *Reviews of Modern Physics*, 76:725–783, 2004.
- [4] Y. Arakawa and H. Sakaki. Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current. *Appl. Phys. Lett.*, 40:939, 1982.
- [5] M. Asada, Y. Miyamoto, and Y. Suematsu. Gain and the threshold of three-dimensional quantum-box lasers. *IEEE J. Quantum Electron*, 22, 1986.
- [6] Weng W. Chow and Frank Jahnke. On the physics of semiconductor quantum dots for applications in lasers and quantum optics. *Progress in Quantum Electronics*, 37(3):109 – 184, 2013.
- [7] F. Jahnke. *Quantum optics with semiconductor nanostructures*. Woodhead, 2012.
- [8] P. Michler. *Single Quantum Dots - Fundamentals, Applications and New Concepts*. Springer, 2003.
- [9] P. Michler. *Single Semiconductor Quantum Dots*. Springer, 2009.
- [10] Z. M. Wang. *Self-Assembled Quantum Dots. Auflage: 2008*. Springer, 2007.
- [11] P. Schnabel. Lichtwellenleiter (lwl / glasfaser). *Elektronik-Kompendium.de*, 1997.
- [12] L. Gasca. From 0 to 1: The future of optical-wavelength bands. [www.broadbandproperties.com](http://www.broadbandproperties.com), 2008.
- [13] M. Nomura, N. Kumagai, S. Iwamoto, Y. Ota, and Y. Arakawa. Laser oscillation in a strongly coupled single-quantum-dot–nanocavity system. *Nature Physics*, 6(4), 2010.
- [14] C. H. Bennett and G. Brassard. Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. *Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing*, 1984.
- [15] C. Schneider. *Konzepte zur skalierbaren Realisierung von effizienten, halbleiterbasierten Einzelphotonenquelle*. PhD thesis, Universität Würzburg, 2011.

- [16] Ibach H. and Lüth H. *Einführung in die Festkörperphysik*. Springer, Berlin, 2002.
- [17] D. Mourad. *Empirische Tight-Binding-Modellierung geordneter und ungeordneter Halbleiterstrukturen*. PhD thesis, Universität Bremen, 2010.
- [18] N. W. Ashcroft and D. N. Mermin. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, München, 2007.
- [19] M. Born and R. Oppenheimer. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 1927.
- [20] G. Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Phys. Rev.*, 100:580–586, Oct 1955.
- [21] R. F. Schmidt. *Elektrische und optische Untersuchungen an einem einzelnen InAs-Quantenpunkt mit Hilfe ionenstrahlimplantierter Mikro-LEDs*. PhD thesis, Universität Nürnberg, 2006.
- [22] A. Steinhoff. *Mikroskopische Beschreibung des Ladungsträgereinfangs in Halbleiter-Heterostrukturen durch Elektron-Phonon-Wechselwirkung*. PhD thesis, Universität Bremen, 2011.
- [23] P. Schafmeister. *Herstellung und Charakterisierung von InAs-Quantenpunkten auf implantationsdotiertem GaAs (001)*. PhD thesis, Ruhr-Universität Bochum, 2002.
- [24] F. C. Frank and J. H. van der Merwe. Proceedings of the royal society of london, series a 198, 1946.
- [25] I. N. Stranski and L. von Krastanov. Akad. wiss. let. mainz math. natur k1 iib 146, 1939.
- [26] K. Eberl. Quantum-dot lasers. *Physics World*, page 47–50, 1997.
- [27] S. Anders, C. S. Kim, B. Klein, Mark W. Keller, R. P. Mirin, and A. G. Norman. Bimodal size distribution of self-assembled  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum dots. *Phys. Rev. B*, 66:125309, Sep 2002.
- [28] A. Steinhoff. *Korrelationseffekte angeregter Ladungsträger in Halbleiter-Nanostrukturen am Beispiel von InGaAs-Quantenpunkten und atomaren  $\text{MoS}_2$ -Monolagen*. PhD thesis, Universität Bremen, 2014.
- [29] H. Haug et al and editor W. Martienssen. *Semiconductor quantum structures. In Landolt-Börnstein, New Series III, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, volume 34C. Springer, Heidelberg.
- [30] D. Braam. *Photolumineszenz-Spektroskopie an einzelnen Nanopartikeln*. PhD thesis, Universität Duisburg-Essen, 2011.
- [31] A. Schliwa. *Electronic Properties of Self-Organized Quantum Dots*. PhD thesis, TU Berlin, 2007.

- [32] M. Florian. *Licht-Materie-Wechselwirkung in Halbleiter-Nanostrukturen zur Erzeugung nichtklassischen Lichts und stimulierter Emission*. PhD thesis, Universität Bremen, 2014.
- [33] Y. H. Huo, B. J. Witek, S. Kumar, J. R. Cardenas, J. X. Zhang, N. Akopian, R Singh, E. Zallo, R. Grifone, D. Kriegner, R. Trotta, F. Ding, J. Stangl, V. Zwiller, G. Bester, A. Rastelli, and O. G. Schmidt. A light-hole exciton in a quantum dot. *Nat Phys*, 10, 2014.
- [34] S. Schulz. *Electronic and Optical Properties of Quantum Dots: A Tight-Binding Approach*. Sierke Verlag, Göttingen, 2007.
- [35] J. Li and L.-W. Wang. First principle study of core/shell structure quantum dots. *Applied Physics Letters* 84, 2004.
- [36] Lin-Wang Wang and Jingbo Li. First-principles thousand-atom quantum dot calculations. *Phys. Rev. B*, 69:153302, Apr 2004.
- [37] Aaron Puzder, A. J. Williamson, François Gygi, and Galli Giulia. Self-healing of cdse nanocrystals: First-principles calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 92.
- [38] E. O. Kane, W. (Hrsg.) Paul, and T. S. (Hrsg.) Moss. Energy band theory. Handbook on Semiconductors: Band Theory and Transport Properties, 1982.
- [39] Andrei Schliwa, Momme Winkelkemper, and Dieter Bimberg. Impact of size, shape, and composition on piezoelectric effects and electronic properties of In(Ga)As/GaAs quantum dots. *Phys. Rev. B*, 76.
- [40] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k·p theory. *Phys. Rev. B*, 59:5688–5701, Feb 1999.
- [41] M. G. Burt. An exact formulation of the envelope function method for the determination of electronic states in semiconductor microstructures. *Semiconductor Science and Technology*, 2, 1987.
- [42] M. G. Burt. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4, 1992.
- [43] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg. Inas/gaas pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. *Phys. Rev. B*, 52:11969–11981, Oct 1995.
- [44] W. Sheng, S.-J. Cheng, and P. Hawrylak. Multiband theory of multi-exciton complexes in self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 71, 2005.
- [45] Arkadiusz Wojs, Pawel Hawrylak, Simon Fafard, and Lucjan Jacak. Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 54:5604–5608, Aug 1996.
- [46] N. Baer, S. Schulz, P. Gartner, S. Schumacher, G. Czycholl, and F. Jahnke. Influence of symmetry and coulomb correlation effects on the optical properties of nitride quantum dots. *Phys. Rev. B*, 76:075310, Aug 2007.

