
Optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantenpunkten

Diplomarbeit

von

Norman Baer

vorgelegt im

Fachbereich Physik

der



12. Februar 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Theoretische Grundlagen	5
1.1	Envelope-Näherung	5
1.2	Vielteilchen-Hamiltonoperator	6
1.3	Wechselwirkung mit einem Lichtfeld	9
1.4	Klassifizierung der Vielteilchen-Eigenzustände	10
1.5	Spin-Entartung	13
1.6	Methode der exakten Diagonalisierung	15
1.6.1	Einbandmodell	16
1.6.2	Zweibandmodell	20
1.7	Berechnung der optischen Spektren	22
1.8	Summenregel	24
2	Quantenpunkte mit harmonischem Einschlusspotential	27
2.1	Das Modell	27
2.2	Das Einteilchen-Spektrum	29
2.3	Coulomb-Matrixelemente	30
2.4	Ergebnisse für ein Elektron-Loch-Paar	32
2.4.1	Energiespektrum	33
2.4.2	Absorptions- und Emissionsspektren	37
2.4.3	Nichtidentische Elektron- und Loch-Wellenfunktionen	39
2.5	Ergebnisse für zwei Elektron-Loch-Paare	41
2.5.1	Energiespektren	41
2.5.2	Optische Spektren	44
2.6	Ergebnisse für bis zu sechs Elektron-Loch-Paare	46
2.6.1	Energiespektren	46
2.6.2	Optische Spektren	48
2.7	Die Hartree-Fock-Näherung für ein wechselwirkendes Elektron-Loch-Gas	51
2.7.1	Die Hartree-Fock-Gleichungen	51
2.7.2	Erste Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen	52
2.7.3	Zweite Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen	54
2.7.4	Folgerungen	55
2.7.5	Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen	58

3 Elektronische Zustände in zylindersymmetrischen Quantenpunkten auf einer Benetzungsschicht	61
3.1 Hamiltonoperator	62
3.2 Adiabatische Näherung	63
3.3 Transfermatrixmethode	67
3.4 Ergebnisse in adiabatischer Näherung	70
3.4.1 Gebundene Elektronenzustände	71
3.4.2 Gebundene Lochzustände	73
3.4.3 Streuzustände	76
3.5 Diagonalisierung auf einem Gitter	79
3.5.1 Diskretisierung I	80
3.5.2 Randbedingungen	80
3.5.3 Diskretisierung II	82
3.6 Durchführung und Ergebnisse	86
4 Elektronische Zustände in elliptischen Quantenpunkten auf einer Benetzungsschicht	92
4.1 Modellgeometrie	92
4.2 Schrödingergleichung in adiabatischer Näherung	94
4.3 Diagonalisierung auf einem Gitter	95
4.4 Ergebnisse und Diskussion	98
5 Zusammenfassung und Ausblick	105
Anhang	107
A Endlicher Potentialkasten	107
B Berechnung der Coulomb-Matrixelemente	109
Literatur	113

Motivation und Einleitung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit den optischen Eigenschaften von Halbleiter-Quantenpunkten. Das Interesse an Halbleiter-Quantenpunkten hat in den letzten Jahren stark zugenommen, da man an ihnen zum einen fundamentale Effekte der Quantenmechanik studieren kann und sie zum anderen ein hohes Anwendungspotential in der Elektronik und Optoelektronik besitzen. Bevor die Arbeit im Einzelnen vorgestellt wird, erläutern wir zunächst kurz, was Quantenpunkte sind und was diese Strukturen so interessant macht.

Quantenpunkte sind Halbleiter-Heterostrukturen, die die Ladungsträger in einem Raumbe- reich einschließen, dessen Ausdehnung in allen drei Raumrichtungen von der Größenordnung ihrer de Broglie-Wellenlänge ist. Diese starke räumliche Lokalisierung der Ladungsträger führt zu diskreten, deutlich voneinander getrennten Energieniveaus. Die scharfen Energieniveaus grenzen sie klar vom Volumenkristall und von anderen Nanostrukturen, wie den Quantenfil- men oder den Quantendrähten, ab. In diesen Strukturen können sich die Ladungsträger näm- lich, im Gegensatz zu den in Quantenpunkten eingeschlossenen Teilchen, noch in mindestens einer Raumrichtung „frei“ bewegen. Dadurch kommt es in diesen Systemen zur Bildung quasi- kontinuierlicher Energiebänder. Da Quantenpunkte genau wie Atome diskrete Energieniveaus aufweisen und die in der Nanostruktur eingeschlossenen Ladungsträger vergleichsweise lange Lebensdauer besitzen, werden sie häufig auch als „künstliche Atome“ bezeichnet. Im Gegensatz zu Atomen lassen sich die Energieniveaus dieser künstlichen Atome aber durch geschickte Wahl der Material- und Wachstumsparameter – zumindest zu einem gewissen Grade – maßschnei- dern. Dies eröffnet völlig neue Perspektiven für die Elektronik und Optoelektronik und lässt auf interessante Innovationen in den nächsten Jahren hoffen. Insbesondere werden in der Literatur Quantenpunkt-Laser und die Möglichkeit, die für einen Quantencomputer nötige Elementar- einheit, das Qubit, durch Quantenpunkte zu realisieren, diskutiert (vgl. z.B. [18,38]). Auch sind Quantenpunktsysteme als neue effiziente Datenträger im Gespräch [24]. Eine erste kommerzi- elle Anwendung von Quantenpunkten, ist die Verwendung von Nanokristallen als Markierung für die Fluoreszenzmikroskopie in der biologischen und medizinischen Forschung [2].

Neben dem großen praktischen Anwendungspotential zeichnen sich Quantenpunkte dadurch aus, dass in diesen Strukturen geringer räumlicher Ausdehnung fundamentale quantenme- chanische Modellsysteme, wie z.B. das Teilchen im Potentialkasten, Anwendung zur Beschrei- bung realer Strukturen finden. Außerdem können Vielteilchen-Effekte, hervorgerufen durch die Wechselwirkung einiger weniger Ladungsträger, die in den Quantenpunkten lokalisiert sind, studiert werden. Somit ist es möglich durch das Studium dieser Nanostrukturen unser grund- legendes Verständnis der Quantenmechanik zu überprüfen und zu vertiefen. Aufgrund dieses Umstandes sind Quantenpunkte auch für die Grundlagenforschung von großem Interesse.

Anschließend an diese kurze Motivation geben wir im Folgenden einen Überblick über die vorliegende Arbeit. Im ersten Kapitel werden die theoretischen Grundlagen bereitgestellt. Hierbei wird zunächst die Envelope-Näherung behandelt. Diese Näherung ist zusammen mit der Effektivmassennäherung eine der häufigst verwendeten Approximationen, um die Wellen- funktionen in Nanostrukturen zu beschreiben. Danach wird der Vielteilchen-Hamiltonoperator, der neben den Einteilchen-Energien die Coulomb-Wechselwirkung beinhaltet, und der Dipol- Hamiltonoperator, der die Licht-Materie-Wechselwirkung beschreibt, in Envelope-Näherung diskutiert. Die Abschnitte 1.4 und 1.5 beschäftigen sich dann damit, wie man die Vielteilchen- Eigenzustände eines Quantenpunktes klassifizieren kann und welche allgemeinen Aussagen sich über den Entartungsgrad der Energiespektren aufgrund der Spins der Elektronen und Löcher treffen lassen. In Abschnitt 1.6 wird dann die Methode der exakten Diagonalisierung vorge-

stellt und es werden die zur praktischen Umsetzung notwendigen Gleichungen hergeleitet. Die Methode der exakten Diagonalisierung ist für uns von zentraler Bedeutung, da man mit ihrer Hilfe die Eigenenergien und Eigenzustände des wechselwirkenden Vielteilchensystems ermitteln kann. Anschließend wird in Abschnitt 1.7 erläutert wie man die optischen Spektren ausgehend von den Vielteilchen-Eigenzuständen berechnen kann. Kapitel 1 endet mit der Diskussion einer allgemeinen Summenregel für die Übergangsmatrixelemente. Mit Hilfe dieser Summenregel ist eine einfache Überprüfung der für ein spezielles System ermittelten Übergangsmatrixelemente möglich.

Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit den Vielteilchen-Energiespektren und mit den optischen Spektren von Quantenpunkten mit harmonischem Einschlusspotential. Nachdem zunächst in Abschnitt 2.1 das allgemeine Modell erläutert und die darin enthaltenen Näherungen diskutiert werden, behandelt Kapitel 2.2 das Einteilchenproblem. In Kapitel 2.3 wird dann die Berechnung der Coulomb-Matrixelemente speziell für unser Modellsystem erklärt und eine allgemeine „Auswahlregel“ für die Coulomb-Matrixelemente zylindersymmetrischer Systeme abgeleitet. In Teil 2.4 präsentieren wir die Ergebnisse für ein System mit einem Elektron-Loch-Paar. In Abschnitt 2.4.1 wird hierbei zunächst das Energiespektrum des wechselwirkenden Systems ausführlich diskutiert, um anschließend die optischen Spektren in Abschnitt 2.4.2 zu präsentieren. Teil 2.4.3 der Arbeit befasst sich dann damit wie die optischen Spektren durch eine Abweichung von der häufig verwendeten Annahme identischer Einteilchen-Wellenfunktionen für die Elektronen und Löcher modifiziert werden. Im Anschluss daran werden in Kapitel 2.5 sowohl die Energiespektren als auch die optischen Spektren für einen Quantenpunkt mit zwei Elektron-Loch-Paaren behandelt. Kapitel 2.6 präsentiert dann die entsprechenden Ergebnisse für eine Füllung mit bis zu sechs Elektron-Loch-Paaren. Eine Diskussion der Hartree-Fock-Gleichungen für ein System aus Elektronen und Löchern in Abschnitt 2.7 rundet Kapitel 2 ab. Nachdem zunächst in Teil 2.7.2 und 2.7.3 zwei verschiedene Wege zur Herleitung dieser Gleichungen angegeben werden, diskutieren wir in Abschnitt 2.7.4 – durch diese beiden Ableitungen motiviert – die durch Verwendung der Envelope-Näherung vernachlässigten Effekte. In Abschnitt 2.7.5 behandeln wir schließlich die Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen und vergleichen die daraus gewonnen Grundzustandsenergien mit denen der exakten Diagonalisierung.

Nachdem wir in Kapitel 2 von einem harmonischen Einschlusspotential für die Elektronen und Löcher ausgegangen sind, beschäftigen sich Kapitel 3 und 4 mit der Berechnung realistischer Einteilchen-Wellenfunktionen. Kapitel 3 befasst sich mit den Einteilchen-Zuständen eines Quantenpunktes, welcher durch eine Kugelkappe, die auf einer Benetzungsschicht aufliegt, modelliert wird. In Teil 4 wird diese Kugelkappe durch eine Ellipsoidkappe ersetzt, so dass man den Einfluss der verringerten Symmetrie auf die Wellenfunktionen und das Energiespektrum studieren kann.

Kapitel 3 ist wie folgt gegliedert: In Abschnitt 3.1 wird zunächst der Einteilchen-Hamiltonoperator in Envelope-Näherung diskutiert und die dreidimensionale Schrödingergleichung wird durch Ausnutzung der Zylindersymmetrie des Einteilchen-Potentials auf eine zweidimensionale Gleichung reduziert. Die approximative Reduktion dieser zweidimensionalen Gleichung auf ein System von zwei gekoppelten eindimensionalen Schrödingergleichungen im Falle flacher Quantenpunkte ist durch die sogenannte adiabatische Näherung möglich und wird in Abschnitt 3.2 behandelt. Eine der beiden aus dieser Näherung resultierenden Gleichungen ist leicht lösbar und die zweite kann mittels einer Transfermatrixmethode gelöst werden. Dies ist Gegenstand von Abschnitt 3.3. In Teil 3.4 dieser Arbeit werden die Ergebnisse in adiabatischer Näherung für die Elektronen und Löcher diskutiert. Zunächst geht es dabei um den Vergleich der Energie-

spektren und Wellenfunktionen der gebundenen Zustände mit denen eines zweidimensionalen Oszillators, wie er in Kapitel 2 verwendet wurde. Im Anschluss daran werden die Streuzustände behandelt. In Kapitel 3.5 wird beschrieben, wie man die zweidimensionale Schrödingergleichung ohne Verwendung der adiabatischen Näherung durch Diskretisierung auf einem Gitter lösen kann. Diese Vorgehensweise ist zwar weitaus rechenintensiver als die Verwendung der adiabatischen Näherung, erlaubt uns aber die Gültigkeit dieser Näherung zu überprüfen. Wie die Ränder zu behandeln sind, welche bei der Diskretisierung der Schrödingergleichung auftreten, hängt von der Drehimpulsquantenzahl ab. Dies wird in Abschnitt 3.5.2 ausführlich diskutiert. Abschnitt 3.6 stellt schließlich die Ergebnisse der direkten Diagonalisierung vor und vergleicht sie mit den Ergebnissen der adiabatischen Näherung.

Kapitel 4 ist schließlich den elliptischen Quantenpunkten gewidmet. Durch die gegenüber den zylindersymmetrischen Quantenpunkten reduzierte Symmetrie ist in diesem Fall eine exakte Reduktion auf eine zweidimensionale Schrödingergleichung nicht mehr möglich. Für flache Quantenpunkte kann man jedoch wieder die adiabatische Näherung, welche sich in Kapitel 3 bewährt hat, anwenden. Dadurch lässt sich das Problem auf eine effektiv zweidimensionale Schrödingergleichung reduzieren. Nachdem die Details dieser Reduktion in Abschnitt 4.2 dargelegt wurden, behandelt Abschnitt 4.3 die Diskretisierung des zweidimensionalen Hamiltonoperators. Auch hier muss wieder besonderes Augenmerk auf die verwendeten Randbedingungen gelegt werden. In Teil 4.4 werden schließlich die Ergebnisse präsentiert und diskutiert. Insbesondere werden die Wellenfunktionen und Energiespektren mit denen zweidimensionaler anisotroper harmonischer Oszillatoren verglichen.

Ein zusammenfassender Ausblick in Kapitel 5 rundet den Hauptteil der Arbeit ab. In Anhang A wird die für Kapitel 3 und 4 benötigte Lösung der Schrödingergleichung eines Teilchens in einem endlich tiefen Potentialtopf behandelt. In Anhang B findet man schließlich eine detaillierte Erläuterung zur Berechnung der Coulomb-Matrixelemente von Quantenpunkten mit harmonischem Einschlusspotential anhand eines expliziten Beispiels.

1 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel stellen wir die nötigen Grundlagen zur Berechnung und zur Analyse der Eigenwertspektren und Eigenzustände wechselwirkender Vielteilchen-Systeme zusammen. Zunächst stellen wir die Envelope-Näherung in Abschnitt 1.1 vor. Danach formulieren wir den Hamiltonoperator des wechselwirkenden Systems bestehend aus Elektronen und Löchern in Abschnitt 1.2 und den Hamiltonoperator der Licht-Materie-Wechselwirkung in Abschnitt 1.3. Das Aufstellen der Hamiltonoperatoren geschieht in zweiter Quantisierung und Envelope-Näherung. In den beiden anschließenden Kapiteln geht es dann um die Klassifizierung der Vielteilchen-Zustände und darum welche Rolle der Spin bei der energetischen Entartung der Vielteilchen-Zustände spielt. Kapitel 1.6 ist für uns von zentraler Bedeutung, da hier die Methode der exakten Diagonalisierung vorgestellt wird. Diese Methode erlaubt uns die Vielteilchen-Eigenzustände des wechselwirkenden Systems zu berechnen und darauf aufbauend die optischen Spektren zu ermitteln. Die Vorgehensweise zur Berechnung der Spektren erläutern wir in Abschnitt 1.7. Zum Schluss stellen wir in Teil 1.8 eine Summenregel für die Oszillatorstärken, welche die optischen Übergänge beschreiben, vor.

1.1 Envelope-Näherung

Um die Einteilchen-Eigenzustände in einem Quantenpunkt zu berechnen, müsste man im Prinzip die Einteilchen-Schrödingergleichung im vollen Potential, d.h. im Potential aller den Kristall bildenden Atomrümpfe lösen. Da dies im Allgemeinen nicht möglich ist, muss man geeignete Näherungen vornehmen. Die einfachste und häufigst verwendete ist die sogenannte *Envelope-Näherung* (siehe z.B. [15]), die im Folgenden kurz vorgestellt wird.

Im Volumenkristall wird die Berechnung der Energieniveaus durch die Translationssymmetrie des Kristalls (ausgedrückt durch das Translationsgitter \mathcal{T}) erheblich vereinfacht. In diesem Fall kann nämlich das Bloch-Theorem ausgenutzt werden, welches besagt, dass sich die Wellenfunktion als ein Produkt aus einer gitterperiodischen Funktion $u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$ (der sogenannten Blochfunktion) und einer ebenen Welle $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ schreiben lässt:

$$\psi_{\mathbf{k},\lambda,\sigma}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \chi_{\sigma} \quad \text{mit} \quad u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \quad \text{falls} \quad \mathbf{R} \in \mathcal{T} \quad (\text{Bloch-Theorem}). \quad (1.1)$$

Das zusätzliche Abseparieren der Spin-Funktion χ_{σ} gelingt, wenn das Einteilchen-Potential als spinunabhängig angenommen wird.

Aufgrund der Tatsache, dass die Wellenvektoren, die typischerweise für die Optik von Interesse sind, klein gegenüber der inversen Gitterkonstante sind, ändert sich die ebene Welle aus Gleichung (1.1) nur langsam über einer Gitterzelle. Deshalb kann sie auch als Einhüllende (engl. *envelope*) der vergleichsweise schnell oszillierenden Blochfunktion interpretiert werden.

Da die Translationssymmetrie des Volumenkristalls durch die Existenz des Quantenpunktes zerstört wird, ist das Bloch-Theorem nicht mehr anwendbar. In der Envelope-Näherung geht man nun aber davon aus, dass sich die volle Wellenfunktion $\psi_{n,\lambda,\sigma}(\mathbf{r})$ eines Teilchens im Quantenpunkt dennoch durch ein Produkt aus einem gitterperiodischen¹ Anteil $u_{\lambda}(\mathbf{r})$ und

¹ Da die Existenz des Quantenpunktes in dem Kristallgitter natürlich die diskrete Translationssymmetrie zerstört, ist das Translationsgitter \mathcal{T} streng genommen auch nicht mehr definiert. Dennoch verwendet man im Rahmen der Envelope-Näherung an dieser Stelle das Translationsgitter des idealen Kristalls und steckt die Abweichungen davon sozusagen in das effektive Potential, welches die Envelope-Funktion spürt.

einer sich nur langsam über den Gitterzellen ändernden Funktion $\xi_{n,\lambda,\sigma}(\mathbf{r})$, der Einhüllenden, annähern lässt:

$$\psi_{n,\lambda,\sigma}(\mathbf{r}) = \xi_{n,\lambda}(\mathbf{r}) u_{\lambda}(\mathbf{r}) \chi_{\sigma} \quad \text{mit} \quad u_{\lambda}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\lambda}(\mathbf{r}) \quad \text{falls} \quad \mathbf{R} \in \mathcal{T}$$

(Envelope-Näherung). (1.2)

Weiterhin nimmt man an, dass die in Gleichung (1.2) vorkommende gitterperiodische Funktion $u_{\lambda}(\mathbf{r})$ durch die aus dem Volumenkristall bekannte Blochfunktion $u_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{r})$ für $\mathbf{k} = 0$ gegeben ist. Die Einhüllende $\xi_{n,\sigma,\lambda}(\mathbf{r})$ genügt dann einer Einteilchen-Schrödingergleichung in Effektivmassennäherung in einem effektiven, sich nur langsam über einer Gitterzelle verändernden Einschlusspotential.

1.2 Vielteilchen-Hamiltonoperator

Nachdem wir die Envelope-Näherung erläutert haben, müssen wir uns Gedanken darüber machen, wie der Vielteilchen-Hamiltonoperator in dieser Näherung aussieht.

Den nicht-wechselwirkenden Anteil können wir sofort im Elektron-Loch-Bild angeben:

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i^e e_{i\sigma}^\dagger e_{i\sigma} + \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i^h h_{i\sigma}^\dagger h_{i\sigma} \quad . \quad (1.3)$$

Die $e_{i\sigma}^\dagger(e_{i\sigma})$ erzeugen (vernichten) ein Elektron im Einteilchen-Zustand $\psi_{i,\sigma}^e(\mathbf{r})$ im Leitungsband. Analog erzeugen (vernichten) die $h_{i\sigma}^\dagger(h_{i\sigma})$ ein Loch im Einteilchen-Zustand $\psi_{i,\sigma}^h(\mathbf{r})$ im Valenzband. Die $\varepsilon_i^{e(h)}$ bezeichnen die Einteilchen-Energien der Elektronen (Löcher). Sie tragen keinen Spinindex, da das Einteilchen-Potential als spinunabhängig angenommen wird.

Um den Wechselwirkungsanteil zu beschreiben, starten wir zunächst vom sogenannten *cv*-Bild, d.h. wir verwenden Valenz- und Leitungsbandelektronen, und gehen dann zum Elektron-Loch-Bild über. Der Hamiltonoperator der Coulomb-Wechselwirkung lautet in zweiter Quantisierung:

$$\mathbf{H}_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad . \quad (1.4)$$

Dabei bezeichnet $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ das Coulomb-Potential, ϵ_r die Dielektrizitätskonstante des Halbleitermaterials und die $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ sind die Feldoperatoren.

Entwickelt man nun die in Gleichung (1.4) enthaltenen Feldoperatoren $\hat{\psi}$ und $\hat{\psi}^\dagger$ nach der Einteilchen-Basis $\{\psi_{\tilde{i}}(\mathbf{r})\}_{\tilde{i}}$ in Envelope-Näherung und im *cv*-Bild unter Verwendung eines Indexes $\tilde{i} = [i, \lambda_i, \sigma_i]$ für Zustands-, Band- und Spinindex,

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{\tilde{i}} a_{\tilde{i}} \psi_{\tilde{i}}(\mathbf{r}) , \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\tilde{i}} a_{\tilde{i}}^\dagger \psi_{\tilde{i}}^*(\mathbf{r}) , \end{aligned}$$

und setzt diese Entwicklung in Gleichung (1.4) ein, so erhält man

$$\mathbf{H}_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \sum_{\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{k}\tilde{l}} V_{\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{k}\tilde{l}} a_{\tilde{i}}^\dagger a_{\tilde{j}}^\dagger a_{\tilde{k}} a_{\tilde{l}} \quad . \quad (1.5)$$

Hierbei sind die Coulomb-Matrixelemente als

$$V_{\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{k}\tilde{l}} := \int d^3r \int d^3r' \psi_{\tilde{i}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\tilde{j}}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\tilde{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\tilde{l}}(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

definiert und können unter Verwendung der Envelope-Näherung $\psi_{\tilde{i}}(\mathbf{r}) = \xi_{\tilde{i}}(\mathbf{r})u_{\lambda_i}(\mathbf{r})$ wie folgt vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} V_{\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{k}\tilde{l}} &= \int d^3r \int d^3r' \xi_{\tilde{i}}^*(\mathbf{r})u_{\lambda_i}^*(\mathbf{r})\xi_{\tilde{j}}^*(\mathbf{r}')u_{\lambda_j}^*(\mathbf{r}')V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\xi_{\tilde{k}}(\mathbf{r}')u_{\lambda_k}(\mathbf{r}')\xi_{\tilde{l}}(\mathbf{r})u_{\lambda_l}(\mathbf{r}) \\ &\approx \sum_{\mathbf{R}_i} \sum_{\mathbf{R}'_i} V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}'_i) \xi_{\tilde{i}}^*(\mathbf{R}_i) \xi_{\tilde{j}}^*(\mathbf{R}'_i) \xi_{\tilde{k}}(\mathbf{R}'_i) \xi_{\tilde{l}}(\mathbf{R}_i) \\ &\quad \times V_{\text{EZ}} \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{V_{\text{EZ}}} d^3r u_{\lambda_i}^*(\mathbf{r})u_{\lambda_l}(\mathbf{r}) V_{\text{EZ}} \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{V_{\text{EZ}}} d^3r' u_{\lambda_j}^*(\mathbf{r}')u_{\lambda_k}(\mathbf{r}') \\ &\approx \delta_{\lambda_i \lambda_l} \delta_{\lambda_j \lambda_k} \int d^3r \int d^3r' \xi_{\tilde{i}}^*(\mathbf{r})\xi_{\tilde{j}}^*(\mathbf{r}')V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\xi_{\tilde{k}}(\mathbf{r}')\xi_{\tilde{l}}(\mathbf{r}) . \end{aligned}$$

Von der ersten zur zweiten Zeile gelangt man, indem man das Integral über den ganzen Raum in eine Summe von Integralen über die Elementarzellen (EZ) mit den Zentren \mathbf{R}_i zerlegt, dann die Gitterperiodizität von $u_{\lambda}(\mathbf{r})$ ausnutzt und annimmt, dass sich sowohl die Einhüllenden $\xi_{\tilde{i}}(\mathbf{r})$ als auch die Coulomb-Wechselwirkung $V(\mathbf{r})$ nur langsam über einer Gitterzelle des Kristalls ändern. Nutzt man nun noch die Orthogonalität der Blochfunktionen zu fester Wellenzahl

$$\frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{V_{\text{EZ}}} d^3r u_{\mathbf{k},\lambda}^*(\mathbf{r})u_{\mathbf{k}',\lambda'}(\mathbf{r}) = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (1.7)$$

aus und nähert die Summation über die Gitterzellen wiederum durch ein Integral an, gelangt man zu der letzten Zeile.