- [47] E. Goldmann, S. Barthel, M. Florian, K. Schuh, and F. Jahnke. Excitonic fine-structure splitting in telecom-wavelength inas/gaas quantum dots: Statistical distribution and height-dependence. *Applied Physics Letters*, 103.
- [48] W. Jaskólski, M. Zielinski, G. W. Bryant, and J. Aizpurua. Strain effects on the electronic structure of strongly coupled self-assembled inas/gaas quantum dots: Tight-binding approach. *Physical Review B*, 74, 2006.
- [49] S. Schulz and G. Czycholl. Tight-binding model for semiconductor nanostructures. *Physical Review B*, 72, 2005.
- [50] Weidong Sheng and Pawel Hawrylak. Spin polarization in self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 73:125331, Mar 2006.
- [51] Lin-Wang Wang and Alex Zunger. Linear combination of bulk bands method for large-scale electronic structure calculations on strained nanostructures. *Phys. Rev. B*, 59:15806–15818, Jun 1999.
- [52] Gabriel Bester and Alex Zunger. Cylindrically shaped zinc-blende semiconductor quantum dots do not have cylindrical symmetry: atomistic symmetry, atomic relaxation, and piezoelectric effects. *Phys. Rev. B*, 71:045318, Jan 2005.
- [53] H. Drexler, D. Leonard, W. Hansen, J. P. Kotthaus, and P. M. Petroff. Spectroscopy of quantum levels in charge-tunable ingaas quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 73:2252–2255, Oct 1994.
- [54] X. Z. Liao, J. Zou, X. F. Duan, D. J. H. Cockayne, R. Leon, and C. Lobo. Transmission-electron microscopy study of the shape of buried  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum dots. *Phys. Rev. B*, 58:R4235–R4237, Aug 1998.
- [55] G. Czycholl. *Von Den Klassischen Modellen Zu Modernen Forschungsthemen*. Springer, 2004.
- [56] H. Haug und S.W. Koch. *Quantum Theory of Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scintific, Singapur, 1993.
- [57] Arkadiusz Wojs, Pawel Hawrylak, Simon Fafard, and Lucjan Jacak. Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 54:5604–5608, Aug 1996.
- [58] N. Baer. *Optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantenpunkten*. PhD thesis, Universität Bremen, 2003.
- [59] Pawel Hawrylak. Excitonic artificial atoms: Engineering optical properties of quantum dots. *Phys. Rev. B*, 60:5597–5608, Aug 1999.
- [60] R. Seguin. *Electronic Fine Structure and Recombination Dynamics in Single InAs Quantum Dots*. PhD thesis, TU Berlin, 2008.
- [61] C. Giess. *Theory for Light-Matter Interaction in Semiconductor Quantum Dots*. PhD thesis, Universität Bremen, 2008.



- [62] N. Baer. *Optical and Electronic Properties of InGaAs and Nitride Quantum Dots*. PhD thesis, Universität Bremen, 2006.
- [63] S. M. Ulrich, M. Benyoucef, P. Michler, N. Baer, P. Gartner, F. Jahnke, M. Schwab, H. Kurtze, M. Bayer, S. Fafard, Z. Wasilewski, and A. Forchel. Correlated photon-pair emission from a charged single quantum dot. *Phys. Rev. B*, 71:235328, Jun 2005.
- [64] N. I. Cade, H. Gotoh, H. Kamada, H. Nakano, and H. Okamoto. Fine structure and magneto-optics of exciton, trion, and charged biexciton states in single inas quantum dots emitting at  $1.3\,\mu\text{m}$ . *Phys. Rev. B*, 73:115322, Mar 2006.
- [65] Gabriel Bester and Alex Zunger. Cylindrically shaped zinc-blende semiconductor quantum dots do not have cylindrical symmetry: atomistic symmetry, atomic relaxation, and piezoelectric effects. *Phys. Rev. B*, 71:045318, Jan 2005.
- [66] E. L. Ivchenko and G. Pikus. *Superlattices and Other Heterostructures*. Springer, Berlin, 1995.
- [67] Oliver Benson, Charles Santori, Matthew Pelton, and Yoshihisa Yamamoto. Regulated and entangled photons from a single quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 84:2513–2516, Mar 2000.
- [68] M. Bayer, G. Ortner, O. Stern, A. Kuther, A. A. Gorbunov, A. Forchel, P. Hawrylak, S. Fafard, K. Hinzer, T. L. Reinecke, S. N. Walck, J. P. Reithmaier, F. Kloppe, and F. Schäfer. Fine structure of neutral and charged excitons in self-assembled in(ga)as/(al)gaas quantum dots. *Phys. Rev. B*, 65:195315, May 2002.
- [69] J. Puls, M. Rabe, H.-J. Wünsche, and F. Henneberger. Magneto-optical study of the exciton fine structure in self-assembled cdse quantum dots. *Phys. Rev. B*, 60:R16303–R16306, Dec 1999.
- [70] H.A. Kramers. Théorie générale de la rotation paramagnétique dans les cristaux. *Proceedings Koninklijke Akademie van Wetenschappen* 33: 959-972, 1930.
- [71] K. Hinzer, P. Hawrylak, M. Korkusinski, S. Fafard, M. Bayer, O. Stern, A. Gorbunov, and A. Forchel. Optical spectroscopy of a single  $\text{Al}_{0.36}\text{In}_{0.64}\text{As}/\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$  quantum dot. *Phys. Rev. B*, 63:075314, 2001.
- [72] M. Ediger, G. Bester, B. D. Gerardot, A. Badolato, P. M. Petroff, K. Karrai, A. Zunger, and R. J. Warburton. Fine structure of negatively and positively charged excitons in semiconductor quantum dots: Electron-hole asymmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 98:036808, Jan 2007.
- [73] E. Fick. *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*. AULA-Verlag, Wiesbaden, 1988.
- [74] Alexander Högele, Stefan Seidl, Martin Kroner, Khaled Karrai, Richard J. Warburton, Brian D. Gerardot, and Pierre M. Petroff. Voltage-controlled optics of a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 93:217401, Nov 2004.