Da die Coulomb-Wechselwirkung keine Spinabhängigkeit enthält, vereinfacht sich der Ausdruck für die Coulomb-Matrixelemente weiter zu:

$$\begin{aligned} V_{\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{k}\tilde{l}} &\approx \delta_{\lambda_i \lambda_l} \delta_{\lambda_j \lambda_k} \delta_{\sigma_i \sigma_l} \delta_{\sigma_j \sigma_k} \\ &\int d^3r \int d^3r' \xi_{\tilde{i}, \lambda_i}^*(\mathbf{r})\xi_{\tilde{j}, \lambda_j}^*(\mathbf{r}')V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\xi_{\tilde{k}, \lambda_k}(\mathbf{r}')\xi_{\tilde{l}, \lambda_l}(\mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (1.8)$$

Aufgrund der Kronecker-Deltas in Gleichung (1.8), lässt sich die Summe (1.5) deutlich vereinfachen. Geht man nun noch zum Elektron-Loch-Bild über, d.h. macht man die Transformation

$$\begin{pmatrix} a_{i,c,\sigma} \\ a_{i,c,\sigma}^\dagger \\ a_{i,v,\sigma} \\ a_{i,v,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} e_{i,\sigma} \\ e_{i,\sigma}^\dagger \\ h_{i,-\sigma}^\dagger \\ h_{i,-\sigma} \end{pmatrix} , \quad (1.9)$$

so gelangt man schließlich zu

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{WW}} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} \tilde{V}_{ij,kl}^{ee} e_{i\sigma}^\dagger e_{j\sigma'}^\dagger e_{k\sigma'} e_{l\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} [\tilde{V}_{ij,kl}^{hh}]^* h_{i\sigma}^\dagger h_{j\sigma'}^\dagger h_{k\sigma'} h_{l\sigma} \\ &\quad - \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} [\tilde{V}_{ik,jl}^{he}]^* h_{i\sigma}^\dagger e_{j\sigma'}^\dagger e_{k\sigma'} h_{l\sigma} . \end{aligned} \quad (1.10)$$

Hierbei wurden noch die reduzierten Coulomb-Matrixelemente

$$\tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} := \int d^3r \int d^3r' \xi_{i,\lambda}^*(\mathbf{r}) \xi_{j,\lambda'}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \xi_{k,\lambda'}(\mathbf{r}') \xi_{l,\lambda}(\mathbf{r}) , \quad (1.11)$$

die nur vom Zustandsindex und dem Bandindex abhängen, definiert und deren wichtige Symmetrieeigenschaften

$$\tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \left(\tilde{V}_{kl,ij}^{\lambda'\lambda} \right)^* \quad \text{und} \quad \tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \tilde{V}_{ji,lk}^{\lambda'\lambda} \quad (1.12)$$

verwendet, welche unter Verwendung von $V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ und durch komplexes Konjugieren sofort aus der Definitionsgleichung (1.11) folgen. Weiterhin wurden alle Einteilchen-Beiträge, welche durch das Permutieren der Erzeuger und Vernichter 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 Bandstrukturechnung und den damit ermittelten effektiven Massen – zumindest zu einem gewissen Grade – berücksichtigt ist. Auch bei der experimentellen Bestimmung der effektiven Masse der Löcher und Elektronen wird diese natürlich – notgedrungen – stets unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit den Valenzbandelektronen ermittelt und muss deshalb nicht noch einmal durch einen von der Coulomb-Wechselwirkung abhängigen Einteilchenanteil berücksichtigt werden.

Insgesamt erhält man also:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i^e e_{i,\sigma}^\dagger e_{i,\sigma} + \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i^h h_{i,\sigma}^\dagger h_{i,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} \tilde{V}_{ij,kl}^{ee} e_{i\sigma}^\dagger e_{j\sigma'}^\dagger e_{k\sigma'} e_{l\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} \left[\tilde{V}_{ij,kl}^{hh} \right]^* h_{i\sigma}^\dagger h_{j\sigma'}^\dagger h_{k\sigma'} h_{l\sigma} - \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} \left[\tilde{V}_{ik,jl}^{he} \right]^* h_{i\sigma}^\dagger e_{j\sigma'}^\dagger e_{k\sigma'} h_{l\sigma} . \end{aligned}$$

Das negative Vorzeichen des letzten Terms stammt von der attraktiven Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern. (Man beachte auch die besondere Reihenfolge der Indices der Wechselwirkungs-Matrixelemente in diesem Term.)

Obwohl die prinzipielle Struktur der Coulomb-Matrixelemente (1.11) relativ einfach ist, ist die explizite Berechnung dieser Ausdrücke im Allgemeinen sehr aufwendig, da es sich um ein sechsfaches Integral handelt, welches auch noch eine Singularität für $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ enthält. Die explizite Berechnung der Coulomb-Matrixelemente erfolgt im Falle des harmonischen Einschlusspotentials in Abschnitt 2.3.

Um die Notation etwas zu vereinfachen, verwenden wir im Folgenden zumeist einen Index i , welcher sowohl den Zustandsindex, der die Eigenzustände des Quantenpunktes nummeriert, als auch den Spinindex enthält, und verwenden Coulomb-Matrixelemente, die wie folgt definiert sind:

$$V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} := \delta_{\sigma_i\sigma_l} \delta_{\sigma_j\sigma_k} \tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} . \quad (1.13)$$

In dieser Notation lautet der Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \sum_i \varepsilon_i^e e_i^\dagger e_i + \sum_i \varepsilon_i^h h_i^\dagger h_i \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \left\{ V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l + \left[V_{ij,kl}^{hh} \right]^* h_i^\dagger h_j^\dagger h_k h_l - 2 \left[V_{ik,jl}^{he} \right]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l \right\} . \end{aligned} \quad (1.14)$$

1.3 Wechselwirkung mit einem Lichtfeld

Nachdem wir uns in den vorangegangenen Abschnitten mit der Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander beschäftigt haben, stellen wir in diesem Abschnitt den Hamiltonoperator auf, welcher die Wechselwirkung der Ladungsträger mit einem (klassischen) Lichtfeld beschreibt.

Um die Wechselwirkung mit einem Lichtfeld zu beschreiben, verwenden wir die Dipolnäherung und nehmen an, dass die optischen Felder räumlich homogen sind. Wenn man bedenkt, dass die Wellenlänge im sichtbaren Bereich sehr groß gegenüber der typischen Ausdehnung eines Quantenpunktes ist, so stellt diese Näherung keine allzu starke Approximation dar. In zweiter Quantisierung lautet der Hamiltonoperator der Licht-Materie-Wechselwirkung in Dipolnäherung und unter Verwendung des Indexes $\tilde{i} = [i, \lambda_i, \sigma_i]$ im *cv*-Bild:

$$\mathbf{H}_D = \mathbf{E} \sum_{\tilde{i}\tilde{j}} \langle \tilde{i} | (-e\mathbf{r}) | \tilde{j} \rangle a_i^\dagger a_j \quad . \quad (1.15)$$

In Envelope-Näherung können wir die Matrixelemente $\langle \tilde{i} | (-e\mathbf{r}) | \tilde{j} \rangle$ nun weiter auswerten:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{i} | (-e\mathbf{r}) | \tilde{j} \rangle &= \int d^3r \xi_i^*(\mathbf{r}) u_{\lambda_i}^*(\mathbf{r}) (-e\mathbf{r}) \xi_j(\mathbf{r}) u_{\lambda_j}(\mathbf{r}) \\ &= \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \sum_{\mathbf{R}_i} \int_{V_{EZ}} d^3r \xi_{i, \lambda_i}^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) u_{\lambda_i}^*(\mathbf{r}) (-e) [\mathbf{r} + \mathbf{R}_i] \xi_{j, \lambda_j}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) u_{\lambda_j}(\mathbf{r}) \\ &\approx \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \sum_{\mathbf{R}_i} \xi_{i, \lambda_i}^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) \xi_{j, \lambda_j}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) V_{EZ} \\ &\quad \times \left[\underbrace{\frac{1}{V_{EZ}} \int_{V_{EZ}} d^3r u_{\lambda_i}^*(\mathbf{r}) (-e\mathbf{r}) u_{\lambda_j}(\mathbf{r})}_{=:\mathbf{d}_{\lambda_i, \lambda_j}} + \underbrace{\frac{1}{V_{EZ}} (-e\mathbf{R}_i) \int_{V_{EZ}} d^3r u_{\lambda_i}^*(\mathbf{r}) u_{\lambda_j}(\mathbf{r})}_{=-e\mathbf{R}_i \delta_{\lambda_i, \lambda_j}} \right] \\ &\approx \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \mathbf{d}_{\lambda_i, \lambda_j} \int d^3r \xi_{i, \lambda_i}^*(\mathbf{r}) \xi_{j, \lambda_j}(\mathbf{r}) + \text{Intrabandbeiträge} \quad . \end{aligned}$$

Im ersten Schritt wurde die Integration über den ganzen Raum in eine Summe über die einzelnen Elementarzellen zerlegt und die Periodizität der Blochfaktoren verwendet. Weiterhin wurde ausgenutzt, dass man aufgrund der Spinunabhängigkeit des Einteilchen-Potentials die Einteilchen-Zustände als Spineigenzustände wählen kann. Im nächsten Schritt nimmt man an, dass sich die Envelopefunktionen nur langsam über einer Gitterzelle ändern, so dass man die Envelope-Funktionen in jeder Gitterzelle vor das Integral ziehen kann. Der zweite Term in den eckigen Klammern liefert dann aufgrund der Orthogonalitätsbeziehung der Blochfunktionen ein Kronecker-Delta. Somit beschreibt dieser Term *Intrabandübergänge*, die wir im Folgenden vernachlässigen wollen, da sie nur Beiträge zum Infrarotspektrum liefern, wir aber an den optischen Eigenschaften im sichtbaren Bereich des Spektrums interessiert sind. Der erste Term in den eckigen Klammern liefert den Ausdruck $\mathbf{d}_{\lambda_i, \lambda_j}$. Für $\lambda_i = \lambda_j$ ist dieser Beitrag vernachlässigbar, da $u_c(r)$ meist s-artig und $u_v(r)$ meist p-artig ist und damit der Gesamtintegrand für $\lambda_i = \lambda_j$ in guter Näherung ungerade ist [10]. Somit verschwindet das Integral über diese Funktion näherungsweise. Das bedeutet, dass der erste Term der eckigen Klammer im Wesentlichen die für uns interessanten *Interbandübergänge* beschreibt. Das Dipolelement $\mathbf{d}_{\lambda_i, \lambda_j}$ ist in Envelope-Näherung nur durch die Struktur des Volumenkristalls bestimmt und die entsprechenden Werte können der Literatur entnommen werden.

Nach dieser Auswertung der Dipolmatrixelemente kann man schließlich für den Hamiltonoperator der Licht-Materie-Wechselwirkung den folgenden Näherungsausdruck aufstellen:

$$\mathbf{H}_D \approx \sum_{i,j,\sigma} (\mathbf{E} \mathbf{d}_{cv}) P_{ij} c_{i\sigma}^\dagger v_{j\sigma} + \text{h.c.} \quad \text{mit} \quad P_{ij} = \int d^3r \xi_i^{c*}(\mathbf{r}) \xi_j^v(\mathbf{r}) . \quad (1.16)$$

Falls Elektron- und Lochwellenfunktion identisch sind und diese orthonormalisiert wurden, ergibt sich daraus

$$\mathbf{H}_D = \sum_{i\sigma} (\mathbf{E} \mathbf{d}_{cv}) c_{i\sigma}^\dagger v_{i\sigma} + \text{h.c.} . \quad (1.17)$$

Anschaulich bedeutet dies, dass das elektromagnetische Feld ein Elektron im Valenzband im Einteilchen-Zustand $|i\rangle$ vernichtet (bzw. erzeugt), und dass dafür ein Elektron im Leitungsband in dem selben Zustand erzeugt (bzw. vernichtet) wird.

Durch den Übergang ins Elektron-Loch-Bild erhält man

$$\mathbf{H}_D = \sum_{i,\sigma} (\mathbf{E} \mathbf{d}_{cv}) e_{i,\sigma}^\dagger h_{i,-\sigma}^\dagger + \text{h.c.} , \quad (1.18)$$

d.h. durch das elektromagnetische Feld werden Elektron-Loch-Paare mit verschwindender z -Komponente des Gesamtspins erzeugt bzw. vernichtet. Falls die Einteilchen-Zustände $|i\rangle$ auch Drehimpulseigenzustände sind, verschwindet auch die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses dieser Elektron-Loch-Paare. (Vernichtet man ein Valenzelektron im Einteilchen-Zustand $|i\rangle$, d.h. mit der z -Komponente des Drehimpulses m_i und des Spins σ_i , so ist dies äquivalent zur Erzeugung eines Lochs mit Drehimpuls $-m_i$ und Spin $-\sigma_i$.)

Mit dem Hamiltonoperator (1.16) bzw. dem um den Faktor $(\mathbf{E} \mathbf{d}_{cv})$ reduzierten Interband-Polarisations-Operator $\mathcal{P} = \sum_{ij} (P_{ij} e_i^\dagger h_j^\dagger + \text{h.c.})$ werden in Kapitel 1.7 unter Verwendung Fermi's goldener Regel optische Spektren ermittelt.

1.4 Klassifizierung der Vielteilchen-Eigenzustände

Nachdem wir in Abschnitt 1.2 den allgemeinen Hamiltonoperator der Elektronen und Löcher in Envelope-Näherung aufgestellt haben, untersuchen wir in diesem Abschnitt durch welche Quantenzahlen die wechselwirkenden Vielteilchen-Zustände klassifiziert werden können. Es zeigt sich, dass die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses und sowohl der Gesamtspin der Elektronen als auch der der Löcher gute Quantenzahlen darstellen. Nach der allgemeinen Diskussion der Quantenzahlen erläutern wir kurz wie sich die Klassifizierung der Zustände praktisch umsetzen lässt. Diese Klassifizierung wird uns zum einen das Aufstellen der für die exakte Diagonalisierung benötigten Hamilton'schen Matrix erleichtern und zum anderen wird sie bei der Interpretation der Spektren hilfreich sein.

Um zu der gewünschten Klassifizierung zu gelangen, zerlegen wir den Hamiltonoperator (1.14) des Vielteilchensystems zunächst in den freien Anteil

$$\mathbf{H}_0 = \sum_i \varepsilon_i^e e_i^\dagger e_i + \sum_i \varepsilon_i^h h_i^\dagger h_i , \quad (1.19)$$

der in erster Quantisierung der Summe der Einteilchen-Hamiltonoperatoren der N_e Elektronen und N_h Löcher entspricht, und den wechselwirkenden Anteil

$$\mathbf{H}_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \left\{ V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l + [V_{ij,kl}^{hh}]^* h_i^\dagger h_j^\dagger h_k h_l - 2 [V_{ik,jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l \right\}, \quad (1.20)$$

der die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen und Löcher in Envelope-Näherung beschreibt.

Drehimpuls-Quantenzahl

Wenden wir uns zunächst der Drehimpulsquantenzahl zu: Wenn das Einteilchen-Potential $V_\lambda(\mathbf{r})$ ($\lambda \in \{e, h\}$) für die Elektronen und Löcher rotationssymmetrisch um die z -Achse ist, gilt in erster Quantisierung

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_\lambda} + V_\lambda(\mathbf{r}), l_z^\lambda \right] = 0. \quad (1.21)$$

Somit kann man die Einteilchen-Zustände nach der z -Komponente des Drehimpulses klassifizieren. Ausgehend von diesem Kommutator für die Einteilchen-Operatoren in erster Quantisierung ergibt sich dann in zweiter Quantisierung sofort:

$$\left[\mathbf{H}_0, l_z^{\text{ges},\lambda} \right] = 0. \quad (1.22)$$

Das Verschwinden dieses Kommutators in zweiter Quantisierung bedeutet aber nichts anderes, als dass man die Vielteilchen-Eigenzustände von \mathbf{H}_0 nach der z -Komponente des Gesamtdrehimpulses sowohl der Elektronen als auch der Löcher klassifizieren kann. Für den wechselwirkenden Anteil ist dies leider nicht mehr möglich: Hier ist nämlich nur noch die Summe der z -Komponenten der Loch- und Elektron-Gesamtdrehimpulse eine gute Quantenzahl. Dies ist der Fall, da zwar

$$\left[l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}, \mathbf{H}_{\text{WW}} \right] = 0 \quad (1.23)$$

gilt, aber $\left[l_z^{\text{ges},\lambda}, \mathbf{H}_{\text{WW}} \right] \neq 0$ ist. Die Gesamtdrehimpulskomponenten der Elektronen und Löcher stellen einzeln keine gute Quantenzahl mehr dar, weil die Elektronen und Löcher durch die Coulomb-Wechselwirkung gekoppelt werden. Dass der Kommutator (1.23) in der Tat verschwindet, überlegt man sich leicht in erster Quantisierung. Dabei zeigt sich dann, dass die Operatoren vertauschen, da die Coulomb-Wechselwirkung nur von dem Differenzbetrag der Orte, an welchen sich die Elektronen und/oder die Löcher befinden, abhängt.

Man kann sich natürlich auch in zweiter Quantisierung von der Gültigkeit der Gleichung (1.23) überzeugen und damit sicher gehen, dass die Envelope-Näherung diese Rotationssymmetrie nicht zerstört hat.² In Abschnitt 2.3 wird gezeigt, dass für zylindersymmetrische Potentiale $V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} \propto \delta_{m_i+m_j, m_k+m_l}$ ist. Hierbei bezeichnet m_i die z -Komponente des Drehimpulses des Einteilchen-Zustandes $\psi_i(\mathbf{r})$. Aufgrund dieses Kronecker-Deltas in den Drehimpulsquantenzahlen haben die Paare von Elektronen, die von dem ersten Summanden aus Gleichung (1.20) erzeugt werden, denselben Drehimpuls wie jene, die vernichtet werden. Insgesamt wird also die z -Komponente des Drehimpulses durch den ersten Summanden nicht geändert. Die gleiche Argumentation lässt sich für den zweiten Summanden anführen. Im dritten Summanden müssen wir den Ausdruck $[V_{ik,jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l$, der proportional zu $\delta_{m_j-m_i, m_k-m_l} h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l$ ist, näher betrachten. Da sich der Drehimpuls der Elektronen und Löcher in gleichem Bahnzustand gerade in dem Vorzeichen unterscheidet $[l_z^e \psi_i^e(\mathbf{r}) = \hbar m_i \psi_i^e(\mathbf{r}) \Rightarrow l_z^h \psi_i^h(\mathbf{r}) = -\hbar m_i \psi_i^h(\mathbf{r})]$, erzeugt und vernichtet der dritte Summand Elektron-Loch-Paare ohne dabei die Summe der

² Dass die Envelope-Näherung die Symmetrie des Hamiltonoperators tatsächlich ändern kann, werden wir im Falle der Spins sehen.

z -Komponenten des Gesamtdrehimpulses der Elektronen und Löcher zu ändern. (Zu einer Änderung der z -Komponente des Elektronen- oder des Löcher-Gesamtdrehimpulses kann es dabei sehr wohl kommen, jedoch die Summe beider wird nicht geändert.)

Alles in allem erhält man also

$$\left[l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}, \mathbf{H} \right] = 0 . \quad (1.24)$$

Somit kann man die Vielteilchen-Eigenfunktionen des Elektron-Loch-Systems in einem um die z -Achse rotationssymmetrischen Quantenpunkt nach den Eigenwerten des Drehimpulsoperators $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$ klassifizieren.

Spin-Quantenzahlen

Kommen wir nun zum Spin als Quantenzahl. Indem man die Spinoperatoren für die Elektronen und Löcher in zweiter Quantisierung ausdrückt, gelangt man durch eine etwas mühsame, aber elementare Rechnung zu

$$\left[S_i^{\text{ges},\lambda}, \mathbf{H} \right] = 0 \quad \text{mit } i \in \{x, y, z\} \quad \text{und } \lambda \in \{e, h\} . \quad (1.25)$$

Zumindest für die z -Komponente des Gesamtspins kann man sich das Verschwinden des Kommutators leicht verständlich machen: Da $V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} \propto \delta_{\sigma_i,\sigma_l} \delta_{\sigma_j,\sigma_k}$ gilt, wird in jedem einzelnen Summanden von (1.20) für jedes Elektron (Loch), welches vernichtet wird, ein Elektron (Loch) in gleichem Spinzustand erzeugt. Dies bedeutet, dass sich die z -Komponente des Gesamtspins in keinem der beiden Bänder ändert.

In Gleichung (1.25) zeigt sich, dass die Verwendung der Envelope-Näherung die Symmetrie des Hamiltonoperators ändert. Dies ist der Fall, da die Elektron-Loch-Austauschterme in dieser Näherung verschwinden (vgl. Abschnitt 2.7.4). Die Berücksichtigung dieser Terme führt aber dazu, dass z.B. $S_z^{\text{ges},h}$ und $S_z^{\text{ges},e}$ einzeln *keine* guten Quantenzahlen mehr sind, sondern nur noch die Summe dieser beiden Terme.

Da die $S_i^{\text{ges},e}$ und $S_i^{\text{ges},h}$ auf verschiedene Freiheitsgrade der Vielteilchenzustände wirken und auch der Bahndrehimpuls mit den Spinoperatoren vertauscht, zeigt sich, dass die Elemente der Menge

$$\left\{ \mathbf{H}, l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}, (\mathbf{S}^{\text{ges},e})^2, S_z^{\text{ges},e}, (\mathbf{S}^{\text{ges},h})^2, S_z^{\text{ges},h} \right\} \quad (1.26)$$

alle miteinander kommutieren. Dies hat zur Folge, dass die Vielteilchen-Eigenzustände des Elektron-Loch-Systems durch die z -Komponenten des Gesamtdrehimpulses der Elektronen und Löcher sowie durch die z -Komponente und das Quadrat des Gesamtspins sowohl der Elektronen als auch der Löcher klassifiziert werden können.

Anwendung

Wenn man die Einteilchen-Eigenzustände als Eigenfunktionen von l_z und S_z wählt, kann man auch die unkorrelierten Vielteilchen-Basiszustände aus Gleichung (1.31) sehr einfach durch $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$, $S_z^{\text{ges},e}$ und $S_z^{\text{ges},h}$ klassifizieren. Die einfache Klassifizierung ist möglich, da sich die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses (Gesamtspins) einfach aus der Summe der z -Komponenten der Drehimpulse (Spins) aller besetzten Zustände ergibt. Die Klassifizierung nach den Betragsquadraten $(\mathbf{S}^{\text{ges},e})^2$ und $(\mathbf{S}^{\text{ges},h})^2$ ist viel aufwendiger, und wird deshalb nicht durchgeführt.

Die Klassifikation der Vielteilchen-Basis vereinfacht das Aufstellen der Hamilton'schen Matrix erheblich und erlaubt dann auch die Vielteilchen-Eigenzustände nach Bahndrehimpuls und

Spin zu klassifizieren: Da die Matrixelemente $\langle \phi_i | \mathbf{H} | \phi_j \rangle$ identisch Null sind, wenn sich die Vielteilchen-Zustände $|\phi_i\rangle$ und $|\phi_j\rangle$ in einer der Quantenzahlen $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$, $S_z^{\text{ges},e}$ oder $S_z^{\text{ges},h}$ unterscheiden,³ gelingt es die Hamilton'sche Matrix auf Blockgestalt zu bringen, indem man die Vielteilchen-Basis so sortiert, dass die Zustände mit konstanter Quantenzahl $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$, $S_z^{\text{ges},e}$ und $S_z^{\text{ges},h}$ aufeinanderfolgen.

Um die Gesamtmatrix zu diagonalisieren, muss man jetzt nur noch die einzelnen Blöcke diagonalisieren, was zwei Vorteile mit sich bringt: Erstens ist der Rechenaufwand für die kleineren Blöcke erheblich geringer und zweitens sind die Eigenvektoren auf diese Weise bereits durch $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$, $S_z^{\text{ges},e}$ und $S_z^{\text{ges},h}$ klassifiziert. Letzteres liegt daran, dass sich die Eigenzustände eines Blocks als Linearkombinationen der in diesem Block zusammengefassten Zustände ergeben. Somit bleiben die Eigenzustände des Blocks immer noch Eigenzustände von $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$, $S_z^{\text{ges},e}$ und $S_z^{\text{ges},h}$.

Mit Hilfe dieser Klassifikation der Eigenzustände des Hamiltonoperators wird es gelingen sowohl die Energie- als auch die Absorptions- und Emissionsspektren der Quantenpunkte genauer zu verstehen (s. Abschnitt 2.4).

1.5 Spin-Entartung

Im vorliegenden Abschnitt geht es darum die durch den Spin der Elektronen und Löcher verursachte Energieentartung zu verstehen. Insbesondere klären wir, wie hoch der durch den Spin bedingte Entartungsgrad der Energieniveaus in Abhängigkeit von der Anzahl der in dem Quantenpunkt vorhandenen Elektron-Loch-Paare ist.

Wie bereits im Abschnitt 1.4 über die Klassifizierung der Zustände ausgeführt, gilt

$$\left[S_i^{\text{ges},\lambda}, \mathbf{H} \right] = 0 \quad \text{mit } i \in \{x, y, z\} \quad \text{und } \lambda \in \{e, h\}. \quad (1.27)$$

Da sowohl der Gesamtspin der Elektronen als auch der der Löcher die Drehimpuls-Algebra

$$\left[S_i^{\text{ges},\lambda}, S_j^{\text{ges},\lambda} \right] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} S_k^{\text{ges},\lambda}$$

erfüllt, kann man die Leiteroperatoren

$$S_{\pm}^{\text{ges},\lambda} := S_x^{\text{ges},\lambda} \pm i S_y^{\text{ges},\lambda}$$

eingeführen. Durch Anwendung der Leiteroperatoren auf einen Spin-Eigenzustand mit Spinbetragsquadrat $\hbar^2 s_{\lambda}(s_{\lambda} + 1)$ und z -Komponente $\hbar s_z^{\lambda}$ wird entweder ein Zustand mit gleichem Betragsquadrat aber erhöhter bzw. erniedrigter Spin- z -Komponente erzeugt oder, falls dies nicht mehr möglich ist, liegt das Resultat außerhalb des Hilbertraumes. In Formeln ausgedrückt gilt

$$\begin{aligned} S_z^{\text{ges},\lambda} \left(S_{\pm}^{\text{ges},\lambda} | \dots, s_{\lambda}, s_z^{\lambda}, \dots \rangle \right) &= (s_z^{\lambda} \pm 1) \hbar \left(S_{\pm}^{\text{ges},\lambda} | \dots, s_{\lambda}, s_z^{\lambda}, \dots \rangle \right) \\ (\mathbf{S}^{\text{ges},\lambda})^2 \left(S_{\pm}^{\text{ges},\lambda} | \dots, s_{\lambda}, s_z^{\lambda}, \dots \rangle \right) &= s_{\lambda}(s_{\lambda} + 1) \hbar^2 \left(S_{\pm}^{\text{ges},\lambda} | \dots, s_{\lambda}, s_z^{\lambda}, \dots \rangle \right), \end{aligned} \quad (1.28)$$

³ Nimmt man z.B. an, dass die Zustände $|\phi_i\rangle$ und $|\phi_j\rangle$ verschiedene z -Komponente des Elektron-Gesamtspins aufweisen, d.h. $S_z^{\text{ges},e} |\phi_i\rangle = S_z^{\text{ges},e}(i) |\phi_i\rangle$ und $S_z^{\text{ges},e} |\phi_j\rangle = S_z^{\text{ges},e}(j) |\phi_j\rangle$ mit $S_z^{\text{ges},e}(j) \neq S_z^{\text{ges},e}(i)$, so gilt: $0 = \langle \phi_i | [\mathbf{H}, S_z^{\text{ges},e}] | \phi_j \rangle = (S_z^{\text{ges},e}(i) - S_z^{\text{ges},e}(j)) \langle \phi_i | \mathbf{H} | \phi_j \rangle$ woraus sofort $\langle \phi_i | \mathbf{H} | \phi_j \rangle = 0$ folgt.

falls $s_z^\lambda > -s_\lambda$ im Falle der Anwendung des Absteigeoperators $S_-^{\text{ges},\lambda}$. Bei Anwendung des Aufsteigeoperators $S_+^{\text{ges},\lambda}$ muss $s_z^\lambda < s_\lambda$ gelten.

Da die einzelnen Spinkomponenten mit dem Hamiltonoperator kommutieren, folgt sofort, dass auch die Leiteroperatoren mit dem Hamiltonoperator vertauschen. Wenn nun $|\phi_i\rangle$ ein Eigenzustand des Hamiltonoperators zum Eigenwert E_i ist, erhält man

$$\mathbf{H} \left(S_\pm^{\text{ges},\lambda} |\phi_i\rangle \right) = S_\pm^{\text{ges},\lambda} \mathbf{H} |\phi_i\rangle = E_i \left(S_\pm^{\text{ges},\lambda} |\phi_i\rangle \right) . \quad (1.29)$$

Dies bedeutet aber nichts anderes, als dass $S_\pm^{\text{ges},\lambda} |\phi_i\rangle$ – falls dieser Zustand existiert – auch ein Eigenvektor von \mathbf{H} zu dem Eigenwert E_i ist. Da die Leiteroperatoren der Elektronen und Löcher kommutieren, sind auch die Vektoren

$$\left(S_\pm^{\text{ges},h} \right)^n \left(S_\pm^{\text{ges},e} \right)^m |\phi_i\rangle \quad \text{mit } n, m \in \mathbb{N} \quad (1.30)$$

Eigenvektoren zum Eigenwert E_i . Ist $|\phi_i\rangle$ nun Eigenvektor von \mathbf{H} , $(\mathbf{S}_z^{\text{ges},e})^2$, $S_z^{\text{ges},e}$, $(\mathbf{S}_z^{\text{ges},h})^2$ und $S_z^{\text{ges},h}$, erzeugt man durch die Verwendung von Gleichung (1.30) die $(2s_e + 1)(2s_h + 1)$ entarteten Zustände gleicher Energie und Spinbetragsquadrate der Elektronen und Löcher. Nur die Spin- z -Komponenten unterscheiden sich von Zustand zu Zustand.

Füllt man ein Elektron-Loch-Paar in den Quantenpunkt, so ist $s_e = \frac{1}{2} = s_h$ und somit sind die Energieniveaus, bereits bedingt durch den Spin des Elektrons und den des Lochs, vierfach entartet $((2\frac{1}{2} + 1)(2\frac{1}{2} + 1) = 4)$. Die Entartung der Energieniveaus wird in diesem Fall also $4n$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$ betragen, wobei der Faktor 4 von den Spins stammt und ein Faktor $n > 1$ durch weitere Entartung des Systems hervorgerufen werden kann. Die vierfache Entartung entspricht der energetischen Gleichwertigkeit der Spinzustände $|\{\uparrow\}_h, \{\uparrow\}_e\rangle$, $|\{\downarrow\}_h, \{\uparrow\}_e\rangle$, $|\{\uparrow\}_h, \{\downarrow\}_e\rangle$ und $|\{\downarrow\}_h, \{\downarrow\}_e\rangle$, die man von einem dieser Zustände startend alle durch Anwendung der Leiteroperatoren erhält. Die Gleichheit der Energien dieser Zustände lässt sich auf die Vernachlässigung der Elektron-Loch-Austausch-Terme in Envelope-Näherung zurückführen. Welche Auswirkung die Berücksichtigung dieser Austausch-Terme auf das Energiespektrum hat, wird in Abschnitt 2.7.4 näher untersucht.

Durch die Kopplung der Spins von N_e Elektronen gibt es folgende Möglichkeiten für die Betragsquantenzahl s_e des Gesamtspins:

N_e	1	2	3	4	5	6
s_e	$\frac{1}{2}$	0,1	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	0,1,2	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$	0,1,2,3

Man beachte, dass die minimal mögliche Entartung (hervorgerufen durch den Spin) bei einer geraden Anzahl von Elektronen $(2 \cdot 0 + 1) = 1$ und für eine ungerade Anzahl von Elektronen $(2 \cdot \frac{1}{2} + 1) = 2$ ist. Daraus folgt, dass die minimale Spinentartung für eine ungerade Anzahl von Elektron-Loch-Paaren 4 und für eine gerade Anzahl 1 ist. Dies bedeutet aber nichts anderes, als dass die Entartung bei einer ungeraden Anzahl von Elektron-Loch-Paaren stets durch ein ganzzahliges Vielfaches von 4 gegeben ist.

1.6 Methode der exakten Diagonalisierung

In diesem Abschnitt wird die Berechnung der Eigenenergien und Eigenzustände des wechselwirkenden Hamiltonoperators behandelt. Zunächst wird hier das allgemeine Verfahren skizziert, um dann die Details für ein Einbandmodell in Abschnitt 1.6.1 näher zu erläutern. Die dabei entwickelten Gleichungen werden dann anhand der Grundzustandsenergien der Atome He, Li und Be getestet. Abschnitt 1.6.2 befasst sich schließlich mit der Verallgemeinerung des Einbandmodells auf ein Zweibandmodell.

Um die Eigenzustände und Eigenwerte des wechselwirkenden Hamiltonoperators zu berechnen, gehen wir wie folgt vor:

1. Zunächst wählen wir für das Einteilchenproblem der Elektronen und Löcher jeweils eine endliche, nummerierte Basis $\{\psi_i^e(\mathbf{r})\}_{i=1}^{N_e^e}$ bzw. $\{\psi_i^h(\mathbf{r})\}_{i=1}^{N_s^h}$, d.h. wir berücksichtigen von den unendlich vielen Eigenzuständen der wechselwirkungsfreien Einteilchen-Hamiltonoperatoren nur die ersten N_s^e bzw. N_s^h Zustände niedrigster Energie. Die Hoffnung, die hinter einem solchen Zugang steckt, ist die, dass die niederenergetischen Vielteilchen-Zustände durch die Beiträge der Einteilchen-Zustände zu niedriger Energie dominiert werden.
2. Mit diesen Zuständen konstruieren wir dann – bei fester Teilchenzahl N_e an Elektronen und N_h an Löchern – die antisymmetrisierten Produkteigenzustände des wechselwirkungsfreien Vielteilchenproblems

$$| \{i, j, k, \dots\}_h, \{\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}, \dots\}_e \rangle := h_i^\dagger h_j^\dagger h_k^\dagger \dots e_i^\dagger e_j^\dagger e_k^\dagger \dots |0\rangle$$

mit $i < j < k < \dots$ und $\tilde{i} < \tilde{j} < \tilde{k} < \dots$. (1.31)

Diese Produktzustände dienen dann als Basis⁴ des wechselwirkenden Vielteilchenproblems in dem eingeschränkten Vielteilchen-Hilbertraum. Die Indices nummerieren die Einteilchen-Zustände. Der Operator e_i^\dagger (h_i^\dagger) erzeugt ein Teilchen im Einteilchen-Zustand $\psi_i^{e(h)}(\mathbf{r})$ und der Operator e_i (h_i) vernichtet ein Teilchen in diesem Zustand. In erster Quantisierung entsprechen die Zustände (1.31) gerade den Slater-Determinanten, d.h. den unter Vertauschung zweier Teilchen korrekt antisymmetrisierten Vielteilchen-Zuständen.

3. Nachdem man eine Vielteilchen-Basis $\{|n\rangle\}_n$ gewählt hat, kann man nun den Vielteilchen-Hamiltonoperator (1.14) bezüglich dieser Basis darstellen:

$$\mathbf{H} = \sum_{nm} |n\rangle \langle n| \mathbf{H} |m\rangle \langle m| = \sum_{nm} H_{nm} |n\rangle \langle m| . \quad (1.32)$$

Auf diese Weise erhalten wir die Hamilton'sche Matrix \underline{H} , mit den Einträgen H_{nm} . Die Eigenwerte dieser Matrix bilden das Spektrum des wechselwirkenden Problems in dem von uns eingeschränkten Hilbertraum. Die Eigenvektoren liefern die Entwicklungskoeffizienten der Vielteilchen-Eigenzustände nach den „Slater-Zuständen“ aus Gleichung (1.31).

Das gerade skizzierte Verfahren wird in der Literatur auch „Configuration-Interaction“ - oder „Exact-Diagonalisation“ -Zugang genannt.

⁴ Anstatt die häufig verwendete Darstellung mittels Besetzungszahlen zu wählen, verwenden wir obige Form der Basis, da wir die aus dieser Darstellung gewonnenen Gleichungen letztlich auch so mit dem Computer-Algebra-System *Maple* umgesetzt haben.

1.6.1 Einbandmodell

Zunächst beschränken wir uns – um die Notation zu vereinfachen – auf ein Band (nur Elektronen) und verallgemeinern das Vorgehen im Anschluss auf ein Zwei-Band-Modell. Im Einbandmodell wählen wir die Vielteilchen-Basiszustände der Form:

$$|i, j, k, \dots\rangle := e_i^\dagger e_j^\dagger e_k^\dagger \dots |0\rangle \text{ mit } i < j < k < \dots \quad (1.33)$$

In dieser Notation stehen also die Nummern der besetzten Einteilchen-Zustände, der Größe nach geordnet, in einem Ket-Vektor. Diese Nummern werden im Folgenden, zur besseren Verständlichkeit, auch als Zustandsnummern bezeichnet.

Der zu diagonalisierende Vielteilchen-Hamiltonoperator besteht aus dem wechselwirkungsfreien Anteil

$$\mathbf{H}_0^e = \sum_i \epsilon_i e_i^\dagger e_i \quad (1.34)$$

und dem wechselwirkenden Anteil

$$\mathbf{H}_{\text{WW}}^{ee} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l \quad (1.35)$$

Der wechselwirkungsfreie Anteil des Hamiltonoperators \mathbf{H}_0^e ist natürlich in der oben angeführten unkorrelierten Vielteilchen-Basis (1.33) bereits diagonal. Erst durch die Wechselwirkung zwischen den Teilchen wird das Vielteilchenproblem nicht-trivial. Die beim Aufstellen der Hamilton'schen Matrix zu berechnenden Matrixelemente sind von der Form:

$$\langle i_2, j_2, k_2, \dots | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle \quad (1.36)$$

Die darin enthaltene Summe besteht aus $4^{N_s^e}$ Summanden. In Abschnitt 2 verwenden wir z.B. $N_s^e = 6$ Zustände. In diesem Fall besteht die Summe bereits aus 4096 Summanden, so dass es sinnvoll ist herauszubekommen, welche dieser Summanden einen nicht-verschwindenden Beitrag liefern. Es wird sich zeigen, dass sich die Anzahl der effektiv zu berechnenden Summanden erheblich verringert, für obiges Beispiel auf maximal 36.

Um die nicht-verschwindenden Elemente zu identifizieren, müssen wir die einzelnen Beiträge $\langle i_2, j_2, k_2, \dots | e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$ genauer untersuchen. Betrachten wir zu diesem Zweck zunächst Terme der Form:

$$e_k^\dagger e_l | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle \quad (1.37)$$

- Für $l = k$ liefert dies einfach $n_l | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$. Dabei ist $n_l = 1$, falls der Einteilchen-Zustand $|l\rangle$ besetzt ist, d.h. die Zustandsnummer l in dem Vektor $| i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$ enthalten ist, und $n_l = 0$ sonst.
- Für $l \neq k$ ergibt sich nur dann ein Beitrag ungleich Null, falls der Einteilchen-Zustand $|l\rangle$ besetzt und der Einteilchen-Zustand $|k\rangle$ in $| i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$ unbesetzt ist. In diesem Fall ergibt sich nämlich $\pm | i_1, j_1, \dots, \cancel{k}, \dots, \underline{l}, \dots \rangle$. Ausgestrichen deutet hier das Fehlen dieser Zustandsnummer und unterstrichen das Hinzukommen dieser Zustandsnummer an. Das Vorzeichen hängt von den anderen besetzten Zuständen in $| i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$ und der relativen Lage von k und l in der sortierten Menge der Zustandsnummern ab (s.u.).

Mittels des Operators $e_k^\dagger e_l$ kann man also maximal eine Zustandsnummer in $| i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$ durch eine andere ersetzen. Analog kann man mittels $e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l$ maximal zwei Zustandsnummern durch zwei andere ersetzen. Dies bedeutet aber nichts anderes, als dass der Ausdruck

$\langle i_2, j_2, k_2, \dots | e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$ immer dann Null sein muss, wenn sich $|i_1, j_1, k_1, \dots\rangle$ und $|i_2, j_2, k_2, \dots\rangle$ um mehr als zwei Zustandsnummern unterscheiden. Daraus folgt dann natürlich auch, dass in diesem Fall das gesamte Matricelement (1.36) identisch Null ist. Falls sich die beiden Vektoren um weniger als zwei Zustandsnummern unterscheiden, werden einige der Summanden einen Beitrag ungleich Null liefern (natürlich vorausgesetzt, dass dann auch das entsprechende Wechselwirkungselement $V_{ij,kl}^{ee}$ ungleich Null ist).

Verwendet man

$$N_{\text{diff}}^e := N_e - \#(\{i_1, j_1, k_1, \dots\} \cap \{i_2, j_2, k_2, \dots\}) ,$$

wobei $\#$ den Anzahloperator bezeichnet, der über

$$\#(\text{Menge}) = \text{Anzahl der Elemente in dieser Menge}$$

definiert ist, so muss man also die drei Fälle $N_{\text{diff}} = 0, 1, 2$ einzeln behandeln. Hier wird nur der Fall $N_{\text{diff}} = 1$ ausführlich erläutert und für die beiden anderen Fälle werden die Ergebnisse angegeben.

1. Fall: $N_{\text{diff}} = 1$

Sei also $N_{\text{diff}} = 1$, dann muss man zunächst einmal herausfinden in welchen Zustandsnummern sich die beiden Vielteilchen-Zustände unterscheiden:

$$\begin{aligned} \{i_1, j_1, k_1, \dots\} \setminus (\{i_1, j_1, k_1, \dots\} \cap \{i_2, j_2, k_2, \dots\}) &= \{i_1^*\} \\ \{i_2, j_2, k_2, \dots\} \setminus (\{i_1, j_1, k_1, \dots\} \cap \{i_2, j_2, k_2, \dots\}) &= \{i_2^*\} . \end{aligned}$$

D.h. die Zustandsnummer i_1^* kommt in $|i_1, j_1, k_1, \dots\rangle$, nicht aber in $|i_2, j_2, k_2, \dots\rangle$ vor, dafür beinhaltet $|i_2, j_2, k_2, \dots\rangle$ die Zustandsnummer i_2^* , die nicht in $|i_1, j_1, k_1, \dots\rangle$ enthalten ist. Damit nun das Matricelement (1.36) nicht verschwindet, muss also die Zustandsnummer i_1^* in $|i_1, j_1, k_1, \dots\rangle$ vernichtet und dafür i_2^* erzeugt werden. Alle anderen Zustandsnummern dürfen dabei nicht verändert werden. Durch diese Bedingung reduziert sich die Summe in Gleichung (1.36) auf die folgenden Terme:

$$\frac{1}{2} \sum_i \left[V_{i_2^* i, i i_1^*}^{ee} e_{i_2^*}^\dagger e_i^\dagger e_i e_{i_1^*} + V_{i i_2^*, i i_1^*}^{ee} e_i^\dagger e_{i_2^*}^\dagger e_i e_{i_1^*} + V_{i_2^* i, i_1^* i}^{ee} e_{i_2^*}^\dagger e_i^\dagger e_{i_1^*} e_i + V_{i i_2^*, i_1^* i}^{ee} e_i^\dagger e_{i_2^*}^\dagger e_{i_1^*} e_i \right] .$$

Verwendet man nun die Symmetrie (1.12) der Coulomb-Matricelemente und kommutiert die Erzeuger und Vernichter entsprechend, so erhält man daraus:

$$\sum_i (V_{i_2^* i, i i_1^*}^{ee} - V_{i i_2^*, i i_1^*}^{ee}) e_{i_2^*}^\dagger e_{i_1^*}^\dagger e_i^\dagger e_i .$$

Um nun das Coulomb-Matricelement für $N_{\text{diff}} = 1$ zu ermitteln, müssen wir noch

$$\langle i_2, j_2, k_2, \dots | e_{i_2^*}^\dagger e_{i_1^*}^\dagger | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle$$

auswerten. Unter Benutzung der kanonischen Antikommutatorrelationen der Erzeuger bzw. Vernichter und unter Verwendung der Definition (1.33) – insbesondere der Sortierung der Zustandsnummern – findet man

$$\langle i_2, j_2, k_2, \dots | e_{i_2^*}^\dagger e_{i_1^*}^\dagger | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle = (-1)^{\text{Pos}(i_1^*, \{i_1, j_1, k_1, \dots\}) + \text{Pos}(i_2^*, \{i_1, j_1, k_1, \dots\} \setminus \{i_1^*\})} .$$

In der letzten Gleichung wurde noch der Positions-Operator „Pos“ eingeführt, der wiederum den Operator „Sort“ benötigt. Diese beiden Operatoren sind wie folgt definiert:

- $\text{Pos}(i, \{i_1, i_2, \dots, i_N\})$ ist diejenige Position, an der i das erste Mal in der sortierten Menge $\text{Sort}(\{i_1, i_2, \dots, i_N\} \cup \{i\})$ vorkommt und
- „Sort“ sortiert die Zustandsnummern der Größe nach, d.h.:
 $\text{Sort}(\{i_1, i_2, \dots, i_N\}) = \{i_{P(1)}, i_{P(2)}, \dots, i_{P(N)}\}$ mit $i_{P(1)} \leq i_{P(2)} \leq \dots \leq i_{P(N)}$.

Insgesamt ergibt sich also für das Matrixelement des Hamiltonoperators

$$\begin{aligned} & \langle i_2, j_2, k_2, \dots | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | i_1, j_1, k_1, \dots \rangle \\ &= (-1)^{\text{Pos}(i_1^*, \{i_1, j_1, k_1, \dots\}) + \text{Pos}(i_2^*, \{i_1, j_1, k_1, \dots\} \setminus \{i_1^*\})} \cdot \sum_{i \in \{i_1, j_1, k_1, \dots\}} (V_{i_2^* i, i i_1^*}^{ee} - V_{i i_2^*, i i_1^*}^{ee}) , \end{aligned} \quad (1.38)$$

so dass sich die Anzahl der Summanden von $4^{N_s^e}$ auf $N_e \leq N_s^e$ reduziert. Für das oben erwähnte Beispiel mit 6 Zuständen entspricht dies z.B. im Falle von 4 Elektronen einer Reduktion von 4096 auf nur 4 Summanden.

2. Fall: $N_{\text{diff}} = 2$

Für $N_{\text{diff}} = 2$ erhält man in analoger Weise:

$$\langle i_2, j_2, \dots | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | i_1, j_1, \dots \rangle = (-1)^\eta (V_{i_2^* j_2^* i_1^* j_1^*}^{ee} - V_{i_2^* j_2^* j_1^* i_1^*}^{ee}) \quad (1.39)$$

mit

$$\eta := \text{Pos}(i_1^*, l_1) + \text{Pos}(j_1^*, l_1) + \text{Pos}(i_2^*, l_1'') + \text{Pos}(j_2^*, l_1')$$

und

$$\begin{aligned} & \text{Sort}(\{i_1, j_1, k_1, \dots\} \setminus (\{i_1, j_1, k_1, \dots\} \cap \{i_2, j_2, k_2, \dots\})) = \{i_1^*, j_1^*\} \\ & \text{Sort}(\{i_2, j_2, k_2, \dots\} \setminus (\{i_1, j_1, k_1, \dots\} \cap \{i_2, j_2, k_2, \dots\})) = \{i_2^*, j_2^*\} \\ & l_1 := \{i_1, j_1, k_1, \dots\} \\ & l_1'' := \{i_1, j_1, k_1, \dots\} \setminus \{i_1^*, j_1^*\} . \end{aligned}$$

Im obigen Beispiel muss man also nun anstatt 4096 sogar nur noch einen Term auswerten.

3. Fall: $N_{\text{diff}} = 0$

Im Falle $N_{\text{diff}} = 0$, d.h. für die Diagonalterme der Hamilton'schen Matrix, erhält man folgendes Ergebnis:

$$\langle i_1, j_1, \dots | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | i_1, j_1, \dots \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \in \{i_1, j_1, \dots\}} \sum_{j \in \{i_1, j_1, \dots\}} (V_{ij,ji}^{ee} - V_{ij,ij}^{ee}) . \quad (1.40)$$

In diesem Ausdruck identifiziert man sofort den Hartree- bzw. Fock-Beitrag.

Für die Loch-Loch-Wechselwirkung erhält man analoge Ausdrücke, indem man in obigen Gleichungen überall die Ersetzungen $e \leftrightarrow h$ vornimmt.

Atomare Grundzustandsenergien als Test

Um die oben entwickelten Gleichungen zu überprüfen, kann man sich zunächst davon überzeugen, dass die angeführten Gleichungen für $N_e = 1$ alle dasselbe liefern, nämlich Null. Dass dies so sein muss, ist sowohl physikalisch als auch mathematisch sofort klar. Physikalisch liegt es daran, dass die Elektron-Elektron-Wechselwirkung natürlich verschwindet, wenn nur ein Elektron vorhanden ist. Mathematisch folgt es aus $e_k e_l |i\rangle = 0$ für alle k, l . Letzteres gilt, da man nicht mehr als ein Teilchen aus einem Zustand, welcher nur ein Teilchen enthält, vernichten kann.

Um das oben eingeführte Verfahren weiter zu testen, wurden die Grundzustandsenergien der Atome He, Li und Be berechnet und mit den experimentellen Werten aus Mehrfachionisierungs-Experimenten [14] verglichen. Dieser Test bot sich an, da ich in einem früheren Projekt die hierzu nötigen Coulomb-Matrixelemente in Zusammenarbeit mit Herrn Prof. Dr. Czychołl ausgerechnet hatte, um damit den Grundzustand und die ersten angeregten Zustände von Helium mittels exakter Diagonalisierung zu berechnen.