- [75] A. I. Tartakovskii, M. N. Makhonin, I. R. Sellers, J. Cahill, A. D. Andreev, D. M. Whittaker, J-P. R. Wells, A. M. Fox, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, K. M. Groom, M. J. Steer, H. Y. Liu, and M. Hopkinson. Effect of thermal annealing and strain engineering on the fine structure of quantum dot excitons. *Phys. Rev. B*, 70:193303, Nov 2004.
- [76] W. Langbein, P. Borri, U. Woggon, V. Stavarache, D. Reuter, and A. D. Wieck. Control of fine-structure splitting and biexciton binding in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum dots by annealing. *Phys. Rev. B*, 69:161301, Apr 2004.
- [77] Gabriel Bester, Selvakumar Nair, and Alex Zunger. Pseudopotential calculation of the excitonic fine structure of million-atom self-assembled  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  quantum dots. *Phys. Rev. B*, 67:161306, Apr 2003.

## **A. Anhang**

## A.1. Berechnung der Coulomb-Matrixelemente

In diesem Abschnitt werden die Coulomb-Matrix-Elemente  $V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'}$  mit  $\lambda, \lambda' \in \{e, h\}$  aus Gl. 2.39 mit Hilfe der Einhüllenden-Näherung (s. Gl. 2.17) berechnet. Die Coulomb-Matrixelemente sind definiert als:

$$V_{ij,kl} := \int d^3r \int d^3r' \Psi_i^*(\vec{r}) \Psi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \Psi_k(\vec{r}') \Psi_l(\vec{r}). \quad (\text{A.1})$$

Dabei bezeichnet  $V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\vec{r}-\vec{r}'|}$  das Coulomb-Potential,  $\Psi$  die Einteilchen-Wellenfunktion,  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante im Vakuum sowie  $\epsilon_r$  die relative Dielektrizitätskonstante im Halbleitermaterial. Unter Verwendung der Einhüllenden-Näherung (s. Gl. 2.17) lässt sich Gl. A.1 wie folgt vereinfachen:

$$\begin{aligned} V_{ij,kl} &= \int d^3r \int d^3r' \xi_i^*(\vec{r}) u_{\lambda_i}^*(\vec{r}) \xi_j^*(\vec{r}') u_{\lambda_j}^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \xi_k(\vec{r}') u_{\lambda_k}(\vec{r}') \xi_l(\vec{r}) u_{\lambda_l}(\vec{r}) \\ &\approx \sum_{\vec{R}_k} \sum_{\vec{R}_k'} V(\vec{R}_k - \vec{R}_k') \xi_i^*(\vec{R}_k) \xi_j^*(\vec{R}_k') \xi_k^*(\vec{R}_k') \xi_l^*(\vec{R}_k) \\ &\quad \cdot V_{\text{EZ}} \underbrace{\frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\lambda_i}^*(\vec{r}) u_{\lambda_l}(\vec{r})}_{\delta_{\lambda_i \lambda_l}} V_{\text{EZ}} \underbrace{\frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\lambda_j}^*(\vec{r}) u_{\lambda_k}(\vec{r})}_{\delta_{\lambda_j \lambda_k}} \\ &\approx \delta_{\lambda_i \lambda_l} \delta_{\lambda_j \lambda_k} \int d^3r \int d^3r' \xi_i^*(\vec{r}) \xi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \xi_k(\vec{r}') \xi_l(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Im ersten Schritt wurden die Integrale über den ganzen Raum in eine Summe von Integralen über die Elementarzellen (EZ) mit den Zentren  $\vec{R}_k$  und  $\vec{R}_k'$  zerlegt. Dies ist im Rahmen der Einhüllenden-Näherung gerechtfertigt, da sich sowohl die Einhüllende  $\xi(\vec{r})$  als auch die Coulomb-Wechselwirkung  $V(\vec{r})$  nur langsam über eine EZ des Kristalls ändern und die Blochfunktionen  $u_{\lambda}^*(\vec{r})$  gitterperiodisch sind. Anschließend wurden die beiden verbleibenden Integrale über die EZ ausgewertet. Aufgrund der Orthogonalität der Blochfunktionen  $\langle u_{\vec{k},\lambda}^*(\vec{r}) | u_{\vec{k},\lambda'}(\vec{r}) \rangle \sim \delta_{\lambda\lambda'}$  zu fester Wellenzahl  $\vec{k}$  liefern diese zwei Kronecker-Deltas. Im letzten Schritt wurden die Summen wieder in Integrale überführt.