Die Berechnung der Coulomb-Matrixelemente ist in diesem Fall – aufgrund der vollen Rotationssymmetrie des Einteilchen-Potentials – analytisch möglich. Damals hatten wir uns der Einfachheit halber auf das Zwei-Elektronensystem Helium beschränkt. Die in diesem Zusammenhang auftretenden Matrixelemente (1.36) wurden dann durch systematische Verwendung der Antikommutatorrelationen für die Erzeuger und Vernichter gewonnen. Bei dieser Art der Auswertung werden die Matrixelemente unter Verwendung von Gleichung (1.33) als Erwartungswert bezüglich des Vakuums geschrieben und die Vernichter dann so lange kommutiert, bis sie auf den Vakuumzustand wirken und somit der entsprechende Ausdruck verschwindet. Die nicht verschwindenden Beiträge werden durch die Kronecker-Deltas, die beim Vertauschen von Erzeugern und Vernichtern zusätzlich entstehen, generiert. Für mehr als zwei Elektronen ist dieses Vorgehen allerdings sehr mühsam und wurde deswegen durch das oben erläuterte Verfahren ersetzt. Die mit diesen Matrixelementen und anschließender Diagonalisierung

	He	Li	Be
1s2s	-77.04	-193.20	-373.21
1s2s2p	-77.10	-193.34	-374.55
1s2s2p3s	-77.33	-201.19	-395.10
Experiment	-78.6	-202.4	-398.5

Tabelle 1.1: Grundzustandsenergien (in eV) von He, Li und Be, gewonnen mittels exakter Diagonalisierung – unter Verwendung verschieden vieler Einteilchen-Orbitale – und der entsprechende experimentelle Wert [14].

der Hamilton'schen Matrix gewonnenen Ergebnisse sind in Tabelle 1.1 zusammengestellt. Es fällt auf, dass die berechneten Grundzustandsenergien mit zunehmender Anzahl an verwendeten Einteilchen-Zuständen dem experimentellen Wert von oben immer näher kommen. Genau dieses Verhalten erwartet man auch, wenn man den Raum, in welchem der Zustand variiert werden kann, vergrößert.

Überträgt man diese Ergebnisse auf ein Quantenpunktsystem, so bedeutet dies, dass wir erwarten können, dass die Vielteilchen-Energien umso stärker durch die Anwesenheit der anderen Schalen renormiert werden, je größer die Anzahl der Schalen ist. Glücklicherweise ist die Anzahl der gebundenen Zustände für Quantenpunkte – im Gegensatz zu atomaren Systemen –

endlich und zumeist auch noch recht klein, so dass man im Idealfall alle gebundenen Zustände in den Vielteilchen-Rechnungen berücksichtigen kann. Die Renormalisierung der gebundenen Zustände durch die Streuzustände wird im Folgenden, wie auch in allen uns bekannten Veröffentlichungen, vernachlässigt.

1.6.2 Zweibandmodell

Nachdem sich der vorangegangene Abschnitt mit dem Einbandmodell befasste, behandelt dieser Abschnitt nun die Berechnung der Hamilton'schen Matrix für den Fall zweier Bänder.

Geht man zu einem Zweibandmodell mit Elektronen und Löchern über, so besteht der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators aus 3 Beiträgen: der Elektron-Elektron-, der Loch-Loch- und der Elektron-Loch-Wechselwirkung. Die Matrixelemente der Elektron-Elektron- und Loch-Loch-Wechselwirkung sind nach obiger Vorarbeit schnell ausgewertet, da diese Wechselwirkungen jeweils nur eine Sorte von Teilchen verknüpfen:

$$\begin{aligned} & \langle \{i_2, j_2, k_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, k_4, \dots\}_e | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | \{i_1, j_1, k_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, k_3, \dots\}_e \rangle \\ &= \begin{cases} \langle \{i_4, j_4, k_4, \dots\}_e | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l | \{i_3, j_3, k_3, \dots\}_e \rangle ; \\ \text{falls } \{i_1, j_1, k_1, \dots\}_h = \{i_2, j_2, k_2, \dots\}_h \\ 0 ; \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.41)$$

und analog

$$\begin{aligned} & \langle \{i_2, j_2, k_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, k_4, \dots\}_e | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} [V_{ij,kl}^{hh}]^* h_i^\dagger h_j^\dagger h_k h_l | \{i_1, j_1, k_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, k_3, \dots\}_e \rangle \\ &= \begin{cases} \langle \{i_2, j_2, k_2, \dots\}_h | \frac{1}{2} \sum_{ijkl} [V_{ij,kl}^{hh}]^* h_i^\dagger h_j^\dagger h_k h_l | \{i_1, j_1, k_1, \dots\}_h \rangle ; \\ \text{falls } \{i_3, j_3, k_3, \dots\}_e = \{i_4, j_4, k_4, \dots\}_e \\ 0 ; \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.42)$$

Für die Elektron-Loch-Wechselwirkung hängen die Matrixelemente natürlich in nicht-trivialer Weise von beiden, den Elektron- und den Lochanteilen, ab. In diesem Fall kann man eine ähnliche Analyse wie für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Einbandmodell (vgl. Abschnitt 1.6.1) durchführen: Um die Hamilton'sche Matrix der Elektron-Loch-Wechselwirkung bezüglich der Vielteilchen-Basis (1.31) darzustellen, müssen Matrixelemente der Form

$$\begin{aligned} & \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, \dots\}_e | - \sum_{ijkl} [V_{ik,jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\ &= - \sum_{ijkl} [V_{ik,jl}^{he}]^* \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h | h_i^\dagger h_l | \{i_1, j_1, \dots\}_h \rangle \langle \{i_4, j_4, \dots\}_e | e_j^\dagger e_k | \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \end{aligned} \quad (1.43)$$

berechnet werden. Da hier die Vielteilchen-Zustände einer Teilchensorte nur durch ein Paar aus Erzeuger und Vernichter gekoppelt sind, kann hier nur maximal eine Zustandsnummer ausgetauscht werden. Folglich ist das Matrixelement (1.43) nur dann ungleich Null, wenn sowohl $N_{\text{diff}}^e \leq 1$ als auch $N_{\text{diff}}^h \leq 1$ gilt. Man hat also im Fall der Elektron-Loch-Wechselwirkung vier Fälle zu unterscheiden. Im Einzelnen erhält man:

1. Fall: $N_{\text{diff}}^e = 0 = N_{\text{diff}}^h$

$$\begin{aligned} \langle \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e | - \sum_{ijkl} [V_{ik, jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\ = - \sum_{i \in \{i_1, j_1, \dots\}_h} \sum_{j \in \{i_3, j_3, \dots\}_e} V_{ji, ij}^{eh} . \end{aligned} \quad (1.44)$$

2. Fall: $N_{\text{diff}}^e = 0, N_{\text{diff}}^h = 1$

$$\begin{aligned} \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, \dots\}_e | - \sum_{ijkl} [V_{ik, jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\ = - \sum_{i \in \{i_3, j_3, \dots\}_e} V_{ii_1^*, i_2^* i}^{eh} (-1)^{\text{Pos}(i_1^*, \{i_1, j_1, \dots\}_h) + \text{Pos}(i_2^*, \{i_1, j_1, \dots\}_h \setminus \{i_1^*\})} \end{aligned} \quad (1.45)$$

mit:

$$\begin{aligned} \{i_1, j_1, \dots\}_h \setminus (\{i_1, j_1, \dots\}_h \cap \{i_2, j_2, \dots\}_h) &=: \{i_1^*\} \\ \{i_2, j_2, \dots\}_h \setminus (\{i_1, j_1, \dots\}_h \cap \{i_2, j_2, \dots\}_h) &=: \{i_2^*\} . \end{aligned}$$

3. Fall: $N_{\text{diff}}^e = 1, N_{\text{diff}}^h = 0$

$$\begin{aligned} \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, \dots\}_e | - \sum_{ijkl} [V_{ik, jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\ = - \sum_{i \in \{i_1, j_1, \dots\}_h} V_{i_4^* i, i_3^*}^{eh} (-1)^{\text{Pos}(i_3^*, \{i_3, j_3, \dots\}_e) + \text{Pos}(i_4^*, \{i_3, j_3, \dots\}_e \setminus \{i_3^*\})} \end{aligned} \quad (1.46)$$

mit:

$$\begin{aligned} \{i_3, j_3, \dots\}_e \setminus (\{i_3, j_3, \dots\}_e \cap \{i_4, j_4, \dots\}_e) &=: \{i_3^*\} \\ \{i_4, j_4, \dots\}_e \setminus (\{i_3, j_3, \dots\}_e \cap \{i_4, j_4, \dots\}_e) &=: \{i_4^*\} . \end{aligned}$$

4. Fall: $N_{\text{diff}}^e = 1 = N_{\text{diff}}^h$

$$\begin{aligned} \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, \dots\}_e | - \sum_{ijkl} [V_{ik, jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\ = (-1)^{\eta+1} V_{i_4^* i_1^*, i_2^* i_3^*}^{eh} \end{aligned} \quad (1.47)$$

mit:

$$\begin{aligned} \eta = \text{Pos}(i_1^*, \{i_1, j_1, \dots\}_h) + \text{Pos}(i_2^*, \{i_1, j_1, \dots\}_h \setminus \{i_1^*\}) \\ + \text{Pos}(i_3^*, \{i_3, j_3, \dots\}_e) + \text{Pos}(i_4^*, \{i_3, j_3, \dots\}_e \setminus \{i_3^*\}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\{i_1, j_1, \dots\}_h \setminus (\{i_1, j_1, \dots\}_h \cap \{i_2, j_2, \dots\}_h) &=: \{i_1^*\} \\ \{i_2, j_2, \dots\}_h \setminus (\{i_1, j_1, \dots\}_h \cap \{i_2, j_2, \dots\}_h) &=: \{i_2^*\} \\ \{i_3, j_3, \dots\}_e \setminus (\{i_3, j_3, \dots\}_e \cap \{i_4, j_4, \dots\}_e) &=: \{i_3^*\} \\ \{i_4, j_4, \dots\}_e \setminus (\{i_3, j_3, \dots\}_e \cap \{i_4, j_4, \dots\}_e) &=: \{i_4^*\} .\end{aligned}$$

Genau wie im Fall der Elektron-Elektron-Wechselwirkung gibt es auch im Fall der Elektron-Loch-Wechselwirkung einen wichtigen Spezialfall, für den man obige Gleichungen auf einfache Weise testen kann, nämlich den Fall eines Elektron-Loch-Paares. In diesem Fall überlegt man sich unter Verwendung des Wick-Theorems leicht folgende Beziehung:

$$\langle \{i_1\}_h \{i_2\}_e | - \sum_{ijkl} \left[V_{ik,jl}^{he} \right]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{i_3\}_h \{i_4\}_e \rangle = -V_{i_2 i_3, i_1 i_4}^{eh} . \quad (1.48)$$

Dieser Ausdruck wird – wie es sein muss – unter Verwendung der allgemeinen Formeln reproduziert.

1.7 Berechnung der optischen Spektren

In diesem Abschnitt wird die Berechnung der optischen Spektren mittels Fermi's goldener Regel behandelt. Nachdem zunächst die zu berechnenden Größen vorgestellt werden, wird es im Anschluss um die effiziente Berechnung der Übergangsmatrixelemente zwischen Vielteilchen-Eigenzuständen gehen.

Um die Absorptions- und Emissionsraten eines Quantenpunktes zu ermitteln, kann man Fermi's goldene Regel verwenden [16, 30]. In dieser Näherung ist die Übergangsrate von dem Anfangszustand $|i\rangle$ zu dem Endzustand $|f\rangle$ unter Einfluss eines optischen Feldes der Frequenz ω durch

$$\begin{aligned}\Gamma_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left[|\langle f | \mathbf{H}_D | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) + |\langle f | \mathbf{H}_D | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) \right] \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{E} \mathbf{d}_{cv}|^2 \left[|\langle f | \mathcal{P} | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) + |\langle f | \mathcal{P} | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) \right]\end{aligned}$$

gegeben. Um von der ersten zur zweiten Zeile zu gelangen, wurde der Interband-Polarisations-Operator $\mathcal{P} = \sum_{ij} (P_{ij} e_i^\dagger h_j^\dagger + h.c.)$ definiert, der das elektromagnetische Feld \mathbf{E} und das Dipolmatrixelement \mathbf{d}_{cv} – im Gegensatz zum Dipol-Hamiltonoperator \mathbf{H}_D – nicht mehr enthält.

Ist man an dem Emissionsspektrum eines Quantenpunktes interessiert, welcher sich zunächst in dem Zustand $|i\rangle$ mit N_X Elektron-Loch-Paaren befindet und dann unter Emission eines Photons in den Zustand $|f, N_X - 1\rangle$ übergeht, so muss man Ausdrücke der Form

$$B_i(\omega) := \sum_f |\langle i, N_X | \mathcal{P} | f, N_X - 1 \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) \quad (1.49)$$

betrachten. Bei der Absorption eines Quantenpunktes geht es entsprechend um

$$A_i(\omega) := \sum_f |\langle f, N_X + 1 | \mathcal{P} | i, N_X \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega) . \quad (1.50)$$

Die Summe erstreckt sich in beiden Fällen über alle möglichen Endzustände $|f\rangle$. Bei Absorption besitzt der Endzustand ein Elektron-Loch-Paar mehr und bei Emission ein Elektron-Loch-Paar weniger als der Ausgangszustand. Da die oben definierten Größen $A_i(\omega)$ bzw. $B_i(\omega)$ mit den Übergangsenergien $(E_i - E_f)$ und den zugehörigen Oszillatorstärken $|\langle f|\mathcal{P}|i\rangle|^2$ die spektralen Eigenschaften des Systems beschreiben, werden wir sie im Folgenden als Absorptions- bzw. Emissionsspektrum des Quantenpunktes (aus dem Anfangszustand $|i\rangle$) bezeichnen.⁵

Um eine Aussage über die Anfangszustände $|i\rangle$ zu ermöglichen, nimmt man an, dass die strahlungslose Relaxation in den Grundzustand des N_X -Elektron-Loch-Paar-Systems so schnell vor sich geht, dass sich das System vor der Emission bzw. der Absorption in einem der Grundzustände befindet [16].

Wenn $\{\psi_i^{N_X}\}_i$ die Menge der Eigenzustände des Quantenpunktes und $\{\varphi_i^{N_X}\}_i$ die unkorrelierte Vielteilchen-Basis (1.31) der Nanostruktur mit N_X Elektron-Loch-Paaren bezeichnet, so sind zur Berechnung der optischen Spektren insbesondere die Matrixelemente $\langle \psi_\alpha^{N_X+1} | \mathcal{P} | \psi_\beta^{N_X} \rangle$ auszuwerten. Diese Matrixelemente ermitteln wir wie folgt:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha^{N_X+1} | \mathcal{P} | \psi_\beta^{N_X} \rangle &= \langle \psi_\alpha^{N_X+1} | \left(\sum_i |\varphi_i^{N_X+1}\rangle \langle \varphi_i^{N_X+1}| \right) \mathcal{P} \left(\sum_j |\varphi_j^{N_X}\rangle \langle \varphi_j^{N_X}| \right) | \psi_\beta^{N_X} \rangle \\ &= \sum_{ij} \langle \psi_\alpha^{N_X+1} | \varphi_i^{N_X+1} \rangle \langle \varphi_i^{N_X+1} | \mathcal{P} | \varphi_j^{N_X} \rangle \langle \varphi_j^{N_X} | \psi_\beta^{N_X} \rangle . \end{aligned} \quad (1.51)$$

Im ersten Schritt wurden zwei Vollständigkeitsenseinsen eingeschoben, einmal für den Hilbertraum \mathcal{H}_{N_X} und einmal für den Hilbertraum \mathcal{H}_{N_X+1} . Dadurch lassen sich, nachdem man einmal die Übergangsmatrixelemente $\langle \varphi_i^{N_X+1} | \mathcal{P} | \varphi_j^{N_X} \rangle$ bezüglich der unkorrelierten Basis ermittelt hat, alle Übergangsmatrixelemente $\langle \psi_\alpha^{N_X+1} | \mathcal{P} | \psi_\beta^{N_X} \rangle$ durch einfache Matrixmultiplikationen ermitteln, da die Terme $\langle \psi_\alpha^{N_X+1} | \varphi_i^{N_X+1} \rangle$ und $\langle \varphi_j^{N_X} | \psi_\beta^{N_X} \rangle$ bekannt sind. Diese sind nämlich nichts anderes als die Entwicklungskoeffizienten der Vielteilchen-Eigenvektoren nach der unkorrelierten Vielteilchen-Basis, und es sind genau diese Koeffizienten, die durch die exakte Diagonalisierung gewonnen werden.

Um nun die Übergangsmatrixelemente bezüglich der unkorrelierten Basis zu berechnen, starten wir von

$$\langle \varphi_k^{N_X+1} | \mathcal{P} | \varphi_l^{N_X} \rangle = \sum_{ij} P_{ij} \langle \varphi_k^{N_X+1} | e_i^\dagger h_j^\dagger | \varphi_l^{N_X} \rangle . \quad (1.52)$$

Der hermitesch konjugierte Anteil von \mathcal{P} liefert keinen Beitrag, da dieser die Anzahl der Elektron-Loch-Paare in $|\varphi_j^{N_X}\rangle$ verringert und Zustände aus Hilberträumen mit verschiedener Teilchenzahl orthogonal sind.

Bezeichnet $N_{\text{diff}}^{e(h)}$ die Anzahl der Zustandsnummern in denen sich die Elektron- bzw. Loch-Zustände unterscheiden und definiert man i_2^* und i_4^* über

$$\begin{aligned} \{i_2, j_2, \dots\}_h \setminus \{i_1, j_1, \dots\}_h &=: \{i_2^*\} \\ \{i_4, j_4, \dots\}_e \setminus \{i_3, j_3, \dots\}_e &=: \{i_4^*\} , \end{aligned}$$

⁵ Obgleich diese Sprechweise häufig in der Literatur verwendet wird [16, 26], sei darauf hingewiesen, dass in messbare Größen wie dem Absorptionskoeffizienten, der sich in der Theorie aus dem Imaginärteil der Suszeptibilität ergibt, eine Kombination aus Absorptions- und Emissionsprozessen eingeht.

so findet man mit zu Abschnitt 1.6 analogen Betrachtungen für die verbleibenden Matrixelemente den Ausdruck:

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_k^{N_X+1} | e_i^\dagger h_j^\dagger | \varphi_l^{N_X} \rangle \\
&= \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h \{i_4, j_4, \dots\}_e | e_i^\dagger h_j^\dagger | \{i_1, j_1, \dots\}_h \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\
&= \langle \{i_2, j_2, \dots\}_h | h_j^\dagger | \{i_1, j_1, \dots\}_h \rangle \langle \{i_4, j_4, \dots\}_e | e_i^\dagger | \{i_3, j_3, \dots\}_e \rangle \\
&= \delta_{j, i_2^*} \delta_{i, i_4^*} \begin{cases} (-1)^{\text{Pos}(i_2^*, \{i_1, j_1, \dots\}_h) + \text{Pos}(i_4^*, \{i_3, j_3, \dots\}_e)} & ; \text{ falls } N_{\text{diff}}^e = 1 = N_{\text{diff}}^h \\ 0 & ; \text{ sonst} \end{cases} .
\end{aligned} \tag{1.53}$$

Alles in allem sind die meisten der Übergangsmatrixelemente aus Gleichung (1.52) identisch Null und nur einige wenige liefern einen nicht-verschwindenden Beitrag zur Licht-Materie-Wechselwirkung.

1.8 Summenregel

Die im Folgenden vorgestellte Summenregel wurde durch die Beobachtung motiviert, dass sich im Falle der Absorptionsspektren eines leeren Quantenpunktes zwar die Oszillatorstärken der einzelnen Übergänge, nicht aber die Summe dieser Oszillatorstärken als Funktion der Oszillatorlänge l_k ändert (vgl. Abschnitt 2.4.2). Auch ist die Summe der Oszillatorstärken unabhängig davon, ob die Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigt wird oder nicht.

Summenregeln sind im Allgemeinen hilfreich, da man zwar oftmals keine Aussagen über die genauen Werte einer Funktion machen kann, wohl aber über den Wert des Integrals dieser Funktion, wenn sich die Integration über ein bestimmtes Gebiet erstreckt. Angewendet auf das hier vorliegende Problem bedeutet das konkret, dass wir zwar keine allgemeine Aussage über die einzelnen Oszillatorstärken machen können, wohl aber über die Summe aller Oszillatorstärken. (Die Oszillatorstärke eines Übergangs der Energie E ist hier als die Summe der Quadrate der an diesem Übergang beteiligten Übergangsmatrixelemente definiert.) Die Summenregel erlaubt somit eine sehr gute Überprüfung der für einen bestimmten Satz von Parametern berechneten Übergangsmatrixelemente.

Sei nun $\{\phi_i^{N_X}\}_i$ eine Basis des Hilbertraumes des Quantenpunktes mit N_X Elektron-Loch-Paaren und $\{\phi_i^{N_X+1}\}_i$ eine Basis für $(N_X + 1)$ Elektron-Loch-Paare, dann besagt die Summenregel, dass

$$\int_0^\infty d\omega \left(\sum_i A_i(\omega) \right) = \sum_{ij} |\langle \phi_i^{N_X+1} | \mathcal{P} | \phi_j^{N_X} \rangle|^2 \tag{1.54}$$

unabhängig von der gewählten Basis ist. Dabei läuft die Summe $\sum_i A_i(\omega)$ über alle möglichen Anfangszustände $|i\rangle$. Insbesondere ist also das Ergebnis unter Verwendung der Eigenzustände des wechselwirkenden Systems identisch mit dem Resultat, welches man für das nichtwechselwirkende System ermittelt, obgleich sich natürlich sowohl die Übergangsmatrixelemente als auch die Übergangsenergien aufgrund der Wechselwirkung drastisch ändern können.

Der Beweis dieser Aussage lautet wie folgt:

$$\begin{aligned}
\sum_{ij} |\langle \phi_i^{N_X+1} | \mathcal{P} | \phi_j^{N_X} \rangle|^2 &= \sum_{ij} |\langle \phi_i^{N_X+1} | \sum_{nm} P_{nm} e_n^\dagger h_m^\dagger | \phi_j^{N_X} \rangle|^2 \\
&= \sum_{ij} \langle \phi_j^{N_X} | \sum_{nm} P_{nm}^* h_m e_n | \phi_i^{N_X+1} \rangle \langle \phi_i^{N_X+1} | \sum_{nm} P_{nm} e_n^\dagger h_m^\dagger | \phi_j^{N_X} \rangle \\
&= \text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left(\sum_{ijkl} P_{ij} P_{kl}^* h_l e_k e_i^\dagger h_j^\dagger \right) .
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde die Definition der Spur benutzt und wieder die Vollständigkeit der $\{\phi_i^{N_X+1}\}_i$ verwendet. Da die Spur unabhängig von der gewählten Hilbertraumbasis ist, ist obige Aussage bewiesen.

Für das Absorptionsspektrum des leeren Quantenpunktes hat diese Summenregel eine direkte physikalische Bedeutung, da es nur einen Zustand mit Null Elektron-Loch-Paaren gibt, nämlich das Vakuum. Hier besagt die Summenregel, dass die Summe aller Höhen⁶ der Absorptionslinien unabhängig von der Wechselwirkung zwischen den Elektronen und den Löchern ist. Bei identischen Wellenfunktionen für die Elektronen und Löcher kann man sogar zeigen, dass diese Summe unabhängig von dem gewählten Quantenpunktsystem ist und nur von der Anzahl der gebundenen Einteilchen-Zustände abhängt. Für $N_X = 0$ gilt nämlich für die Summe aller Höhen der Absorptionspeaks:

$$\begin{aligned}
\sum_i |\langle \phi_i^{N_X=1} | \mathcal{P} | 0 \rangle|^2 &= \text{Sp}_{\mathcal{H}_{|0\rangle}} \left(\sum_{ijkl} P_{ij} P_{kl}^* h_l e_k e_i^\dagger h_j^\dagger \right) = \sum_{ijkl} P_{ij} P_{kl}^* \langle 0 | h_l e_k e_i^\dagger h_j^\dagger | 0 \rangle \\
&= \sum_{ijkl} P_{ij} P_{kl}^* \langle 0 | h_l h_j^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | e_k e_i^\dagger | 0 \rangle = \sum_{ijkl} P_{ij} P_{kl}^* \delta_{jl} \delta_{ik} = \sum_{kj} |P_{kj}|^2 .
\end{aligned} \tag{1.55}$$

Der letzte Ausdruck wird dann für identische Wellenfunktionen von Elektronen und Löchern aufgrund von $P_{ij} = \delta_{ij}$ zu

$$\sum_i |\langle \phi_i^{N_X=1} | \mathcal{P} | 0 \rangle|^2 = N_s . \tag{1.56}$$

Hierbei bezeichnet $N_s = N_s^e = N_s^h$ die Anzahl der berücksichtigten Einteilchen-Zustände für die Elektronen und Löcher. Im Falle identischer Wellenfunktionen ist also die Summe aller Absorptionspeakhöhen gänzlich unabhängig von der Form der verwendeten Einteilchen-Zustände. Falls die Wellenfunktionen nicht identisch sind, ändern sich die Matrixelemente P_{ij} von System zu System und somit auch die Summe aller Oszillatorstärken.

Für identische Einteilchen-Wellenfunktionen von Elektron und Loch, kann man die Summenregel auch für beliebig viele Exzitonen auf sehr einfache Weise auswerten:

$$\begin{aligned}
\text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left(\sum_{ijkl} P_{ij} P_{kl}^* h_l e_k e_i^\dagger h_j^\dagger \right) &= \sum_{ij} \text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left(h_i e_i e_j^\dagger h_j^\dagger \right) \\
&= \sum_{ij} \text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left((\delta_{ij} - h_j^\dagger h_i) (\delta_{ij} - e_j^\dagger e_i) \right) \\
&= \text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left(\sum_{ij} \delta_{ij} - \sum_i h_i^\dagger h_i - \sum_i e_i^\dagger e_i + \sum_{ij} h_j^\dagger h_i e_j^\dagger e_i \right) .
\end{aligned}$$

⁶ Um die homogene Verbreiterung der Absorptionslinien zu modellieren, wurden die δ -Funktionen aus Fermi's goldener Regel durch Lorentzfunktionen der Breite γ ersetzt. Diese Funktionen wurden so normiert, dass die Höhe der Peaks gerade der Oszillatorstärke entspricht.

Hier wurde zunächst $P_{ij} = \delta_{ij}$ ausgenutzt, dann die kanonischen Antivertauschungsrelationen für die Elektron- und Lochoperatoren verwendet und die Linearität der Spur benutzt. Die ersten drei Summanden unter der Spur sind einfach auszuwerten: Der erste liefert die Anzahl der beteiligten Einteilchen-Zustände, der zweite beschreibt den Gesamtanzahloperator der Löcher und der dritte den Gesamtanzahloperator der Elektronen in dem Quantenpunkt. Um den vierten Summanden auszuwerten betrachten wir zunächst $\text{Sp}(h_j^\dagger h_i e_j^\dagger e_i)$. Wie man sich leicht überlegt, liefert dies nur für $i = j$ einen Beitrag und somit erhält man

$$\text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left(\sum_{ij} h_j^\dagger h_i e_j^\dagger e_i \right) = \text{Sp}_{\mathcal{H}_{N_X}} \left(\sum_i n_i^e n_i^h \right) .$$

Um dies weiter auszuwerten, macht man sich leicht klar, dass die Anzahl der Vielteilchen-Zustände, in welchem der Einteilchen-Zustand $|i\rangle$ sowohl von einem Loch als auch von einem Elektron besetzt ist durch $\binom{N_s-1}{N_X-1}^2$ gegeben ist. Verwendet man schließlich noch die Beziehung $\text{Sp}(1) = \dim(\mathcal{H}_{N_X}) = \binom{N_s}{N_X}^2$, so ergibt sich schließlich im Falle identischer Wellenfunktionen

$$\sum_{ij} |\langle \phi_i^{N_X+1} | \mathcal{P} | \phi_j^{N_X} \rangle|^2 = \binom{N_s}{N_X}^2 (N_s - 2N_X) + N_s \binom{N_s-1}{N_X-1}^2 . \quad (1.57)$$

Diesen Ausdruck kann man für einen konkreten Fall auswerten und kann damit auf sehr einfache Weise die berechneten Übergangsmatrixelemente prüfen.

2 Quantenpunkte mit harmonischem Einschlusspotential

Nachdem wir in dem vorangegangenen Kapitel das nötige Rüstzeug zusammengestellt haben, verwenden wir dies nun, um die Energiespektren und die optischen Spektren eines Quantenpunktes mit harmonischem Einschlusspotential zu ermitteln. In Kapitel 2.1 wird das Modell des Quantenpunktes diskutiert. Teil 2.2 behandelt die Einteilchen-Zustände in einer solchen Nanostruktur und Kapitel 2.3 erläutert die Berechnung der Coulomb-Matrixelemente. In Abschnitt 2.4 bzw. 2.5 werden die Ergebnisse für ein bzw. zwei Elektron-Loch-Paare vorgestellt: Es werden die Energiespektren präsentiert, die Bindungsenergien berechnet und die optischen Spektren diskutiert. In Kapitel 2.6 wird die Diskussion dann auf mehr als zwei Elektron-Loch-Paare ausgedehnt und insbesondere die Änderung der optischen Spektren mit zunehmender Füllung der Quantenpunkte mit Elektron-Loch-Paaren behandelt.

2.1 Das Modell

In diesem Teil der Arbeit wird das dreidimensionale Einschlusspotential $V(\mathbf{r})$ der Halbleiter-Quantenpunkte, durch ein zweidimensionales harmonisches Oszillatorpotential in der x - y -Ebene und einen unendlich⁷ tiefen Potentialtopf in z -Richtung modelliert:

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{Topf}}(z) + V_{\text{Oszillator}}(x, y) \quad .$$

In Kapitel 3 und 4 werden realistischere Potentiale betrachtet und die entsprechenden Eigenfunktionen ermittelt. Neben dem zweidimensionalen harmonischen Oszillator sind – aufgrund ihrer Einfachheit – insbesondere dreidimensionale Potentialkästen [1, 4, 9] und im Falle von Nanokristallen Potential-„Kästen“ mit sphärischer Symmetrie [19] beliebte Approximationen.

Die endliche Tiefe des Einschlusspotentials, d.h. die Tatsache, dass eine reale Quantenpunkt-Struktur nur einige wenige gebundene Zustände aufweist [11, 35], wird hier näherungsweise dadurch berücksichtigt, dass man nur die niedrigsten Energie-Zustände des zweidimensionalen harmonischen Oszillators berücksichtigt und alle anderen Zustände vernachlässigt. Weiterhin wird angenommen, dass die angeregten Zustände des Potentialtopfes energetisch so weit auseinander liegen, dass man sich auf den niedrigsten Topfzustand beschränken kann (*1-Subband-Approximation*). Diese Näherung ist natürlich bei einem unendlich hohen Potentialtopf umso besser erfüllt, je geringer die Topfbreite ist.

Wenn man vor allem an den niederenergetischen Zuständen nahe der Bandkante interessiert ist, kann man davon ausgehen, dass die Effektivmassennäherung gültig ist. Ferner werden wir annehmen, dass man für die Elektronen und Löcher jeweils nur ein Band berücksichtigen muss. Diese Annahme ist zumindest für das Leitungsband unproblematisch, da das Leitungsband in den hier betrachteten Halbleitermaterialien nahe der Bandlücke meist s-artig und damit nicht entartet ist. Für die Valenzbänder ist dies aber nicht der Fall, da diese in der Nähe von $\mathbf{k} = 0$ meist p-artig sind, so dass es zu einer Bandentartung kommt [10]. Prinzipiell hätte man also

⁷ Man mag an dieser Stelle einwenden, dass es realistischer wäre einen endlichen Potentialtopf zu verwenden. Obgleich dies ohne Zweifel der Fall ist, würde es aber zum einen bedeuten, dass man einen weiteren Parameter (nämlich die Höhe des Potentials) in das Problem einführt und zum anderen würde es die Berechnung der Coulomb-Matrixelemente deutlich erschweren. Da die Annahme eines Potentialkastens mit ρ -unabhängiger Dicke bereits eine Vergrößerung der Realität darstellt, rechtfertigt die Verbesserung der Wellenfunktion in z -Richtung – durch Verwendung eines endlich hohen Potentialkastens – den erhöhten Rechenaufwand nicht. Auf realistischere Wellenfunktionen in ρ - und z -Richtung wird in Kapitel 3 eingegangen.

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

Tabelle 2.1: Parameterwerte für den in diesem Kapitel verwendeten Modell-Quantenpunkt. (m_0 bezeichnet die Elektronenmasse im Vakuum.)

im Falle der Valenzbänder drei Bänder zu berücksichtigen, aber eines dieser Bänder ist auf Grund der Spin-Bahn-Wechselwirkung energetisch nach unten verschoben und kann deswegen vernachlässigt werden. Die anderen beiden Bänder sind für $\mathbf{k} = 0$ im Volumenkristall entartet, haben aber unterschiedliche Krümmungen, so dass man ihnen verschiedene effektive Massen zuschreibt. Das Loch mit der geringeren Masse wird auch als leichtes Loch (*light hole*) und das andere als schweres Loch (*heavy hole*) bezeichnet. Die entsprechenden Massen werden mit m_{lh} bzw. m_{hh} abgekürzt. Die Entartung der Eigenzustände von leichtem und schwerem Loch wird allerdings – wie aus Experimenten und Theorie [36] zu Quantenfilmen bekannt – sowohl durch die Dimensionsreduzierung an sich als auch durch Verspannungen aufgehoben, so dass nahe der fundamentalen Bandlücke das Geschehen durch ein Lochband dominiert wird.⁸

Da Quantenpunktstrukturen natürlich auch dimensionsreduzierte Systeme darstellen und oftmals durch Verspannungen gebildet werden (z.B. in dem sogenannten Stranski-Krastanow-Wachstumsmodus [20, 37]), ist es auch für Quantenpunkte sinnvoll von der Aufhebung der Entartung von leichtem und schwerem Loch auszugehen. Dies rechtfertigt dann die Verwendung eines Zweibandmodells mit effektiven Massen für die Elektronen und Löcher.

Um möglichst einfache Orthogonalitätsrelationen zwischen den Einteilchen-Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher zu gewährleisten wird – falls nicht anders erwähnt – angenommen, dass die Oszillator-Längen $l_k^e := \sqrt{\hbar/m_e\omega_e}$ und $l_k^h := \sqrt{\hbar/m_h\omega_h}$ identisch sind. Dies legt uns dann bei vorgegebener Masse der Elektronen und Löcher das Verhältnis $\hbar\omega_e/\hbar\omega_h$ der Oszillatorenergien fest.

Wenn $\xi_i^e(\mathbf{r})$ den i -ten Eigenzustand eines Elektrons im Quantenpunkt und $\xi_j^h(\mathbf{r})$ den j -ten Eigenzustand eines Lochs im Quantenpunkt in Envelope-Näherung bezeichnet, gilt bei identischen Oszillatorlängen: $\xi_i^e(\mathbf{r}) = \xi_i^h(\mathbf{r})$ und damit $\langle \xi_i^e | \xi_j^h \rangle = \delta_{ij}$. Dieser Umstand erleichtert uns die Berechnung der Dipolmatrixelemente erheblich und vereinfacht die Interpretation der daraus resultierenden Anregungen (siehe auch Abschnitt 1.3). Weiterhin gilt bei identischen Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher für die Wechselwirkungs-Matrixelemente: $V_{ij,kl}^{hh} = V_{ij,kl}^{eh} = V_{ij,kl}^{ee}$, so dass sich die Anzahl der insgesamt zu berechnenden Matrixelemente drastisch reduziert.

Soweit nicht anders erwähnt, werden in diesem Kapitel die Modellparameter verwendet, die in Tabelle 2.1 zusammengefasst sind. Diese Parameterwerte sind für InGaAs/AlGaAs-Systeme

⁸ Da je nach Art der Verspannung (tensil oder kompressiv) die durch die Dimensionsreduzierung hervorgerufene Separation zwischen dem Band des schweren und des leichten Lochs vergrößert oder verringert wird, kann es schlechtesten Falls durch Kombination dieser beiden Effekte wieder zur Entartung der Zustände kommen. Im Folgenden werden wir aber annehmen, dass die energetische Trennung der beiden Lochbänder hinreichend groß ist, so dass man das Band des leichten Lochs nahe der fundamentalen Bandlücke vernachlässigen kann.

realistisch [18]. Sie entsprechen einer Oszillatorenergie von $\hbar\omega_e = 40.20 \text{ meV}$ für die Elektronen und $\hbar\omega_h = 15.37 \text{ meV}$ für die Löcher. Die Separation der Energien vom ersten und zweiten Subband in z -Richtung beträgt rund 1.1 eV für die Elektronen und über 400 meV für die Löcher, so dass für einen solchen Quantenpunkt die 1-Subband-Approximation sehr gut erfüllt sein sollte.

2.2 Das Einteilchen-Spektrum

Um im Folgenden das Vielteilchen-Energiespektrum nicht-wechselwirkender Elektronen und Löcher und die Wechselwirkungs-Matrixelemente ausrechnen zu können, benötigt man zunächst das Einteilchen-Energiespektrum und die zugehörigen Einteilchen-Eigenzustände. Da sich Elektronen und Löcher in dem hier verwendeten Modell völlig analog behandeln lassen, wird der Bandindex in diesem Abschnitt weggelassen.

Der Einteilchen-Hamiltonoperator für die Envelope-Funktionen ist unter Verwendung effektiver Massen durch

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + V_{\text{Oszillator}}(x, y) + \frac{p_z^2}{2m} + V_{\text{Topf}}(z) = \mathbf{H}_{\text{Oszillator}} + \mathbf{H}_{\text{Topf}} \quad (2.1)$$

gegeben mit

$$V_{\text{Oszillator}}(\rho, \varphi) = \frac{m\omega^2}{2}\rho^2 \quad \text{und} \quad V_{\text{Topf}}(z) = \begin{cases} 0 & ; \quad |z| < L/2, \\ \infty & ; \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Unter Verwendung der 1-Subband-Approximation kann man die Eigenfunktionen innerhalb des Potentialtopfes ($z \in [-L/2, L/2]$) als

$$\xi_i(\mathbf{r}) = \varphi_i(\rho, \varphi) \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\pi \frac{z}{L}\right) \quad (2.3)$$

schreiben. Dabei bezeichnet $\varphi_i(\rho, \varphi)$ die i -te Wellenfunktion des zweidimensionalen harmonischen Oszillators und $\cos(\pi \frac{z}{L})$ stammt von dem Einschluss in z -Richtung. Die Eigenenergie der Wellenfunktion $\xi_i(\mathbf{r})$ setzt sich additiv aus der Energie des harmonischen Oszillators und der Energie E_z des Teilchens im ersten Subband zusammen:

$$E_i = \hbar\omega(2N_{r_i} + |m_i| + 1) + \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} . \quad (2.4)$$

Hierbei bezeichnet N_{r_i} die radiale Quantenzahl des i -ten Zustandes und m_i die z -Komponente des Drehimpulses. Die radiale Quantenzahl N_r gibt an wie viele Nullstellen die Wellenfunktion $\varphi(\rho, \varphi)$ in radialer Richtung auf dem offenen Intervall $(0, \infty)$ hat. Es gilt also:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{Osz}}|\varphi_{N_r, m}\rangle &= E_{N_r, m}|\varphi_{N_r, m}\rangle = \hbar\omega(2N_r + |m| + 1)|\varphi_{N_r, m}\rangle \\ l_z|\varphi_{N_r, m}\rangle &= \hbar m|\varphi_{N_r, m}\rangle . \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Oszillatorlänge $l_k = \sqrt{\hbar/m\omega}$ und der inversen Länge $\beta := 1/l_k$ lauten die ersten 3 Wellenfunktionen in Polarkoordinaten [6]:

$$\begin{aligned} \varphi_1(\rho, \varphi) &= \varphi_{(N_r=0, m=0)}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2/2} , \\ \varphi_2(\rho, \varphi) &= \varphi_{(N_r=0, m=-1)}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2/2} (\beta\rho) e^{+i\varphi} , \\ \varphi_3(\rho, \varphi) &= \varphi_{(N_r=0, m=+1)}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2/2} (\beta\rho) e^{-i\varphi} . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Das Energiespektrum zu fester Energie $(N + 1)\hbar\omega$ ist $(N + 1)$ -fach entartet und die z -Komponente des Drehimpulses läuft in Zweierschritten von $-N\hbar$ nach $+N\hbar$.

Natürlich lässt sich der zweidimensionale harmonische Oszillator auch in kartesischen Koordinaten lösen (und dies ist, wenn man mit der Lösung des eindimensionalen harmonischen Oszillator vertraut ist, auch viel einfacher), allerdings verliert man dann die Klassifizierung nach der z -Komponente des Drehimpulses. Es ist aber gerade diese Klassifizierung die uns aufgrund der mit der Drehimpulsquantenzahl verknüpften „Auswahlregel“ (2.11) erhebliche Vorteile bei der Berechnung der Coulomb-Matrixelemente verschafft.

2.3 Coulomb-Matrixelemente

Um die in Abschnitt 1.2 definierten Coulomb-Matrixelemente (1.11) für unser Modellsystem zu ermitteln, schreiben wir zunächst die Coulomb-Wechselwirkung mittels Fourier-Transformation wie folgt um:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{\mathbf{q}^2} \\ &= \int \frac{d^2q_{||}}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{q}_{||}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \int \frac{dq_z}{2\pi} e^{-iq_z(z-z')} \frac{e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{\mathbf{q}_{||}^2 + q_z^2} \\ &= \int \frac{d^2q_{||}}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{q}_{||}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{q_{||}} e^{-q_{||}|z-z'|} . \end{aligned} \quad (2.6)$$

Um zur letzten Zeile zu gelangen, wurde die Identität

$$\int dk e^{-ikx} \frac{1}{a^2 + x^2} = \frac{\pi}{a} e^{-a|x|}$$

benutzt. Diese Darstellung des Coulomb-Potentials erweist sich als vorteilhaft, da die Wellenfunktionen in dem hier betrachteten Modellsystem aus einem Produkt eines z -abhängigen und eines ρ -abhängigen Anteils bestehen und der z -abhängige Anteil stets gleich $\sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\pi \frac{z}{L})$ ist. Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die Coulomb-Matrixelemente wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} &= \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2q_{||}}{(2\pi)^2} \frac{1}{q_{||}} \int d^2\rho e^{-i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}} \varphi_i^{\lambda*}(\rho) \varphi_l^\lambda(\rho) \int d^2\rho' e^{i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}'} \varphi_j^{\lambda'*}(\rho') \varphi_k^{\lambda'}(\rho') \\ &\quad \times \frac{4}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_{-L/2}^{L/2} dz' e^{-q_{||}|z-z'|} \cos^2\left(\pi \frac{z}{L}\right) \cos^2\left(\pi \frac{z'}{L}\right) . \end{aligned} \quad (2.7)$$

Das letzte Doppelintegral in Gleichung (2.7) kann man analytisch auswerten und erhält so den sogenannten *Formfaktor*

$$F_{0000}(q_{||}) = \frac{32\pi^4 \left(-1 + (Lq_{||}) + e^{-(Lq_{||})}\right) + 20(Lq_{||})^3\pi^2 + 3(Lq_{||})^5}{(Lq_{||})^2 \left((Lq_{||})^2 + 4\pi^2\right)^2} , \quad (2.8)$$

mit dem wichtigen Grenzwert

$$\lim_{L \rightarrow 0} F_{0000}(q_{||}) = 1 .$$

Für verschwindende Ausdehnung in z -Richtung verschwindet also auch die $q_{||}$ -Abhängigkeit im Formfaktor. Mit dem Formfaktor und der üblichen Definition des Skalarprodukts

$$\langle \varphi | A | \phi \rangle = \int d^3r \varphi(\mathbf{r})^* A \phi(\mathbf{r})$$

lässt sich Gleichung (2.7) umschreiben zu

$$\tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{F_{0000}(q_{\parallel})}{q_{\parallel}} \langle \varphi_i^{\lambda} | e^{-i\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{p}} | \varphi_l^{\lambda} \rangle \langle \varphi_j^{\lambda'} | e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{p}} | \varphi_k^{\lambda'} \rangle . \quad (2.9)$$

Wenn man für die Wellenfunktionen $\varphi_l^{\lambda}(\mathbf{r})$ die eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators verwendet, kann man zeigen, dass die Skalarprodukte aus Gleichung (2.9) immer von der Form

$$\langle \varphi_i^{\lambda} | e^{-i\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{p}} | \varphi_l^{\lambda} \rangle = e^{-\frac{q_{\parallel}^2}{4\beta_{\lambda}^2}} p^{\lambda} \left(\frac{q_{\parallel}}{\beta_{\lambda}} \right) e^{i(m_l - m_j)\phi} \quad (2.10)$$

sind, wobei die $p^{\lambda}(x)$ Polynome bezeichnen und die inversen Längen $\beta_{\lambda} = 1/l_k^{\lambda}$ eingeführt wurden. Wegen der einfachen Gestalt dieser Ausdrücke, kann man die Winkelintegration in Gleichung (2.9) direkt ausführen. Führt man noch die Variable $\tilde{q} = q_{\parallel}/\beta_{\lambda}$ ein, so erhält man schließlich

$$\tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \delta_{m_i+m_j, m_k+m_l} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r l_k^{\lambda}} \int d\tilde{q} F_{0000}(\beta_{\lambda}\tilde{q}) e^{-\frac{1}{4}\tilde{q}^2 \left(1 + \left(\frac{\beta_{\lambda}}{\beta_{\lambda'}}\right)^2\right)} p^{\lambda}(\tilde{q}) p^{\lambda'}\left(\tilde{q} \frac{\beta_{\lambda}}{\beta_{\lambda'}}\right) . \quad (2.11)$$

Da in dem in Gleichung (2.11) verbleibenden Integral die Coulomb-Singularität bei $q_{\parallel} = 0$ nicht mehr vorhanden ist, ist die Integration unproblematisch, muss aber wegen der Struktur von $F_{0000}(q_{\parallel})$ für $L \neq 0$ numerisch erfolgen. Die explizite Berechnung der Matrixelemente (2.9) wird anhand eines Beispiels in Anhang B vorgeführt.

Man kann der Gleichung (2.11) auch die typische Energieskala der Coulomb-Wechselwirkungs-Matrixelemente entnehmen:

$$E_c = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r l_k} \propto 1/l_k . \quad (2.12)$$

Dies entspricht der Energie eines Lochs im Feld eines Elektrons im Abstand l_k .

Auswahlregel

Die Tatsache, dass Gleichung (2.11) ein Kronecker-Delta in den Drehimpulsquantenzahlen enthält, lässt sich auf die Symmetrie des betrachteten Problems zurückführen: Interpretiert man das Produkt der Funktionen $\xi_{i,\lambda_i}(\mathbf{r})$ und $\xi_{j,\lambda_j}(\mathbf{r}')$ als eine Zweiteilchen-Wellenfunktion $\psi_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, so kann man zunächst die Matrixelemente $\tilde{V}_{ij,kl}$ als $\langle \psi_{ij} | \hat{V} | \psi_{kl} \rangle$ umschreiben. Da die Wellenfunktionen $\xi_{i,\lambda_i}(\mathbf{r})$ als Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators l_z gewählt wurden ($l_z \xi_{i,\lambda_i}(\mathbf{r}) = \hbar m_i \xi_{i,\lambda_i}(\mathbf{r})$), gilt auch

$$(l_z + l_{z'}) \psi_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hbar(m_i + m_j) \psi_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') .$$

Da weiterhin das Coulomb-Potential nur von dem Differenzbetrag der Ortsvektoren der Elektronen abhängt, gilt außerdem

$$[l_z + l_{z'}, \hat{V}] = 0$$

und somit

$$0 = \langle \psi_{ij} | [l_z + l_{z'}, \hat{V}] | \psi_{kl} \rangle = \hbar(m_i + m_j) \tilde{V}_{ij,kl} - \hbar(m_k + m_l) \tilde{V}_{ij,kl} .$$

Hieraus ersieht man, dass die Coulomb-Matrixelemente $\tilde{V}_{ij,kl}$ immer dann verschwinden müssen, wenn $(m_i + m_j) \neq (m_k + m_l)$ gilt.

Auf diese Weise lässt sich also die „Drehimpuls-Auswahlregel“, welche sich in dem Kronecker-Delta aus Gleichung (2.11) manifestiert, allein auf die Symmetrie des Potentials und die der Wellenfunktionen zurückführen.

2.4 Ergebnisse für ein Elektron-Loch-Paar

In den nachfolgenden Abschnitten wird es sowohl um das Energiespektrum als auch um das Absorptions- und Emissionsspektrum für den Fall gehen, in welchem sich nur ein Elektron-Loch-Paar in dem Quantenpunkt befindet. Zunächst werden wir nur den Fall gleicher Oszillatorlängen (d.h. $l_k^e = l_k^h = l_k$) behandeln, um anschließend darauf einzugehen, was sich bei ungleichen Oszillatorlängen verändert. Der Fall gleicher Oszillatorlängen hat den Vorteil, dass bei gegebener Elektron- und Lochmasse, sowie fester Dielektrizitätskonstante, die Bewegung in x - y -Richtung nur noch von einem Parameter, nämlich l_k , abhängt. Alle anderen Größen werden durch Vorgabe von l_k festgelegt. Auf diese Weise kann man die Abhängigkeit des Energiespektrums von dieser einen Größe eingehend untersuchen. (Eine weitere, häufig verwendete Möglichkeit eine einparametrische Abhängigkeit zu erhalten ist die Wahl $\omega_e = \omega_h$.⁹ Diese Wahl ist aber, wie unsere Rechnungen in Kapitel 3 zeigen werden, für die hier untersuchten Quantenpunkte weniger realistisch.)

Da man nicht erwarten kann, dass die Wellenfunktionen für Elektronen und Löcher in einer realistischen Quantenpunktstruktur gänzlich identisch sind, ist es sinnvoll zu untersuchen, wie sich das Spektrum durch Verwendung nicht-identischer Wellenfunktionen verändert. Dies geschieht in Abschnitt 2.4.3.

In den nachfolgenden Abschnitten werden die Energien der Elektronen relativ zur Leitungsbandunterkante gemessen und die konstante Energie E_z^e , welche durch den Einschluss in z -Richtung hervorgerufen wird, weggelassen. Analoges gilt für die Löcher im Valenzband. Insgesamt muss also, wenn E_{gap} die Bandlückenenergie bezeichnet, zu allen absoluten Energien die Energie $E_{\text{gap}} + E_z^e + E_z^h$ pro Elektron-Loch-Paar hinzu addiert werden.

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass wir den Begriff des Exzitons im Folgenden oft als Synonym für „wechselwirkendes Elektron-Loch-Paar“ verwenden und z.B. Zustände, die sich aus N_X Elektron-Loch-Paaren zusammensetzen, kurz als N_X -Zustände bezeichnen. Diese Sprechweise ist zwar etwas ungenau, scheint sich aber auch in der Literatur über Quantenpunkte weitgehend durchgesetzt zu haben.