Um die Matrixelemente zu berechnen, werden diese zunächst durch ihre Fourier-Transformierte dargestellt:

$$\begin{aligned} V(\vec{r} - \vec{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} V_q = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_r q^2} \\ &= \int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q}_{\parallel}(\vec{\rho}-\vec{\rho}')} \int \frac{dq_z}{2\pi} e^{-iq_z(z-z')} \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_r(\vec{q}_{\parallel}^2 + q_z^2)} \\ &= \int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q}_{\parallel}(\vec{\rho}-\vec{\rho}')} \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_r q_{\parallel}} e^{-i\vec{q}_{\parallel}|z-z'|}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Dabei wurde im ersten Schritt die Fourier-Transformierte des Coulomb-Potentials  $V_q = \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon_r q^2}$  eingesetzt<sup>9</sup>. Im letzten Schritt wurde die Identität

<sup>9</sup>Dies kann man durch Fouriertransformation aus dem Ortsraum mit Hilfe eines Konvergenz erzeugen-

$$\int dk e^{-ikx} \frac{1}{a^2 + x^2} = \frac{\pi}{a} e^{-a|x|} \quad (\text{A.4})$$

verwendet. Im Folgenden werden im  $q$ -Raum Zylinderkoordinaten verwendet, da die Wellenfunktionen in Gl. 2.30 bereits durch einen Separationsansatz in einen  $\vec{\rho}$ - und einen  $z$ -Anteil zerlegt wurden. Durch Einsetzen von Gl. 2.30 und Gl. A.3 berechnen sich die Coulomb-Matrix-Elemente wie folgt:

$$V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2 q_{\parallel}} \int d^2\rho e^{-i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} \varphi_i^{\lambda*}(\rho) \varphi_l^{\lambda}(\rho) \int d^2\rho' e^{-i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}'} \varphi_j^{\lambda'*}(\rho') \varphi_k^{\lambda'}(\rho') \cdot \frac{4}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_{-L/2}^{L/2} dz' e^{-i\vec{q}_{\parallel}|z-z'|} \cos^2\left(\pi \frac{z}{L}\right) \cos^2\left(\pi \frac{z'}{L}\right). \quad (\text{A.5})$$

Für das letzte Doppelintegral über die  $z$ - und  $z'$ -Koordinate führt man den sog. Formfaktor  $F$  ein. Dieser kann in mehreren Schritten ausgewertet werden und ergibt:

$$F(q_{\parallel}) = \frac{32\pi^4(-1 + Lq_{\parallel} + e^{-Lq_{\parallel}}) + 20(Lq_{\parallel})^3\pi^2 + 3(Lq_{\parallel})^5}{(Lq_{\parallel})^2 \left((Lq_{\parallel})^2 + 4\pi^2\right)^2}. \quad (\text{A.6})$$

Damit bleibt zu berechnen:

$$V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2 q_{\parallel}} F(q_{\parallel}) \langle \varphi_i^{\lambda} | e^{-i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_l^{\lambda} \rangle \langle \varphi_j^{\lambda'} | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_k^{\lambda'} \rangle. \quad (\text{A.7})$$

Die Ausdrücke der Überlapp-Matrixelemente  $\langle \varphi_j | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_k \rangle$  für die Oszillator-Wellenfunktionen aus Gl. 2.31 sind in Tabelle A.1 aufgelistet:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{m=0}^s | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_{m=0}^s \rangle &= e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} \\ \langle \varphi_{m=0}^s | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 1}^p \rangle &= \frac{iq}{2\beta} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\pm i\Phi} \\ \langle \varphi_{m=\pm 1}^p | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 1}^p \rangle &= \left(1 - \frac{q^2}{4\beta^2}\right) e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} \\ \langle \varphi_{m=\pm 1}^p | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_{m=\mp 1}^p \rangle &= \frac{-q^2}{4\beta^2} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\mp 2i\Phi} \end{aligned}$$

Tabelle A.1.: Analytische Ausdrücke der Überlapp-Matrixelemente für die Zustände  $s$ ,  $p_+$  und  $p_-$ .

Nach Einsetzen der Matrixelemente von Tab. A.1 nach Gl. A.7 bleibt ein zweidimensionales Integral zu berechnen. Dies lautet in Polarkoordinaten:

$$V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dq_{\parallel} \frac{F(q_{\parallel})}{(2\pi)^2} \langle \varphi_i^{\lambda} | e^{-i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_l^{\lambda} \rangle \langle \varphi_j^{\lambda'} | e^{i\vec{q}_{\parallel}\vec{\rho}} | \varphi_k^{\lambda'} \rangle. \quad (\text{A.8})$$

Die Integration in Polarkoordinaten ist numerisch besonders geschickt, da der Integrand schnell abfällt. Dies erlaubt die Integrationsgrenze ohne nennenswerten Fehler bei 100

---

den Faktors berechnen.

abzuschneiden. Zur numerischen Integration  $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_i w_i f(x_i)$  wurden die Stützstellen  $x_i$  und deren Gewichte  $w_i$  nach Gauss-Tschebyscheff berechnet:

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{2\pi}{N+1}i - \sin\left(\frac{2\pi}{N+1}i\right) \right] (b-a) + a, \\ w_i &= \frac{1}{2\pi} \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi}{N+1}i\right) \right] \frac{b-a}{N+1}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Eine solche Wahl erweist sich als besonders geschickt, da hiermit die Anzahl der Stützstellen gegenüber einer äquidistanten Wahl reduziert werden kann, ohne an Genauigkeit zu verlieren. Nach Auswerten aller Integrale erhält man folgende nicht verschwindende Matrixelemente für gleiche Oszillatorlängen  $l_k$  der Elektronen:

(i,j,k,l)	$V_{ij,kl}/E_c$
(1,1,1,1)	1.1197
(1,2,2,1), (2,1,1,2)	0.8690
(1,3,3,1), (3,1,1,3)	0.8690
(2,2,2,2)	0.7935
(2,3,3,2), (3,2,2,3)	0.7935
(3,3,3,3)	0.7935
(1,1,2,3), (1,1,3,2), (2,3,1,1), (3,2,1,1)	0.2507
(1,2,1,2), (2,1,2,1)	0.2507
(1,3,1,3), (3,1,3,1)	0.2507
(2,3,2,3), (3,2,3,2)	0.1753

Tabelle A.2.: Alle von Null verschiedenen Matrixelemente für  $l_k^e = l_k^h = 5.4 \text{ nm}$  und  $E_c = e^2/4\pi\epsilon_0\epsilon_r l_k = 19.478 \text{ meV}$ . Dabei entspricht der Index  $\kappa \in (i, j, k, l)$  der Wellenfunktion  $\varphi_\kappa$ , wobei  $\{1, 2, 3\} \hat{=} \{s, p_+, p_-\}$  in dieser Reihenfolge entspricht. Die hier gewählten Oszillatorlängen entsprechen einem weit verbreiteten empirischen Modell [58], werden später aber im Bezug auf das Experiment variiert.

Man erkennt in Tabelle A.1, dass nur 19 der  $3^4 = 81$  Matrixelemente ungleich Null sind und dass insgesamt nur 5 verschiedene Werte auftreten. Dass in den 10 Zeilen nur 5 unterschiedliche vorkommen, ist auf die Symmetrie der Wellenfunktionen  $\psi_m = \psi_{-m}$  für zylindersymmetrische Potentiale zurückzuführen.

### A.1.1. d-Schale

Zusätzlich zu den in Tab. A.1 aufgeführten Zuständen einer s-Schale und zwei-p-Schalen werden nun außerdem die drei Zustände in der d-Schale ( $d_0, d_+, d_-$ ) berücksichtigt und die dazukommenden Überlapp-Matrixelemente berechnet (s. Tab. A.3):

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_{m=0}^s | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=0}^d \rangle &= -\frac{q^2}{4\beta^2} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} \\
\langle \varphi_{m=0}^s | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 2}^d \rangle &= -\frac{q^2}{4\beta^2 \sqrt{2}} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\pm 2i\Phi} \\
\langle \varphi_{m=\pm 1}^p | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=0}^d \rangle &= \frac{iq}{2\beta} \left(1 - \frac{q^2}{4\beta^2}\right) e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\mp i\Phi} \\
\langle \varphi_{m=\mp 1}^p | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 2}^d \rangle &= -\frac{iq^3}{8\beta^3 \sqrt{2}} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\pm 3i\Phi} \\
\langle \varphi_{m=\pm 1}^p | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 2}^d \rangle &= -\frac{iq}{\beta \sqrt{2}} \left(1 - \frac{q^2}{8\beta^2}\right) e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\pm i\Phi} \\
\langle \varphi_{m=0}^d | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=0}^d \rangle &= \left(1 - \frac{q^2}{4\beta^2}\right)^2 e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} \\
\langle \varphi_{m=\pm 2}^d | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=\mp 2}^d \rangle &= \frac{q^4}{32\beta^4} e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\mp 4i\Phi} \\
\langle \varphi_{m=\pm 2}^d | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 2}^d \rangle &= \left(1 - \frac{q^2}{2\beta^2} + \frac{q^4}{32\beta^4}\right) e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} \\
\langle \varphi_{m=0}^d | e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m=\pm 2}^d \rangle &= \frac{-q^2}{2\beta \sqrt{2}} \left(1 - \frac{q^2}{8\beta^2}\right) e^{-\frac{q^2}{4\beta^2}} e^{\pm 2i\Phi}
\end{aligned}$$

Tabelle A.3.: Analytische Ausdrücke der Überlapp-Matrixelemente für die Zustände  $d_0$ ,  $d_+$  und  $d_-$ .

Alle weiteren nicht in den Tabellen A.1 und A.3 aufgeführten Überlapp-Matrixelemente lassen sich durch die Substitution  $q_{\parallel} \rightarrow -q_{\parallel}$  und komplexer Konjugation bestimmen:

$$\langle \varphi_m | e^{+i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m'} \rangle = \left( \langle \varphi_{m'} | e^{+i(-\vec{q}_{\parallel}) \vec{\rho}} | \varphi_m \rangle \right)^* . \quad (\text{A.10})$$

Aufgrund der Zylindersymmetrie gilt außerdem:

$$\langle \varphi_m | e^{+i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{m'} \rangle = \langle \varphi_{-m'} | e^{+i\vec{q}_{\parallel} \vec{\rho}} | \varphi_{-m} \rangle . \quad (\text{A.11})$$

## A.2. Berechnung der Matrixelemente des Austausch-Hamilton-Operators zur Feinstruktur

Die folgenden Analyse orientiert sich eng an [60]. Zunächst wird ein effektiver Austausch-Hamilton-Operator aufgestellt. Um die Diskussion zu vereinfachen, wird der Begriff Pseudospin eingeführt: Pseudospin ist ein Trick, der es erlaubt Spin- 3/2 -Teilchen wie ein Spin- 1/2 -Teilchen zu behandeln. In diesem Fall haben die schweren Löcher einen Gesamtdrehimpuls von  $|\pm \frac{3}{2}\rangle$ . Hierfür wird mit Hilfe des Pseudospins folgende Zuordnung vorgenommen:  $|j_z\rangle = |\pm \frac{3}{2}\rangle \mapsto |i_z\rangle = |\mp \frac{1}{2}\rangle$ . Der Hamilton-Operator für die Feinstruktur einer Zinkblende-Struktur kann gruppentheoretisch mit Hilfe der Theorie der Invarianten aufgestellt werden und lautet [66]:

$$H^{ex} = \underbrace{2\Delta_0 I_z S_z}_{H_0} + \underbrace{\Delta_1 (I_x S_x - I_y S_y)}_{H_1} + \underbrace{\Delta_2 (I_x S_x + I_y S_y)}_{H_2} . \quad (\text{A.12})$$

Dabei sind  $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$  der Gesamtspin der Elektronen und  $\vec{I} = (I_x, I_y, I_z)$  der Gesamtpseudospin der Löcher und  $\Delta_i$  Konstanten. Die zugehörigen Einteilchen-Operatoren sind  $s$  und  $i$ .