Bevor wir zu der Diskussion der Ergebnisse kommen, noch ein paar Anmerkungen zur praktischen Umsetzung: Um die Hamilton'sche Matrix zu erzeugen, wurde das Computer-Algebra-System *Maple* verwendet. In *Maple* wurden die dazu nötigen Gleichungen im Wesentlichen so implementiert, wie sie in Kapitel 1.6 hergeleitet wurden. Die Diagonalisierung für ein Elektron-Loch-Paar kann noch in *Maple* erfolgen, für mehr als ein Exziton ist dieses Paket, welches auf algebraische Methoden spezialisiert ist, aber zu langsam. Aus diesem Grund wurde zur numerischen Diagonalisierung für mehr als ein Exziton das Programmpaket *Matlab* verwendet. Auch zur Berechnung der Spektren wurden die Fähigkeiten der beiden Systeme kombiniert. Die Übergangsmatrixelemente bezüglich der unkorrelierten Basis wurden mit *Maple* ermittelt und der Übergang zu den korrelierten Vielteilchen-Eigenzuständen, der im Wesentlichen Matrixmultiplikationen erfordert, erfolgte in *Matlab*.

⁹ Der besondere Reiz dieser Annahme besteht darin, dass in diesem Fall – zumindest für unendlich ausgedehnte harmonische Potentiale – eine exakte Entkopplung von Schwerpunkt- und Relativkoordinaten möglich ist. Somit hat man dann nur noch zwei effektive Einteilchenprobleme zu lösen, wovon das der Schwerpunktskoordinate trivial ist [27].

2.4.1 Energiespektrum

Beginnen wir also mit der Diskussion des Energiespektrums für ein Elektron-Loch-Paar. In Abbildung 2.1 sind die Energieniveaus für unser Modellsystem mit jeweils 3 Zuständen (ohne Berücksichtigung des Spins) für die Elektronen und Löcher schematisch dargestellt. Die entarteten Zustände $\{\varphi_{0,+1}^{e(h)}, \varphi_{0,-1}^{e(h)}\}$ sind hier zur Verdeutlichung als *nicht* entartet eingezeichnet worden. Aufgrund der identischen Wellenfunktionen für Elektronen und Löcher, die wir hier zunächst annehmen wollen, sind nur solche Übergänge unter Berücksichtigung der Dipolauswahlregeln erlaubt, die ein Leitungsband-Elektron im Zustand $|n\rangle$ vernichten und gleichzeitig ein Valenzband-Elektron in diesem Zustand erzeugen. Im Elektron-Loch-Bild entspricht dies der Erzeugung eines Elektrons und eines Lochs, welche sich beide in dem Einteilchen-Zustand $|n\rangle$ befinden. Die somit erlaubten Übergänge sind in Abbildung 2.1 durch Pfeile gekennzeichnet.

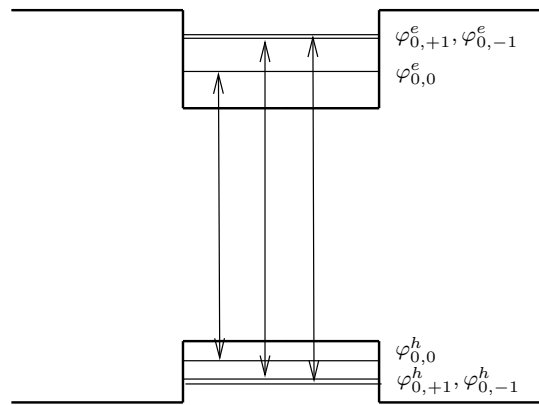


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Einteilchenniveaus mit den dipolerlaubten Übergängen.

Für dieses System ist das Energiespektrum eines Elektron-Loch-Paares mit und ohne Coulomb-Wechselwirkung in Abbildung 2.2 für die in Abschnitt 2.1 zusammengestellten Materialparameter dargestellt. Neben den Niveaus ist zusätzlich der Entartungsgrad und die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses eingetragen. Weiterhin sind die möglichen Übergänge zwischen einem leeren Quantenpunkt und einem Quantenpunkt mit einem Elektron-Loch-Paar durch Pfeile gekennzeichnet. Man erkennt, dass aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung alle Energieniveaus um ca. 20 meV abgesenkt werden. Diese generelle Absenkung entsteht durch die attraktive Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch. Ein weiterer Effekt besteht darin, dass die energetische Entartung der Paarzustände zumindest teilweise aufgehoben wird.

Die durch den Spin der Elektronen und Löcher zu erwartende Entartungsstruktur des Energiespektrums wurde bereits in Abschnitt 1.5 diskutiert. Für ein Exziton sollte die Entartung stets ein ganzzahliges Vielfaches von vier sein und genau dies beobachtet man hier. Für den Grundzustand des wechselwirkungsfreien Systems kann man die vierfache Entartung sehr einfach verstehen: Da die Energien nicht vom Spinzustand abhängen, haben die Zustände $|\{0, 0, \uparrow\}_h, \{0, 0, \uparrow\}_e\rangle$, $|\{0, 0, \downarrow\}_h, \{0, 0, \uparrow\}_e\rangle$, $|\{0, 0, \uparrow\}_h, \{0, 0, \downarrow\}_e\rangle$ und $|\{0, 0, \downarrow\}_h, \{0, 0, \downarrow\}_e\rangle$ alle die gleiche Energie. Hierbei bezeichnet $\{0, -1, \downarrow\}$ einen Einteilchen-Zustand mit radialer Quantenzahl $N_r = 0$, Drehimpuls- z -Komponente $m = -1$ und Spin- z -Komponente $-\frac{1}{2}$.

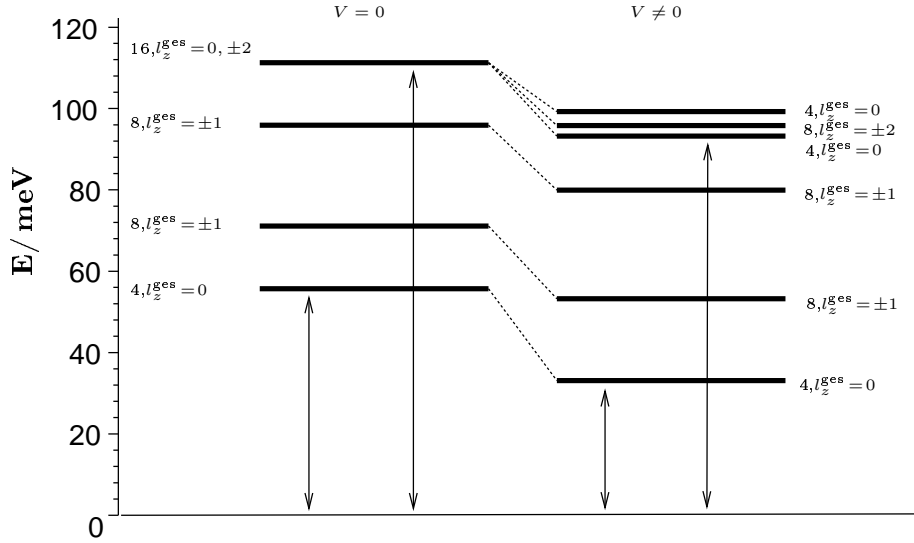


Abbildung 2.2: Das Energiespektrum für ein Elektron-Loch-Paar. Links: Ohne Coulomb-Wechselwirkung. Rechts: mit voller Coulomb-Wechselwirkung. Neben den Energieniveaus ist der Entartungsgrad dieses Niveaus und die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses $l_z^{\text{ges}} = l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$ aufgetragen. Zusätzlich sind die möglichen Übergänge zwischen einem leeren und einem mit einem Exziton gefüllten Quantenpunkt durch Pfeile angedeutet. ($L = 4 \text{ nm}$, $l_k = 5.4 \text{ nm}$.)

Dass sich diese Entartung durch die Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch nicht ändert und dass man insbesondere keine Singulett-Triplett Aufspaltung erhält, wurde zwar bereits in Kapitel 1.5 mathematisch begründet, wird aber in Abschnitt 2.7.4 noch einmal von einem physikalischen Standpunkt her näher beleuchtet. (Da die z -Komponenten der Spins für jedes Energieniveau die vier oben angegebenen Werte annehmen, wurden diese Quantenzahlen in Abbildung 2.2 nicht mit eingetragen.)

Die Zuordnung zwischen den Energieniveaus mit und ohne Coulomb-Wechselwirkung in Abbildung 2.2 gelingt, indem man die Coulomb-Wechselwirkung langsam erhöht. Zu diesem Zweck wurde das Wechselwirkungspotential

$$V_\lambda(r) := \lambda V(r) \quad (2.13)$$

verwendet. Für $\lambda = 0$ erhält man gerade den wechselwirkungsfreien Fall und für $\lambda = 1$ den Fall mit voller Coulomb-Wechselwirkung. Das Ergebnis für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ zwischen 0 und 1 ist in Abbildung 2.3 dargestellt.

Das Spektrum hängt natürlich auch stark von der Größe des Quantenpunktes ab, da sowohl die kinetische Energie als auch die Coulomb-Wechselwirkung mit abnehmender Größe des Quantenpunktes zunimmt. Um diese Abhängigkeit genauer zu studieren, wurde das wechselwirkende Energiespektrum für verschiedene Werte der Oszillatorlänge l_k , welche ein Maß für die Größe des Quantenpunktes darstellt, berechnet. Um insbesondere den Effekt der Coulomb-Wechselwirkung herauszupreparieren, wurde in Abbildung 2.4 nicht die Energie selbst, sondern die reskalierte Energie

$$E_{\text{reskal}} = \frac{E_n(l_k) - E_{\text{gs}}(l_k)}{\hbar^2 / (m_e l_k^2)} \quad (2.14)$$

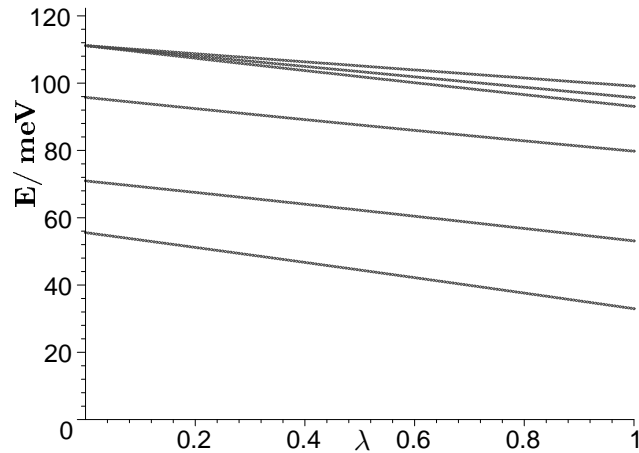


Abbildung 2.3: Energiespektrum für ein Elektron-Loch-Paar mit dem Wechselwirkungspotential $V_\lambda(r) = \lambda V(r)$. $\lambda = 0$ entspricht dem Fall ohne Wechselwirkung, $\lambda = 1$ dem Fall mit voller Coulomb-Wechselwirkung. ($L = 4 \text{ nm}$, $l_k = 5.4 \text{ nm}$.)

verwendet. E_{gs} bezeichnet hier die Grundzustandsenergie des wechselwirkenden Systems. Diese Darstellung bietet den Vorteil, dass die reskalierte Energie für den wechselwirkungsfreien Fall keine Abhängigkeit von der Oszillatorlänge l_k aufweist und somit alle Abweichungen durch die Coulomb-Wechselwirkung bewirkt werden.

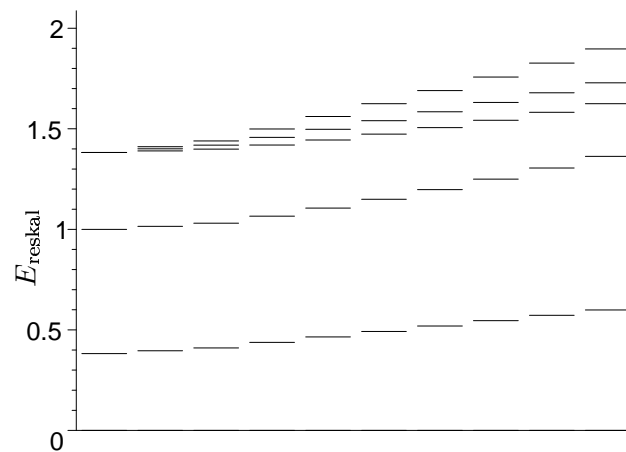


Abbildung 2.4: Von links nach rechts entsprechen die Energiespektren dem Fall ohne Wechselwirkung und mit Wechselwirkung ($l_k = 0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 \text{ nm}$). Es wurde durchweg $L = 0$ gewählt.

In Abbildung 2.4 wurde durchweg $L = 0$ gewählt, um zu gewährleisten, dass die 1-Subband-Approximation auch für die kleinen Werte der Oszillatorlänge erfüllt ist. Man kann deutlich erkennen, dass die Wechselwirkungseffekte mit zunehmender Quantenpunktgröße wichtiger werden und dass für sehr kleine Dots die kinetische Energie das Spektrum dominiert. In diesem Fall gibt es nämlich nahezu keine Abweichung von dem wechselwirkungsfreien Spektrum. Dies ist dadurch zu erklären, dass die kinetische Energie wie $1/l_k^2$ skaliert, die Coulomb-Wechselwirkung aber nur wie $1/l_k$ (s. Gleichung (2.12) auf Seite 31).

Exzitonen-Bindungsenergie

Eine besonders interessante Größe ist die Exzitonen-Bindungsenergie B_X . Diese Energie ist definiert als die Differenz der Grundzustandsenergie eines nicht-wechselwirkenden Elektron-Loch-Paares und der Grundzustandsenergie unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung:

$$B_X = E_{\text{gs}}^{\text{WW}}(1eh) - E_{\text{gs}}^0(1eh) . \quad (2.15)$$

Für den hier verwendeten Quantenpunkt erhält man aus obigen Rechnungen eine Bindungsenergie von $B_X = -22.61 \text{ meV}$.

Um die Größenordnung der Exzitonen-Bindungsenergie zu überprüfen, berechnen wir die Änderung der Eigenenergien für die Zustände $|\{0, 0, \uparrow\}_h, \{0, 0, \uparrow\}_e\rangle$, $|\{0, 0, \downarrow\}_h, \{0, 0, \uparrow\}_e\rangle$, $|\{0, 0, \uparrow\}_h, \{0, 0, \downarrow\}_e\rangle$ und $|\{0, 0, \downarrow\}_h, \{0, 0, \downarrow\}_e\rangle$ in Störungsrechnung erster Ordnung. Da die vier angegebenen Zustände alle dieselbe ungestörte Energie besitzen, müsste man im Prinzip entartete Störungsrechnung anwenden, d.h. den Operator \mathbf{H}_{WW} in dem durch diese Zustände aufgespannten Unterraum diagonalisieren. Da die Zustände nach der z -Komponente des Spins der Elektronen und Löcher klassifiziert sind und der Kommutator $[S_i^{\text{ges}, \lambda}, \mathbf{H}]$ verschwindet (s. Abschnitt 1.4), ist der Hamiltonoperator \mathbf{H}_{WW} in diesem Unterraum aber bereits diagonal. Somit ergibt sich die Verschiebung der Energie und damit die Exzitonen-Bindungsenergie in erster Ordnung Störungsrechnung unter Verwendung von Gleichung (1.48) zu

$$\begin{aligned} B_X^{(1)} &= \langle \{0, 0, \uparrow\}_h \{0, 0, \uparrow\}_e | - \sum_{ijkl} [V_{ik, jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l | \{0, 0, \uparrow\}_h \{0, 0, \uparrow\}_e \rangle \\ &= -V_{(0, 0, \uparrow)(0, 0, \uparrow), (0, 0, \uparrow)(0, 0, \uparrow)}^{eh} . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Für unseren Satz von Parametern erhält man daraus $B_X^{(1)} = -21.81 \text{ meV}$, was dem Ergebnis der vollen Diagonalisierung bereits sehr nahe kommt.

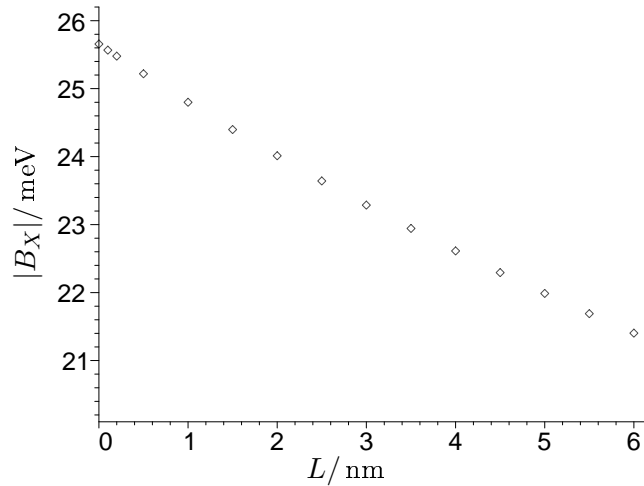


Abbildung 2.5: Änderung der Exzitonen-Bindungsenergie B_X als Funktion der Breite L des Potentialtopfes für feste Oszillatorlänge $l_k = 5.4 \text{ nm}$. Man beachte, dass die Energieachse nicht bei 0 meV beginnt.

In Abbildung 2.5 ist die Exzitonen-Bindungsenergie als Funktion der Breite des Potentialtopfes, der die Bewegung in z -Richtung einschränkt, aufgetragen. Man kann dieser Darstellung

entnehmen, dass die Exzitonen-Bindungsenergie mit zunehmender Dicke des Potentialtopfes abnimmt:

$$B_X(L = 0) = -25.65 \text{ meV} \quad \text{und} \quad B_X(L = 6 \text{ nm}) = -21.40 \text{ meV} .$$

Diese Beobachtung steht im Einklang mit den Vermutungen aus [27] und [3], deren explizite Rechnungen sich auf den Fall $L = 0$ beschränkten. Das Absinken der Bindungsenergie wird durch die Verringerung der attraktiven Coulomb-Wechselwirkung bedingt. Diese Abnahme wiederum wird durch das verstärkte „Ausschmieren“ der Ladungsverteilung in z -Richtung hervorgerufen.

2.4.2 Absorptions- und Emissionsspektren

Nachdem es bis jetzt um das Energiespektrum eines Elektron-Loch-Paares ging, wird nun das Emissions- bzw. Absorptionsspektrum eines Quantenpunktes behandelt, welcher vor der Wechselwirkung mit dem Lichtfeld ein bzw. kein Elektron-Loch-Paar enthält. Die Berechnung gelingt mittels Fermi's goldener Regel (vgl. Abschnitt 1.7).

Das auf diese Weise ermittelte Absorptionsspektrum ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Die gestrichelten Linien entsprechen dem Fall des Systems ohne Coulomb-Wechselwirkung und die durchgezogenen Linien dem Fall mit Wechselwirkung. Dabei wurde die Verbreiterung der Linien rein phänomenologisch und zur besseren Darstellung eingeführt. Als Peakfunktion wurde eine Lorentzkurve verwendet, die so normiert wurde, dass die Peakhöhe gerade der Oszillatorstärke des Übergangs entspricht.

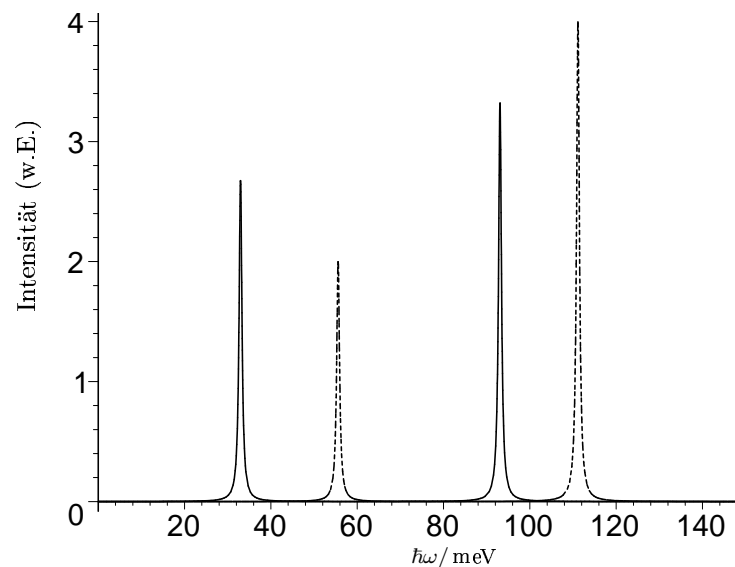


Abbildung 2.6: Absorptionsspektrum (Intensität in willkürlichen Einheiten (w.E.)) eines leeren Quantenpunktes. Die gestrichelte Linie entspricht dem nicht-wechselwirkenden und die durchgezogene Linie dem System mit Coulomb-Wechselwirkung. ($L = 4 \text{ nm}$, $l_k = 5.4 \text{ nm}$.)

Zunächst einmal zeigt sich, dass die Anzahl der Absorptionslinien in beiden Fällen gleich ist und dass das Absorptionsspektrum durch die Wechselwirkung zu niedrigeren Energien verschoben wird. Dies ist bedingt durch die attraktive Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron

und Loch. Weiterhin kann man erkennen, dass die Oszillatorstärke des niederenergetischen Übergangs durch die Wechselwirkung deutlich an Stärke gewinnt und die hochenergetische Linie an Stärke verliert. Dieser Transfer an Oszillatorstärke findet derart statt, dass die Summe der Peakhöhen konstant bleibt. Eine Erklärung dieses Phänomens wurde bereits in Abschnitt 1.8 gegeben.

Im wechselwirkungsfreien Fall ist das Verhältnis der Oszillatorstärken einfach 1 : 2. Dies ist der Fall, da sich doppelt so viele optisch aktive Zustände, d.h. Zustände mit $l_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^{\text{ges}} = 0$,¹⁰ durch Besetzung der $m = \pm 1$ -Schale ergeben, wie durch Besetzung der Schale mit $m = 0$. Im wechselwirkungsfreien Fall spiegelt das Verhältnis der Peakhöhen also das Verhältnis der Entartung der Einteilchen-Zustände der Elektronen und Löcher wieder.

In Abbildung 2.2 auf Seite 34 sind zusätzlich zum Energiespektrum mit und ohne Coulomb-Wechselwirkung die Übergänge, die man im Absorptionsspektrum beobachtet, eingetragen. Anhand der Klassifizierung der Zustände erkennt man, dass maximal drei Übergänge erlaubt sind. Wie oben bereits erläutert sind nämlich nur die Zustände mit $l_z^{\text{ges}} = 0$ und $S_z^{\text{ges}} = 0$ optisch aktiv, so dass bereits aufgrund dieser Auswahlregel neben den eingezeichneten Linien nur noch eine weitere mögliche Übergangslinie zwischen dem Vakuum und den obersten wechselwirkenden Ein-Exzitonen-Zuständen verbleibt. Diese Linie ist allerdings, wie die Rechnung zeigt, optisch nicht aktiv. Um dies genauer zu verstehen betrachten wir die Vielteilchen-Basiszustände mit $l_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^{\text{ges},e} = S_z^e = -\frac{1}{2}$, und $S_z^{\text{ges},h} = S_z^h = +\frac{1}{2}$ aus deren Linearkombination ein Teil der obersten 1X-Zustände besteht:

$$\{|0, 0, \downarrow\}_e, \{|0, 0, \uparrow\}_h, \quad \{|0, +1, \downarrow\}_e, \{|0, -1, \uparrow\}_h, \quad \{|0, -1, \downarrow\}_e, \{|0, +1, \uparrow\}_h \quad . \quad (2.17)$$

Für all diese Zustände $|\phi\rangle$ gilt $|\langle\phi|\mathcal{P}|0\rangle|^2 = 1$. Der Block der Hamilton'schen Matrix, die zu diesen Basisvektoren gehört, hat die Form

$$\begin{pmatrix} a & c & c \\ c & b & d \\ c & d & b \end{pmatrix} . \quad (2.18)$$

Einer der Eigenvektoren ist folglich gerade $\frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, -1)$. Bei unserer Wahl von Parametern, entspricht dieser Zustand gerade einem der energetisch höchsten Elektron-Loch-Paar Zuständen. Es ist auch genau dieser Eigenzustand der optisch inaktiv sein wird, da sich die einzelnen Beiträge im Übergangsmatrixelement gegenseitig aufheben. Für den Block, der aus den Zuständen mit $L_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^e = +\frac{1}{2}$ und $S_z^h = -\frac{1}{2}$ besteht, erhält man dieselbe Blockmatrix und somit natürlich auch die gleichen Eigenwerte und Eigenvektoren. Somit ist die optische Inaktivität des obersten Energieniveaus erklärt. (Die verbleibenden beiden Zustände höchster Energie sind bereits aufgrund ihrer Spins optisch inaktiv.)

Wie aus Abbildung 2.6 ersichtlich ändert sich aufgrund der Wechselwirkung die Oszillatorstärke der beiden Übergänge erheblich. In Abbildung 2.7 ist die Abhängigkeit der beiden Oszillatorstärken als Funktion der Oszillatorlänge l_k aufgetragen. Auch an diesem Beispiel – genau wie in den Energiespektren selbst (vgl. Abbildung 2.4) – erkennt man, dass sich durch

¹⁰Für identische Wellenfunktionen gilt $P_{ij} = \delta_{ij}$, so dass durch den Interband-Polarisations-Operator \mathcal{P} nur Elektron-Loch-Paare mit $l_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^{\text{ges}} = 0$ erzeugt bzw. vernichtet werden (siehe auch Abschnitt 1.7). Somit tragen auch nur Zustände mit $l_z^{\text{ges}} = 0$, $S_z^{\text{ges}} = 0$ etwas zu den nicht-verschwindenden Übergangsmatrixelementen zum Vakuum bei.