### A.2.1. Exziton und Biexziton

Um die Matrixdarstellung von  $H^{ex}$  in der Basis der Projektion in z-Richtung des Gesamtdrehimpulses  $|F_z\rangle = |s_z\rangle + |j_z\rangle$  mit  $s_z \in \{\pm\frac{1}{2}\}$ ,  $j_z \in \{\pm\frac{3}{2}\}$  zu finden, müssen alle auftretenden Matrixelemente  $H_{ij}^{ex} = \langle F_z^i | H^{ex} | F_z^j \rangle$  berechnet werden. Im Pseudospin-Bild bedeutet dies  $|M_z\rangle = |s_z\rangle + |i_z\rangle$  mit  $s_z \in \{\pm\frac{1}{2}\}$ ,  $i_z \in \{\mp\frac{1}{2}\}$ . Dabei ist der Vorzeichenwechsel von  $|i_z\rangle = |\mp\frac{1}{2}\rangle$  gegenüber  $|j_z\rangle = |\pm\frac{3}{2}\rangle$  zu beachten. Die vier möglichen Exziton-Konfigurationen lauten damit:

$$\begin{aligned} |F_z\rangle &= |s_z, i_z\rangle \\ |-2\rangle &= |-1/2, +1/2\rangle \\ |-1\rangle &= |+1/2, +1/2\rangle \\ |+1\rangle &= |-1/2, -1/2\rangle \\ |+2\rangle &= |+1/2, -1/2\rangle. \end{aligned} \tag{A.13}$$

In der Basis des Elektronenspins bzw. Lochpseudospins lauten die Spinoperatoren [73]:

$$\begin{aligned} s_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} = i_x \\ s_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix} = i_y \\ s_z &= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} = i_z. \end{aligned} \tag{A.14}$$

Nun werden die verschiedenen Matrixelemente berechnet und die von Null verschiedenen aufgeführt. Dabei werden die Summanden von  $H^{ex} = H_0 + H_1 + H_2$  einzeln berechnet. Für  $H_0$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle \pm 1 | H_0 | \pm 1 \rangle &= \langle \mp 1/2, \mp 1/2 | 2\Delta_0 i_z s_z | \mp 1/2, \mp 1/2 \rangle \\ &= 2\Delta_0 \langle \mp 1/2, \mp 1/2 | i_z | \mp 1/2, \mp 1/2 \rangle \langle \mp 1/2, \mp 1/2 | s_z | \mp 1/2, \mp 1/2 \rangle \\ &= 2\Delta_0 (\mp 1/2)(\mp 1/2) = \Delta_0/2. \end{aligned} \tag{A.15}$$

Analog ergibt sich  $\langle \pm 2 | H_0 | \pm 2 \rangle = -\Delta_0/2$ . Für  $H_1$  erhält man:

$$\begin{aligned} \langle \mp 1 | H_1 | \pm 1 \rangle &= \Delta_1 \langle \pm 1/2, \pm 1/2 | (i_x s_x - i_y s_y) | \mp 1/2, \mp 1/2 \rangle \\ &= \Delta_1 (1/2 \cdot 1/2 - (\pm i/2)(\pm i/2)) = \Delta_1/2. \end{aligned} \tag{A.16}$$

Für  $H_2$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle \mp 2 | H_2 | \pm 2 \rangle &= \Delta_1 \langle \mp 1/2, \pm 1/2 | (i_x s_x - i_y s_y) | \mp 1/2, \pm 1/2 \rangle \\ &= \Delta_2 (1/2 \cdot 1/2 - (\mp i/2)(\pm i/2)) = \Delta_2/2. \end{aligned} \tag{A.17}$$

Addiert man die hier berechneten Matrizen, so erhält man schließlich:



$$H^{ex} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Delta_0 & \Delta_1 & 0 & 0 \\ \Delta_1 & \Delta_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta_0 & \Delta_2 \\ 0 & 0 & \Delta_2 & -\Delta_0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.18})$$

Dabei entsprechen die Zeilen und Spalten jeweils den Zuständen  $|F_z\rangle = | +1\rangle, | -1\rangle, | +2\rangle, | -2\rangle$  in dieser Reihenfolge.

### A.2.2. Angeregtes Trion

Nun wird der zweite Feinstruktur-Block mit einer Aufspaltung von etwa  $80 \mu\text{eV}$  untersucht. Dazu wird das angeregte Trion  $X^{-*}$  analysiert. Dies erfolgt analog zu der Untersuchung des Exzitons, ist aber etwas komplizierter, weil hier nun drei Teilchen beteiligt sind. Die auftretenden Konfigurationen sind im Folgenden aufgelistet:

Einteilchen-Drehimpuls und Einteilchen-Spins $ j_z, s_z^1, s_z^2\rangle$	Gesamt- drehimpuls $ F_z\rangle$	Einteilchen-Pseudospin und Einteilchen Spins $ i_z, s_z^1, s_z^2\rangle$	Gesamt- pseudospin $ M_z\rangle$
$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{5}{2}\rangle_T$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_T$
$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_T$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}\rangle_T$
$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}\rangle_T$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle +  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_T$
$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle -  \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}\rangle_S$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle -  \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}\rangle_S$

Tabelle A.4.: Vier der acht Zustände des angeregten Trions in den verschiedenen Notationen. Die restlichen vier Zustände erhält man durch Multiplizieren der dargestellten Zustände mit -1. In den Zuständen mit den drei Einteilchen-Quantenzahlen stellt die erste jeweils den Loch-Zustand und die letzten beiden jeweils die beiden Elektronen-Zustände dar. Die drei Triplett-Zustände sind mit T und der Singlett-Zustand mit S indiziert.