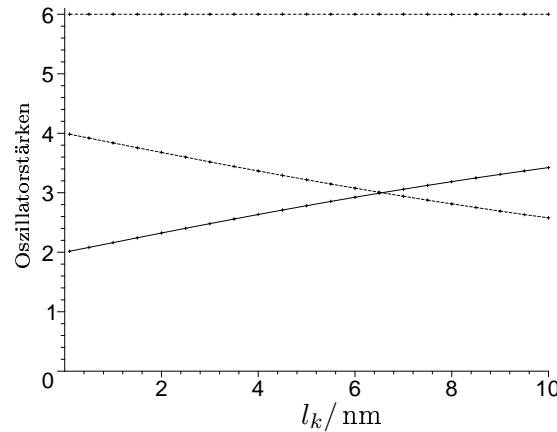


Abbildung 2.7: Die Abhängigkeit der Oszillatorstärke der beiden Absorptionslinien als Funktion der Oszillatorlänge l_k . Die durchgezogene Linie beschreibt den niederenergetischen und die gestrichelte Linie den hochenergetischen Übergang. Zusätzlich ist die Summe der beiden Beiträge aufgetragen. Durchweg wurde $L = 0$ verwendet.

Verkleinerung der Oszillatorlänge die Einflüsse der Coulomb-Wechselwirkung auf das System stetig verringern: Für sehr geringe Oszillatorlängen nähern sich die Oszillatorstärken nämlich mehr und mehr denen des wechselwirkungsfreien Systems. Mit zunehmender Wichtigkeit der Wechselwirkung (d.h. für große l_k) wird mehr und mehr Oszillatorstärke auf den niederenergetischen Übergang übertragen. Die Summe der Oszillatorstärken ist dabei stets 6 und damit – genau wie es sein soll – gleich der Anzahl der für die Elektronen und Löcher berücksichtigten Einteilchen-Zustände. Eine physikalisch plausible Erklärung dafür, dass der Zusammenhang zwischen den Oszillatorstärken und der Oszillatorlänge l_k in sehr guter Näherung linear ist, ist uns nicht bekannt.

Bis jetzt wurde ausschließlich das Absorptionsspektrum diskutiert. Wenn man das Emissionsspektrum ermitteln will, muss man zunächst eine Annahme über den Zustand machen, in welchem sich das Elektron-Loch-Paar vor der Emission befindet. Geht man davon aus, dass dies einer der Grundzustände ist und mittelt dann über diese, so erhält man im Falle eines Elektron-Loch-Paares das Emissionsspektrum – zumindest bis auf einen Faktor $1/4$ der von der Mittelung stammt – indem man in dem oben aufgeführten Absorptionsspektrum die hochenergetische Linie weglässt. Um dies genauer zu verstehen betrachtet man die Gleichungen (1.49) und (1.50) aus Abschnitt 1.7 und wendet diese speziell für den Fall eines Elektron-Loch-Paares an: $A_{|0\rangle}(\omega) := \sum_f |\langle f, N_X = 1 | \mathcal{P} | 0 \rangle|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega)$ bestimmt die Absorption und $B_i(\omega) := |\langle i, N_X = 1 | \mathcal{P} | 0 \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega)$ die Emission aus dem 1X-Anfangszustand $|i, N_X = 1\rangle$. Mittelt man nun über die vier möglichen 1X-Grundzustände, d.h. betrachtet man $\frac{1}{4} \sum_{i \in \text{gs}} B_i(\omega)$, so ist dies gerade der niederenergetische Anteil von $A_{|0\rangle}(\omega)$.

2.4.3 Nichtidentische Elektron- und Loch-Wellenfunktionen

Nachdem wir bis jetzt immer von identischen Wellenfunktionen für die Elektronen und Löcher ausgegangen sind, kommen wir in diesem Abschnitt zu den Veränderungen der optischen Spektren für den Fall, dass die Oszillatorlängen der Elektronen und Löcher verschieden sind, d.h. $l_k^e \neq l_k^h$ gilt.

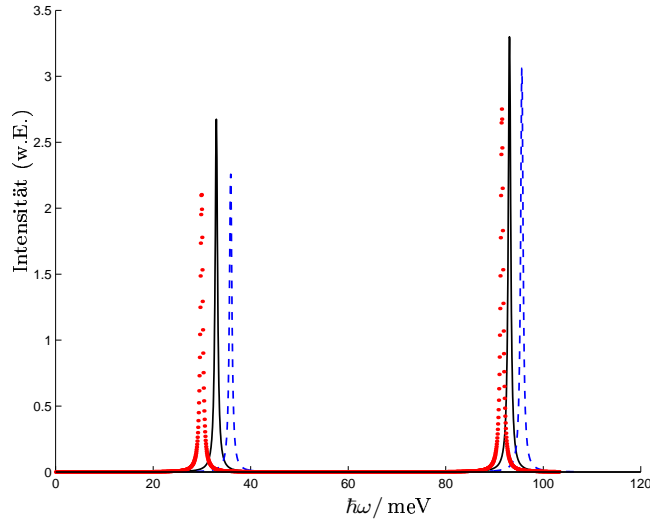


Abbildung 2.8: Absorptionsspektrum für $\hbar\omega_e = 40.20$ meV, $\hbar\omega_h = 15.37$ meV, $l_k^e = 5.4$ nm und $l_k^h = \delta \cdot l_k^e$ mit $\delta = 0.7$ (gepunktet), $\delta = 1$ (durchgezogen), $\delta = 1.3$ (gestrichelt).

Um den Einfluss verschiedener Oszillatorlängen auf die Coulomb-Wechselwirkung besser untersuchen zu können, halten wir die Einteilchen-Energien $\hbar\omega_e$ und $\hbar\omega_h$ konstant und verändern die effektive Masse der Löcher. Bei diesem Vorgehen verändern sich die wechselwirkungsfreien Spektren nicht. Die Oszillatorlänge des Lochs und damit die Ausdehnung der Wellenfunktion ändert sich aber mit der effektiven Masse. Für $\delta := l_k^h/l_k^e = 0.7, 1$ und 1.3 ist das Absorptionsspektrum in Abbildung 2.8 dargestellt. Man erkennt, dass es für $\delta > 1$ (gestrichelte Linie) zu einer Verschiebung zu höheren Energien kommt (Blauverschiebung), und dass sich für $\delta < 1$ (gepunktete Linie) eine Rotverschiebung ergibt. Dies kann man so interpretieren, dass die stärkere (schwächere) Lokalisation der Loch-Wellenfunktion, bedingt durch $\delta < 1$ ($\delta > 1$), bei gleicher Elektron-Wellenfunktion insgesamt zu einer stärkeren (schwächeren) Anziehung zwischen den beiden Ladungsträgern führt.

Die Peakhöhen nehmen in beiden Fällen ab, allerdings wirkt sich die gleiche relative Verkleinerung bei der Rotverschiebung stärker als bei der Blauverschiebung aus. Dies kann man anhand der Veränderung der Matrixelemente P_{ij} verstehen: Aufgrund der Klassifizierung der Einteilchen-Eigenfunktionen nach der z -Komponente des Drehimpulses und der Tatsache, dass hier nur die ersten drei Zustände niedrigster Energie berücksichtigt werden, ist die Matrix P_{ij} , die den Interband-Polarisations-Operator definiert, weiterhin diagonal. Die Diagonalelemente sind aber – im Gegensatz zum Fall identischer Wellenfunktionen – nicht mehr einfach gleich eins. In Abbildung 2.9 sind die Matrixelemente $P_{(0,0),(0,0)}$ und $P_{(0,\pm 1),(0,\pm 1)}$ in Abhängigkeit von $\delta = l_k^h/l_k^e$ dargestellt. Für $\delta = 1$ erhält man gerade den Wert $P_{i,i} = 1$, da die Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher in diesem Fall identisch sind. Für $\delta \neq 1$ sind die Matrixelemente stets kleiner eins. Dies ist anschaulich verständlich, da die Wellenfunktionen jetzt nicht mehr genau aufeinanderliegen und folgt mathematisch aus der Schwarz'schen Ungleichung

$$|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle, \quad (2.19)$$

wenn man bedenkt, dass die Einteilchen-Wellenfunktionen normiert sind.

Genau wie die Gesamtoszillatorstärke, fallen auch die einzelnen Dipolmatrixelemente für $\delta < 1$ schneller als für $\delta > 1$ ab. Da die Matrixelemente P_{ij} alle kleiner 1 sind und die Dipolmatrix

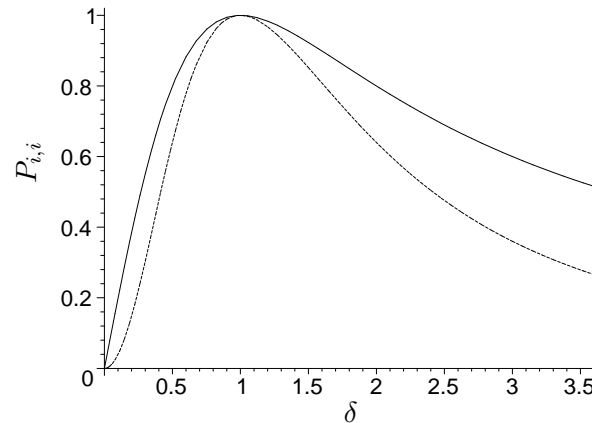


Abbildung 2.9: Die Dipolmatrixelemente $P_{(0,0),(0,0)}$ (durchgezogen) und $P_{(0,\pm 1),(0,\pm 1)}$ (gestrichelt) in Abhängigkeit von $\delta = l_k^h/l_k^e$.

weiterhin diagonal ist, ist auch die Summe aller Oszillatorstärken für $\delta \neq 1$ nach Gleichung (1.55) aus Abschnitt 1.8 geringer als im Falle $\delta = 1$.

2.5 Ergebnisse für zwei Elektron-Loch-Paare

Bis jetzt haben wir nur den Fall, in welchem sich ein Elektron-Loch-Paar im Quantenpunkt befindet, diskutiert. Dieser Fall ist für die häufig verwendete Untersuchung von Quantenpunkten mittels schwacher optischer Felder besonders interessant. Durch stärkere Anregung des Quantenpunktes wird man aber mehr wechselwirkende Elektron-Loch-Paare im Quantenpunkt erzeugen. Der Fall von zwei Elektron-Loch-Paaren, den wir analog zum dreidimensionalen System als Biexziton bezeichnen, bestimmt z.B. die optischen Nichtlinearitäten in dritter Ordnung im optischen Feld und wird im Folgenden diskutiert.

2.5.1 Energiespektren

Füllt man zwei Elektron-Loch-Paare in den oben beschriebenen Quantenpunkt, so ergibt sich das in Abbildung 2.10 dargestellte Energiespektrum. Man erkennt, dass auch in diesem Fall das gesamte Energiespektrum abgesenkt wird.

Um zu verstehen, warum dies der Fall ist, obgleich es nun – im Gegensatz zum Quantenpunkt mit einem Elektron-Loch-Paar – auch Ladungen gleichen Vorzeichens in der Nanostruktur gibt, betrachten wir die klassische Wechselwirkungsenergie E_{Coulomb} von N_h positiven und N_e negativen Ladungsträgern:

$$E_{\text{Coulomb}} \propto \sum_{i_e > j_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_{i_e} - \mathbf{r}_{j_e}|} + \sum_{i_h > j_h} \frac{1}{|\mathbf{r}_{i_h} - \mathbf{r}_{j_h}|} - \sum_{i_e, j_h} \frac{1}{|\mathbf{r}_{i_e} - \mathbf{r}_{j_h}|} .$$

Wenn man die Ladungsträger auf einem kleinen Raumgebiet einschließt, d.h. $|\mathbf{r}_{i_e}|, |\mathbf{r}_{i_h}| \rightarrow 0$, so skaliert die Wechselwirkungsenergie E_{Coulomb} mit der Anzahl der Ladungsträger wie $\frac{1}{2}N_e(N_e - 1) + \frac{1}{2}N_h(N_h - 1) - N_e N_h$. Diesen Ausdruck erhält man, wenn man die Anzahl der Wechselwirkungsbeiträge in jedem Summanden bestimmt und davon ausgeht, dass die Terme $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ in den einzelnen Summanden – bedingt durch die starke räumliche Einschränkung

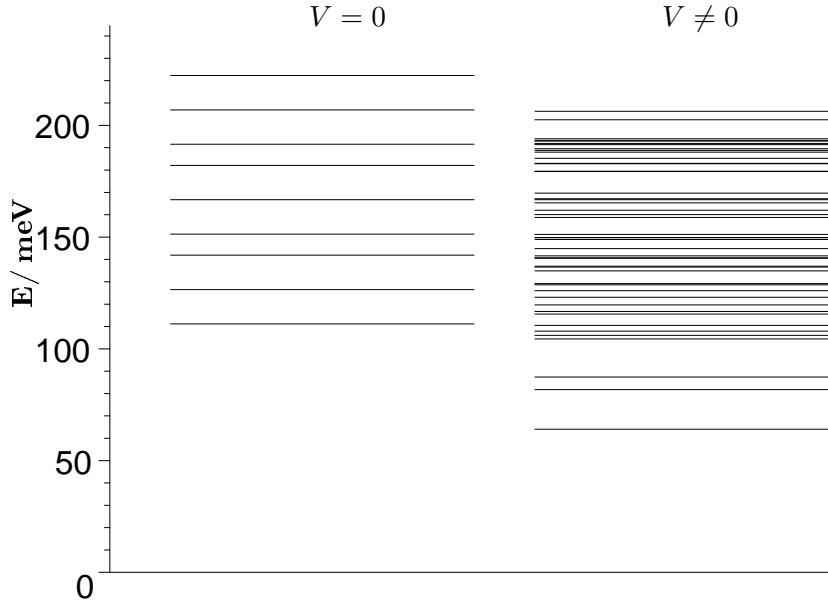


Abbildung 2.10: Energiespektrum für zwei Elektron-Loch-Paare. Links: Ohne Coulomb-Wechselwirkung. Rechts: mit Coulomb-Wechselwirkung.

der Ladungsträger – ungefähr gleich sind. Für die gleiche Anzahl von Elektronen und Löchern $N_e = N_h = N_X$ ergibt sich daraus dann, dass E_{Coulomb} mit $-N_X$ skaliert. Dies bedeutet aber nichts anderes, als dass man zumindest klassisch erwarten kann, dass die Energieniveaus alle zu niedrigeren Energien hin verschoben werden.

Genau wie im Fall eines Elektron-Loch-Paares wird auch in diesem Fall die Entartung der Energieniveaus im Vergleich zum nicht-wechselwirkenden Spektrum teilweise aufgehoben. Die minimale Entartung ist in Übereinstimmung mit den Überlegungen aus Abschnitt 1.5 gleich 1, da die Anzahl der im Quantenpunkt befindlichen Elektron-Loch-Paare gerade ist.

Der wechselwirkende Grundzustand hat – genau wie der nicht-wechselwirkende Grundzustand – einen verschwindenden Gesamtdrehimpuls $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h}$. Auch die z -Komponenten des Gesamtspins sowohl der Elektronen als auch der Löcher verschwinden im Grundzustand.

Biexziton-Bindungsenergie

Für den Fall eines Elektron-Loch-Paares haben wir gesehen, dass es aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung zu einer Bindung von Elektron und Loch kommt. Diesen Bindungszustand und die damit verknüpfte Exzitonen-Bindungsenergie B_X haben wir in Abschnitt 2.4.1 untersucht. Für zwei Elektronen und Löcher stellt sich die Frage, ob sich auch in diesem Fall durch die Coulomb-Wechselwirkung ein gebundener Komplex aus diesen vier Teilchen bilden kann. Dass die Bildung eines stabilen Komplexes aus zwei positiv und zwei negativ geladenen Teilchen im Prinzip möglich ist, ist aus der Molekülphysik bekannt: Aus zwei Wasserstoffatomen kann sich ein Wasserstoffmolekül bilden.

Damit es zu der Bildung eines gebundenen Biexzitons kommen kann, muss die Bindungsenergie B_{XX} , die über

$$B_{XX} = E_{\text{gs}}^{WW}(2eh) - 2E_{\text{gs}}^{WW}(eh) \quad (2.20)$$

definiert ist, negativ sein. Für den hier untersuchten Quantenpunkt ist die Bindungsenergie in der Tat negativ, so dass man die Bildung eines Biexzitons erwarten kann. Konkret erhält

man für unsere Parameter, die für III/V-Halbleitersysteme typisch sind, $B_{XX} = -1.90 \text{ meV}$. Diese Energie stimmt zumindest in der Größenordnung recht gut mit den experimentellen Werten überein: [37] liefert für die typischen Bindungsenergien des Biexzitons in III/V-Quantenpunktsystemen den Wert -3.0 meV und [21] ermittelt einen Wert von -3.1 meV für ein InGaAS/GaAs-System. Da genauere Angaben über die Parameter der in den Experimenten verwendeten Quantenpunkte fehlen, kann man mit dieser Übereinstimmung zufrieden sein.

Untersucht man die Biexzitonen mit Hilfe von Störungsrechnung erster Ordnung, stellt man etwas interessantes fest: Obgleich die für ein und zwei Elektron-Loch-Paare über Störungsrechnung ermittelten Grundzustandsenergien (33.76 meV und 67.52 meV) nahe an den mittels Diagonalisierung berechneten Werten liegen (32.96 meV und 64.02 meV), ist das unter Verwendung von Störungsrechnung ermittelte Biexziton *nicht* gebunden. Dies liegt daran, dass – wie man mit den in Abschnitt 1.6.2 hergeleiteten Formeln nachrechnen kann – für den ungestörten Grundzustand $|\{\{0, 0, \uparrow\}, \{0, 0, \downarrow\}\}_e, \{\{0, 0, \uparrow\}, \{0, 0, \downarrow\}\}_h\rangle$ in erster Ordnung Störungsrechnung

$$E_{\text{gs}}^{(1)}(2eh) = 2E_{\text{gs}}^{(1)}(1eh) \quad (2.21)$$

gilt und somit B_{XX} verschwindet. Auch die Hartree-Fock-Rechnung aus Abschnitt 2.7 liefert eine verschwindende Bindungsenergie des Biexzitons. Dies macht deutlich, dass die Bindung des Biexzitons durch höhere Korrelationen der Elektronen und Löcher hervorgerufen wird.

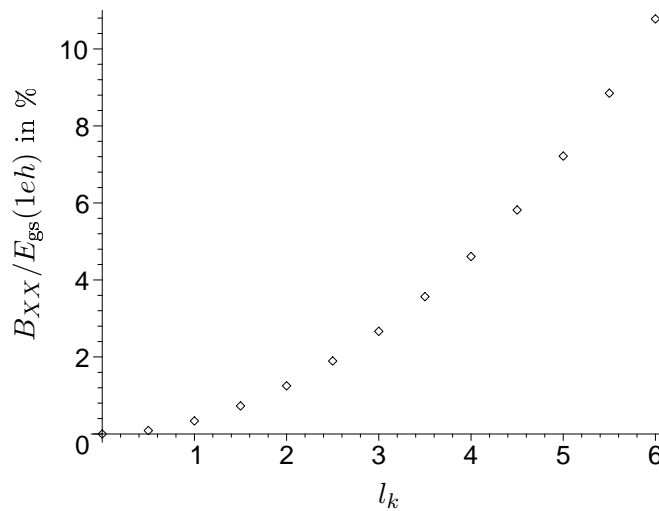


Abbildung 2.11: Biexziton-Bindungsenergie in Einheiten der Grundzustandsenergie des wechselwirkenden Systems mit einem Elektron-Loch-Paar $E_{\text{gs}}^{\text{WW}}(1eh)$. (Es wurde durchweg $L = 0$ verwendet.)

In Abbildung 2.11 ist die Biexziton-Bindungsenergie B_{XX} in Einheiten der Grundzustandsenergie $E_{\text{gs}}^{\text{WW}}(1eh)$ eines Elektron-Loch-Paares als Funktion der Oszillatorlänge l_k aufgetragen. Obgleich der Absolutwert mit zunehmendem l_k abnimmt, zeigt sich doch eine deutliche relative Zunahme der Bindungsenergie. Dies zeigt wiederum, dass die Coulomb-Wechselwirkung mit zunehmender Quantenpunktgröße wichtiger wird.

2.5.2 Optische Spektren

Nachdem wir in dem vorangegangenen Abschnitt das Energiespektrum eines Quantenpunktes, welcher mit zwei Elektron-Loch-Paaren gefüllt ist, betrachtet haben, befassen wir uns in diesem Abschnitt mit den optischen Spektren einer solchen Nanostruktur.

In Abbildung 2.12 ist das Emissionsspektrum des Quantenpunktes mit und ohne Coulomb-Wechselwirkung für den Fall eingetragen, dass sich das Elektron-Loch-Paar vor der Emission im Grundzustand befindet. Bedingt durch die insgesamt attraktive Coulomb-Wechselwirkung wird die Emissionslinie durch die Wechselwirkung zu niedrigeren Energien verschoben. Weiterhin ist zu erkennen, dass die Oszillatorstärke des Übergangs durch die Wechselwirkung erhöht wird.

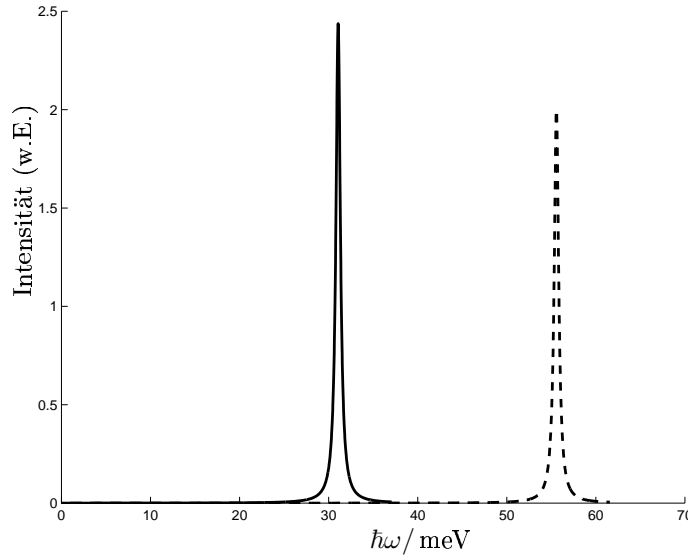


Abbildung 2.12: Emissionsspektrum $2X \rightarrow 1X$ eines Quantenpunktes unter der Annahme, dass sich das Biexziton vor der Emission im Grundzustand befand. Das Spektrum ist einmal mit (durchgezogen) und einmal ohne Coulomb-Wechselwirkung (gestrichelt) eingetragen.

Unter Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung liegt die Biexziton-Emissionslinie genau auf der Exzitonen-Emissionslinie. Dies ändert sich durch die Wechselwirkung der Ladungsträger: Die Emissionslinie unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung liegt bei 31.06 meV. Vergleicht man dies mit der Emissionslinie eines Exzitons im Grundzustand, die bei $E = 32.96$ meV liegt, erkennt man, dass die Biexzitonlinie gerade um die Bindungsenergie B_{XX} zu niedrigeren Energien verschoben ist. Wenn man davon ausgeht, dass die Emissionslinie gerade durch den Übergang von dem $2X$ -Grundzustand in den $1X$ -Grundzustand verursacht wird, erwartet man dies auch:

$$E^{2X \rightarrow 1X} = E_{\text{gs}}(2eh) - E_{\text{gs}}(1eh) = E_{\text{gs}}(1eh) + B_{XX} . \quad (2.22)$$

Die Höhe der wechselwirkungsfreien Emissionslinie spiegelt die Anzahl der optisch möglichen Übergänge $2X \rightarrow 1X$ wieder. Ausgehend von dem nicht entarteten Biexziton-Grundzustand kann man aufgrund der Spins der Elektronen und Löcher durch Emission nur zwei der vier möglichen nicht-wechselwirkenden $1X$ -Grundzustände erreichen, so dass sich die Oszillatorstärke zwei ergibt.

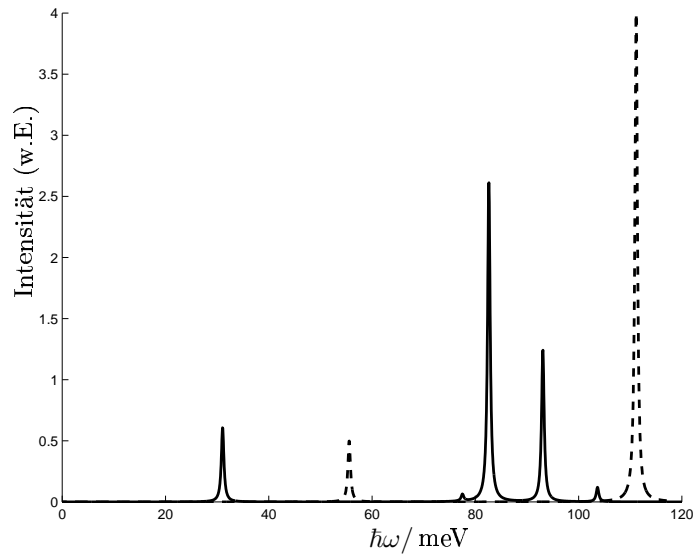


Abbildung 2.13: Absorptionsspektrum $1X \rightarrow 2X$ eines Quantenpunktes unter der Annahme, dass sich der Quantenpunkt vor der Absorption in einem der $1X$ -Grundzustände befand. Das Spektrum ist einmal mit (durchgezogen) und einmal ohne Coulomb-Wechselwirkung (gestrichelt) eingetragen.