Da die Austauschwechselwirkung zwischen zwei identischen Teilchen stärker ist als zwischen verschiedenen Teilchen, wird die Wechselwirkung näherungsweise in zwei Teile zerlegt:

Zuerst die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und anschließend die Wechselwirkung dieses Komplexes mit dem Loch. Dazu werden die zwei Einteilchen-Spins  $s_z^1$  und  $s_z^2$  zu einem Gesamtspin  $S$  zusammengefasst. Die Spin-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen gibt die bekannte Singlett-Triplett-Struktur. Diese kommt wie folgt zustande: Ein System mit Gesamtspin  $S$  hat die Spinmultiplizität  $2S + 1$  und damit diese Anzahl linear unabhängiger Zustände zu dem selben Eigenwert  $S$ . Diese unterscheiden sich aber in der Orientierung des Spins bzgl. einer ausgezeichneten Achse, die im Folgenden ohne Einschränkung die z-Achse sein wird. Bei zwei Elektronen können sich die beiden halbzahligen Einzelspins  $s_z^1 = \pm 1/2$  und  $s_z^2 = \pm 1/2$  entweder zum Gesamtspin  $S = 0$  addieren, dann beträgt die Multiplizität  $2 \cdot 0 + 1 = 1$  und man erhält einen Singlett-Zustand  $|S, S_z\rangle = |0, 0\rangle$ . Die andere Möglichkeit ist, dass sich  $s_z^1 = \pm 1/2$  und  $s_z^2 = \pm 1/2$  zum Gesamtspin  $S = 1$  addieren, dann beträgt die Multiplizität  $2 \cdot 1 + 1 = 3$  und man erhält drei linear unab-

hängige Triplet-Zustände  $|1, \pm 1\rangle$  sowie  $|1, 0\rangle$ . Der Operator des Gesamtspins  $S \in \{0, \pm 1\}$  ist ein Spin-1-Operator. In der Basis von  $s_z$  lautet dieser [73]:

$$\begin{aligned} S_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\ S_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\ S_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Nachdem die beiden Einzelspins  $s_z^1$  und  $s_z^2$  der beiden Elektronen zu einem Gesamtspin  $S$  zusammengefügt wurden, wird nun zusätzlich der Gesamtdrehimpuls des Schwerloches  $|j_z\rangle = |\pm \frac{3}{2}\rangle$  berücksichtigt.

Damit erhält man die Projektion der Gesamtdrehimpuls-Zustände  $|F_z\rangle = |\pm \frac{1}{2}\rangle, |\pm \frac{3}{2}\rangle, |\pm \frac{5}{2}\rangle$  in  $z$ -Richtung. Im Folgenden werden die Gesamtdrehimpulse der drei Triplett-Zustände aus Tabelle 3.2 abhängig von den zusammengefassten Elektronenspins  $S$  und dem Loch-Pseudospin  $|i_z\rangle$  dargestellt:

$$\begin{aligned} |F_z\rangle &= |j_z, S_z\rangle = |i_z, S_z\rangle \\ |\mp 3/2\rangle &= |\mp 3/2, 0\rangle = |\pm 1/2, 0\rangle \\ |\pm 1/2\rangle &= |\pm 3/2, \mp 1\rangle = |\mp 1/2, \mp 1\rangle \\ |\mp 5/2\rangle &= |\mp 3/2, \mp 1\rangle = |\pm 1/2, \mp 1\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Um die Matrixelemente zu berechnen, müssen die Operatoren in einer Basis dargestellt werden. Der Operator des Gesamtspins  $S$  in der Basis von  $s_z$  wurde oben aufgestellt (s. Abb. A.19). Die Matrizen für den Operator  $i_z$  in der Basis von  $s_z$  wurden bereits für das Exziton aufgestellt (s. Gl. A.14). Hiermit werden nun erneut die von Null verschiedenen Matrixelemente berechnet. Dabei werden wieder die Summanden von  $H^{ex} = H_0 + H_1 + H_2$  einzeln berechnet. Für  $H_0$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle \pm 1/2 | H_0 | \pm 1/2 \rangle &= 2\Delta_0 \langle \mp 1/2, \mp 1 | S_z i_z | \mp 1/2, \mp 1 \rangle \\ &= 2\Delta_0 (\mp 1/2) \cdot (\mp 1) = \Delta_0 \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} \langle \mp 5/2 | H_0 | \mp 5/2 \rangle &= 2\Delta_0 \langle \pm 1/2, \mp 1 | S_z i_z | \pm 1/2, \mp 1 \rangle \\ &= 2\Delta_0 (\pm 1/2) \cdot (\mp 1) = -\Delta_0 \end{aligned}$$

Für  $H_1$  erhält man mit Hilfe von Gl. A.19:

$$\begin{aligned} \langle \mp 3/2 | H_1 | \pm 1/2 \rangle &= \Delta_1 \langle \pm 1/2, 0 | S_x i_x - S_y i_y | \mp 1/2, \mp 1 \rangle \\ &= \Delta_1 (1/\sqrt{2}) \cdot (1/2) - (\mp i/\sqrt{2}) \cdot (\pm i/2) = \Delta_1/\sqrt{2} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Für  $H_2$  ergibt sich anhand von Gl. A.19:

$$\begin{aligned} \langle \mp 3/2 | H_0 | \pm 5/2 \rangle &= \Delta_2 \langle \pm 1/2, 0 | S_x i_x + S_y i_y | \mp 1/2, \pm 1 \rangle \\ &= \Delta_2 (1/\sqrt{2}) \cdot (1/2) + (\mp i/\sqrt{2}) \cdot (\pm i/2) = \Delta_2/\sqrt{2} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Addiert man die einzelnen Matrizen, so erhält man schließlich:

$$H^{ex} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta_1/\sqrt{2} & 0 & 0 & \Delta_2/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_1/\sqrt{2} & \Delta_2/\sqrt{2} & 0 \\ \Delta_1/\sqrt{2} & 0 & \Delta_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_1/\sqrt{2} & 0 & \Delta_0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_2/\sqrt{2} & 0 & 0 & -\Delta_0 & 0 \\ \Delta_2/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.24})$$

Dabei entsprechen die Zeilen und Spalten jeweils den Zuständen  $|F_z\rangle = |-\frac{3}{2}\rangle, |+\frac{3}{2}\rangle, |+\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{5}{2}\rangle, |+\frac{5}{2}\rangle$  in dieser Reihenfolge. Vereinfachend lassen sich jeweils die beiden Zustände mit dem gleichen Betrag zusammenfassen. Dann ergibt sich:

$$H^{ex} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_1/\sqrt{2} & \Delta_2/\sqrt{2} \\ \Delta_1/\sqrt{2} & \Delta_0 & 0 \\ \Delta_2/\sqrt{2} & 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.25})$$

Dann entsprechen die Zeilen und Spalten jeweils den Zuständen  $|F_z\rangle = |\mp \frac{3}{2}\rangle, |\pm \frac{1}{2}\rangle, |\mp \frac{5}{2}\rangle$  in dieser Reihenfolge.

### A.3. Literaturwerte zur Feinstruktur-Aufspaltung

Eine Literatur-Übersicht über Messungen und Berechnungen der Parameter  $\Delta_0$ ,  $\Delta_1$  und  $\Delta_2$  für In GaAs-Quantenpunkte wird in der folgenden Tabelle gegeben:

Quelle	Methode	Ergebnis	Bemerkung
Bester et al. [72]	Pseudopotential	$\Delta_0 = 64 \mu\text{eV}$ ; $\Delta_1 = 91 \mu\text{eV}$	$X^{2-}$ -Linie
		$\Delta_0 = 91 \mu\text{eV}$ ; $\Delta_1 = 2 \mu\text{eV}$	$X^{2+}$ -Linie
Bayer et al. [68]	$\mu\text{PI}$	$\Delta_0 = 30 - 150 \mu\text{eV}$ $\Delta_1 = 20 - 150 \mu\text{eV}$ $\Delta_2 = 0 - 100 \mu\text{eV}$	
Högele et al. [74]	Transmission	$\Delta_0 = 10 - 42 \mu\text{eV}$	
Tartakovskii et al. [75]	pump & probe	$\Delta_0 = 10 - 42 \mu\text{eV}$	
Langbein et al. [76]	FWM	$\Delta_0 = 6 - 96 \mu\text{eV}$	
Bester et al. [77]	Pseudopotential	$\Delta_0 = 39 - 164 \mu\text{eV}$ $\Delta_1 = 4 - 34 \mu\text{eV}$ $\Delta_2 = 0 - 3 \mu\text{eV}$	flacher QP: $b = 25.2 \text{ nm}$ , $h = 3.5 \text{ nm}$

Tabelle A.5.: Übersicht über Ergebnisse aus der Literatur zur Feinstruktur-Aufspaltung.



# Danksagung

Ich möchte mich bei Herrn Prof. Dr. Jahnke bedanken, dass er mir die Möglichkeit gegeben hat, meine Masterarbeit zu diesem interessanten Thema zu schreiben. Außerdem möchte ich ihm für die Unterstützung beim Erstellen dieser Arbeit sowie den inhaltlichen Diskussionen danken.

Zusätzlich gilt mein Dank Herrn Dr. Matthias Florian, ohne dessen hervorragende Betreuung diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Ich möchte mich ganz besonders für die zahlreichen inhaltlichen Diskussionen und Ideen zu dieser Arbeit bedanken. Zudem danke ich ihm für seine Mühe, diese Arbeit kritisch zu kommentieren.

Außerdem möchte ich mich bei Herrn Dr. Alexander Steinhof für das ausführliche Korrekturlesen der Arbeit sowie die zahlreichen Anmerkungen bedanken.

Weiterhin möchte ich meinem Zweitgutachter Herrn Prof. Dr. Wehling danken, dass er sich die Mühe macht, sich mit dieser Arbeit auseinander zu setzen und ein Zweitgutachten anzufertigen.

Zuletzt möchte ich allen weiteren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts für die anregenden physikalischen Diskussionen danken.



# Selbstständigkeitserklärung

***Diese Erklärungen sind in jedes Exemplar der Abschlussarbeit mit einzubinden.***

Name: \_\_\_\_\_ Matrikel-Nr.: \_\_\_\_\_

## **Urheberrechtliche Erklärung**

Erklärung gem. § 10 (10) Allgemeiner Teil der MPO vom 27.10.2010

Hiermit versichere ich, dass ich meine Masterarbeit ohne fremde Hilfe angefertigt habe, und dass ich keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen entnommen sind, habe ich unter Angabe der Quellen als solche kenntlich gemacht.

Die Masterarbeit darf nach Abgabe nicht mehr verändert werden.

Datum: \_\_\_\_\_ Unterschrift: \_\_\_\_\_

## **Erklärung zur Veröffentlichung von Abschlussarbeiten**

Bitte auswählen und ankreuzen:

- ☐ Ich bin damit einverstanden, dass meine Abschlussarbeit im Universitätsarchiv für wissenschaftliche Zwecke von Dritten eingesehen werden darf.
- ☐ Ich bin damit einverstanden, dass meine Abschlussarbeit nach 30 Jahren (gem. §7 Abs.2 BremArchivG) im Universitätsarchiv für wissenschaftliche Zwecke von Dritten eingesehen werden darf.
- ☐ Ich bin nicht damit einverstanden, dass meine Abschlussarbeit im Universitätsarchiv für wissenschaftliche Zwecke von Dritten eingesehen werden darf.

Datum: \_\_\_\_\_ Unterschrift: \_\_\_\_\_