Abbildung 2.13 zeigt das Absorptionsspektrum eines Quantenpunktes, der vor der Absorption mit einem Exziton gefüllt ist. Das dargestellte Spektrum entspricht einer Mittelung über die vier möglichen Spektren, die durch Absorption aus den vier verschiedenen Grundzuständen des Quantenpunktes mit nur einem Elektron-Loch-Paar entstehen können. Neben der durch die Wechselwirkung bedingten Verschiebung der Absorptionslinie, spaltet die hochenergetische Linie im Wesentlichen in zwei Linien auf. Die Summe der beiden zugehörigen Oszillatorstärken entspricht ungefähr der der wechselwirkungsfreien Linie. In dem dargestellten Absorptionsspektrum findet bei der Absorptionslinie geringerer Energie kaum ein Transfer von Oszillatorstärke statt. Das Aufspalten der hochenergetischen Absorptionslinie durch die Coulomb-Wechselwirkung wird in Abschnitt 2.6 näher erläutert und ist auf die verschiedenen möglichen Spinkonfigurationen zurückzuführen.

Auch im Falle des Absorptionsspektrums kann man die Höhen der wechselwirkungsfreien Linien verstehen. Betrachten wir dazu zunächst die hochenergetische Linie, die der Bildung eines p-Exzitons¹¹ durch Absorption eines Photons entspricht. Ausgehend von jedem der vier $1X$ -Grundzustände des wechselwirkungsfreien Systems kann man durch optische Anregung jeweils vier verschiedene p-Exzitonen erzeugen. Jeder dieser Übergänge hat dabei die Oszillatorstärke eins. Somit ergibt sich für das über die Grundzustände gemittelte Spektrum eine Oszillatorstärke $\frac{1}{4}(4 \times 4) = 4$ für die p-Exzitonen-Linie. Die niederenergetische Linie entspricht der Erzeugung eines zusätzlichen s-Exzitons. Aufgrund der Spinkonfigurationen kann aber nur für zwei der vier $1X$ -Grundzustände ein weiteres s-Exziton optisch erzeugt werden. Somit ergibt sich für die Peakhöhe des s-Exzitons: $\frac{1}{4}(2 \times 1) = \frac{1}{2}$.

¹¹In Anlehnung an die Atomphysik wird hier die Wellenfunktion mit einem Knoten in radialer Richtung als p-Zustand bezeichnet. Ein Exziton, welches sich aus einem Elektron und einem Loch in einem p-Zustand zusammensetzt, nennen wir hier p-Exziton. Analoges gilt für einen s-Zustand (kein Knoten) und ein s-Exziton.

2.6 Ergebnisse für bis zu sechs Elektron-Loch-Paare

In den letzten beiden Abschnitten wurden die Energiespektren und die optischen Spektren von Quantenpunkten mit einem und zwei Exzitonen untersucht. Nun geht es um die Energieniveaus und die optischen Spektren hoch angeregter Quantenpunkte, d.h. um Quantenpunkte mit vielen Elektron-Loch-Paaren.

2.6.1 Energiespektren

Da in unserem Modellsystem jeweils drei Zustände für die Elektronen und Löcher angenommen werden, kann man unter Berücksichtigung des Spin-Freiheitsgrades maximal sechs Elektron-Loch-Paare in den Quantenpunkt füllen. Die Energiespektren für diese Fälle sind in Abbildung 2.14 zusammengestellt.

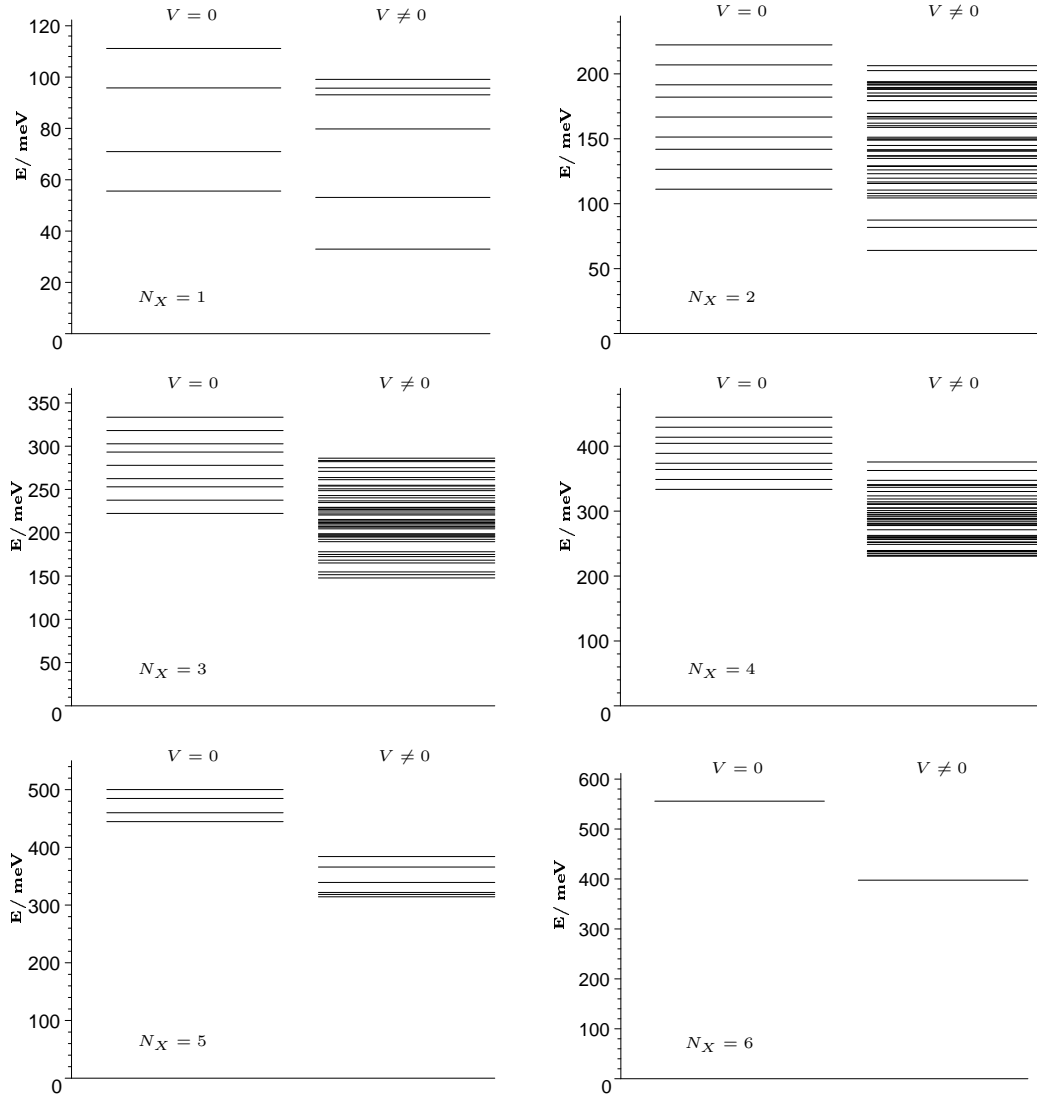


Abbildung 2.14: Energiespektren mit und ohne Coulomb-Wechselwirkung für verschiedene Anzahl N_X von Elektron-Loch-Paaren. Man beachte die unterschiedlichen Skalierungen der Energieachsen.

Wie wir auch schon bei der Behandlung der Energieniveaus eines und zweier Exzitonen gesehen haben, erkennt man auch im Falle der Multi-Exzitonspektren deutlich, dass alle Energiespektren durch die Wechselwirkung abgesenkt werden. Nach der klassischen Analyse aus Abschnitt 2.5 erwartet man einen ungefähr linearen Zusammenhang zwischen der Absenkung der Energieniveaus und der Anzahl der Exzitonen in dem Quantenpunkt. In Abbildung 2.15 ist die Differenz $\Delta E_{\text{gs}} = E_{\text{gs}}^{\text{WW}} - E_{\text{gs}}^0$ als Funktion der Anzahl N_X an Elektron-Loch-Paaren dargestellt. Zusätzlich wurde eine Gerade eingetragen, welche einen linearen Trend $\Delta E_{\text{gs}} \propto -N_X$ beschreibt. Diese Gerade gibt die mittels exakter Diagonalisierung gewonnenen Ergebnisse recht gut wieder.

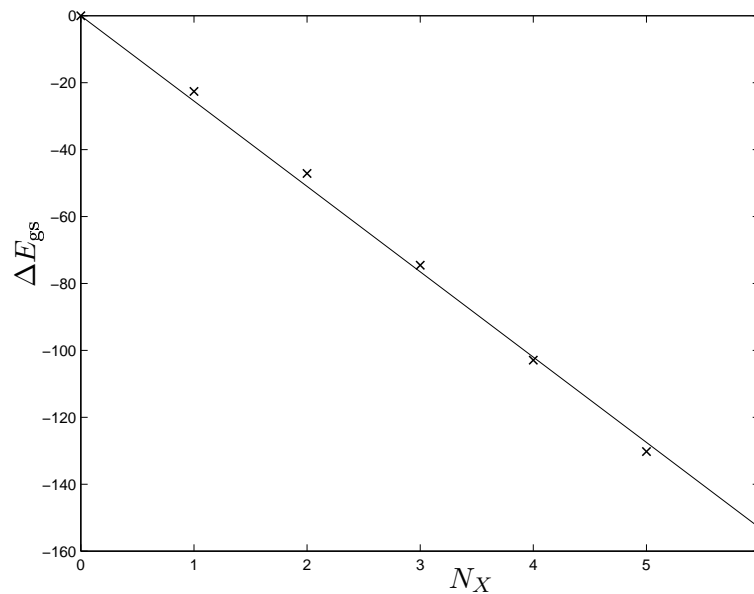


Abbildung 2.15: Energiedifferenz ΔE_{gs} des Grundzustandes mit und ohne Wechselwirkung als Funktion der Anzahl der Elektron-Loch-Paare N_X und interpolierte Gerade.

Neben der Absenkung der Energieniveaus fällt bei Betrachtung von Abbildung 2.14 auf, dass die Anzahl der Eigenzustände als Funktion von N_X zunächst zunimmt, dann aber wieder abnimmt. Dieses Verhalten wird durch die geringe Anzahl der gebundenen Einteilchen-Zustände hervorgerufen: Die Dimension der Matrizen und damit die Anzahl der Eigenwerte ist nämlich durch $\binom{N_s}{N_X}^2$ gegeben. Hierbei bezeichnet N_s die Anzahl der Einteilchen-Zustände für die Elektronen und Löcher und N_X die Anzahl der Exzitonen. In unserem Beispiel ist die Anzahl der Eigenwerte, für von Eins nach Sechs steigendes N_X , durch 36, 225, 400, 225, 36 und 1 gegeben. Aufgrund von Entartung gibt es nicht ganz so viele Energieniveaus wie Eigenwerte.

Der Entartungsgrad des Grundzustandes ist für den hier behandelten Quantenpunkt 4, falls sich eine ungerade Anzahl von Exzitonen in der Nanostruktur befindet, und 1 bei einer geraden Anzahl. Dies stimmt mit der Analyse aus Abschnitt 1.5 überein. Weiterhin zeigt sich, dass alle Grundzustände den Gesamtdrehimpuls $l_z^{\text{ges},e} + l_z^{\text{ges},h} = 0$ besitzen und dass für eine gerade Anzahl von Elektron-Loch-Paaren im Grundzustand auch die z -Komponente des Gesamtspins verschwindet. Für eine ungerade Anzahl von Exzitonen nimmt die z -Komponente des Gesamtspins die Werte 0 und ± 1 an.

2.6.2 Optische Spektren

Kommen wir nun zur Diskussion der optischen Spektren. Genau wie in den vorangegangenen Abschnitten, verwenden wir identische Wellenfunktionen für die Elektronen und Löcher und somit $P_{ij} = \delta_{ij}$.

Emissionsspektren

In Abbildung 2.16 sind die Emissionsspektren bei einer anfänglichen Füllung von 1 bis 6 Exzitonen dargestellt. Es wurde angenommen, dass sich die N_X Elektron-Loch-Paare vor der Emission in einem der möglichen Grundzustände befinden. Über die daraus je nach Grundzustand resultierenden Spektren wurde dann gemittelt.

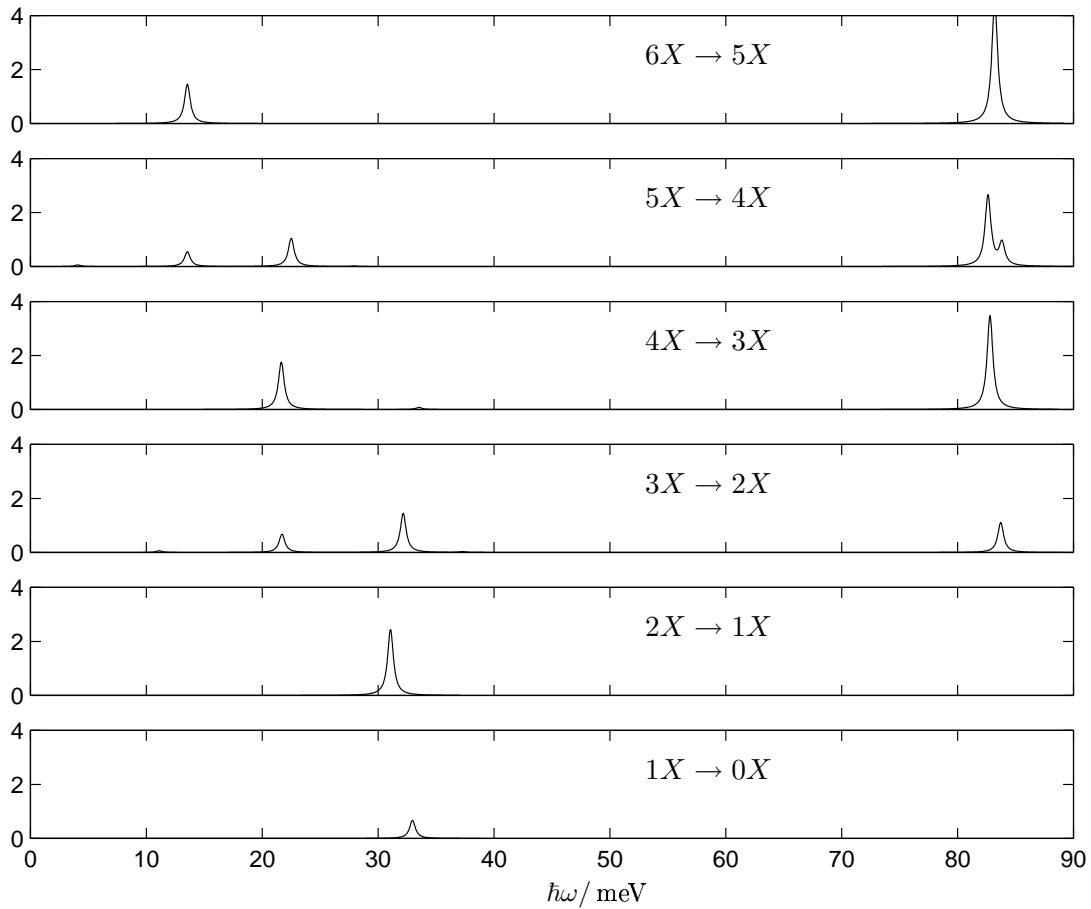


Abbildung 2.16: Emissionsspektren für den Fall, dass sich der Quantenpunkt vor der Emission in einem der Grundzustände befindet. Entlang der y -Achse ist jeweils die Intensität in willkürlichen Einheiten aufgetragen.

Die Exzitonen- und Biexzitonenlinie wurde schon in den vorangegangenen Abschnitten diskutiert. Hier sei nur noch einmal daran erinnert, dass die Emissionslinie für $N_X = 2$ durch die Anwesenheit des zweiten Exzitons renormiert wird.

Für $N_X = 3$ kommt es zur Bildung einer zusätzlichen hochenergetischen Linie. Im Bild wechselwirkungsfreier Elektronen und Löcher wird diese durch die Rekombination eines p-Exzitons beschrieben. Unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung ist eine solche Zuordnung

natürlich nicht mehr möglich, da ein Vielteilchen-Zustand kein einfacher antisymmetrisierter Produktzustand ist, sondern eine Linearkombination solcher Zustände darstellt. Im Folgenden wollen wir die Notation eines s- und p-Exzitons dennoch beibehalten, um die *qualitative* Diskussion der Spektren zu vereinfachen. Neben der hochenergetischen Linie existieren noch zwei weitere niederenergetische Linien. Die eine liegt energetisch ungefähr bei der Exzitonen- und Biexzitonen-Emissionslinie und die andere etwas darunter. Wenn man davon ausgeht, dass beide Linien durch die Rekombination von s-Exzitonen hervorgerufen werden, kann man das Aufspalten der s-Exzitonenlinie dadurch erklären, dass in dem einen Fall die beiden in dem s- und p-Zustand verbleibenden Elektronen bzw. Löcher gleiche Spins und in dem anderen Fall ungleiche Spins besitzen. Diese beiden Fälle sind für die Elektronen schematisch in Abbildung 2.17 dargestellt. Der energetische Unterschied dieser beiden Konfigurationen

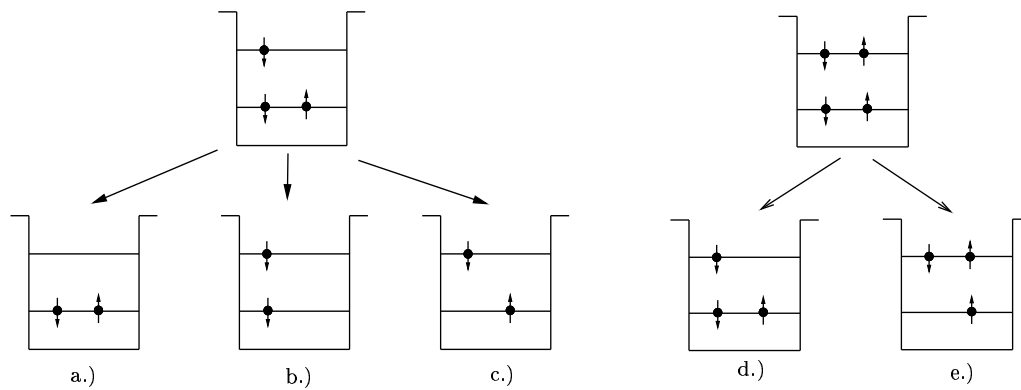


Abbildung 2.17: Darstellung typischer (nicht-wechselwirkender) Elektronenkonfigurationen vor und nach der Emission für $N_X = 3$ und $N_X = 4$. $N_X = 3$: a.) entspricht der Emission eines p-Exzitons, b.) und c.) entsprechen s-Exzitonen, von denen b.) noch durch die Austauschwechselwirkung renormiert ist. $N_X = 4$: d.) entspricht der Emission eines p-Exzitons und e.) der eines s-Exzitons. Für $N_X = 4$ wirkt die Austauschwechselwirkung unabhängig von der Spinrichtung des rekombinierten Elektrons.

wird durch die Coulomb-Wechselwirkung hervorgerufen: Nur für den Fall gleicher Spins liefern die Austauschterme einen Beitrag. Berechnet man die Energieverschiebung der beiden Konfigurationen mittels Störungsrechnung erster Ordnung, findet man unter Verwendung der Gleichungen aus Abschnitt 1.6 und der Symmetrie der Coulomb-Matrixelemente für identische Elektronen- und Loch-Wellenfunktionen $\Delta E_{\text{Spin}} = 2V_{12,12}^{ee} = 9.77 \text{ meV}$. Dieser Wert stimmt sehr gut mit der Aufspaltung aus Abbildung 2.16 überein. Das gleiche qualitative Argument kann das Aufspalten der Linie des s-Exzitons für $N_X = 5$ erklären.

Für $N_X = 4$ und $N_X = 6$ erhält man im Wesentlichen zwei Linien, welche man wieder als eine s- bzw. p-Exzitonen-Rekombination interpretieren kann. Da in diesem Fall das im s-Zustand verbleibende Exziton stets einen Partner gleichen Spins hat (vgl. Abbildung 2.17), entfällt in diesem Fall für keine Spineinstellung des s-Elektrons der Austauschterm, so dass es zu keiner Aufspaltung der s-Exzitonen-Emissionslinie kommt.

Versteckte Symmetrie

Die Spektren zeigen eine weitere interessante Eigenschaft: Obgleich die s-Exzitonenlinien bei zunehmender Anzahl von Exzitonen eine deutliche Verschiebung hin zu niedrigeren Energien erfahren, bleibt die energetische Lage der p-Exzitonenlinie im Wesentlichen konstant. Die Verschiebung der s-Exzitonenlinien lässt sich als verstärkte Renormierung durch die anderen

Ladungsträger deuten. Dass sich die Lage der hochenergetischen Linie nur wenig ändert, ist durch eine „versteckte Symmetrie“ (engl. „*hidden symmetry*“) zu erklären [16, 34]. Diese versteckte Symmetrie wird dadurch hervorgerufen, dass erstens die Einteilchen-Energieniveaus des harmonischen Oszillators ihre spezielle Entartungsstruktur besitzen und zweitens die Elektron- und Loch-Wellenfunktionen als identisch angenommen wurden. Die Kernaussage der „versteckten Symmetrie“ besteht darin, dass die Bindungsenergie eines Exzitons in der i -ten Schale *nicht* oder nur in sehr geringem Maße durch die Anwesenheit anderer Elektron-Loch-Paare in dieser Schale beeinflusst wird. Für eine nähere Erläuterung der „versteckten Symmetrie“ muss hier auf die Literatur verwiesen werden [16, 34].

Absorptionsspektren

Nachdem wir zumindest ein qualitatives Verständnis der Emissionsspektren erhalten haben, wenden wir uns nun den Absorptionsspektren zu.

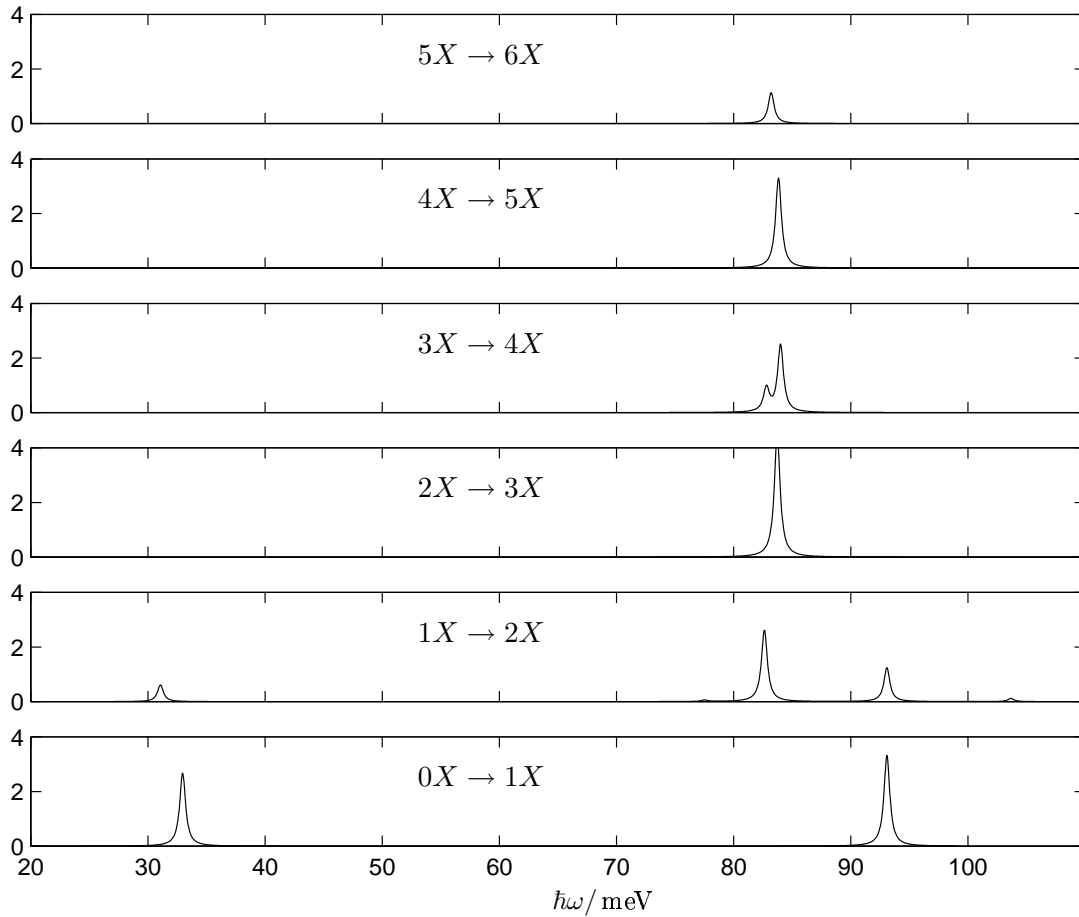


Abbildung 2.18: Absorptionsspektren für den Fall, dass sich der Quantenpunkt vor der Absorption in einem Grundzustande befindet. Entlang der y -Achse ist jeweils die Intensität in willkürlichen Einheiten aufgetragen.

In Abbildung 2.18 ist das Absorptionsspektrum des Quantenpunktes für $N_X = 0$ bis $N_X = 5$ Exzitonen dargestellt. Für die Absorption des leeren Dots erhält man zwei Linien, die der Bildung eines s-Exzitons bzw. p-Exzitons entsprechen. Für die Übergänge $1X \rightarrow 2X$ ergibt sich eine niederenergetische Linie, die einem s-Exziton entspricht und aufgrund der Biexzitonen-

Bindungsenergie renormiert ist und im Wesentlichen zwei hochenergetische Linien, die auf die Bildung eines durch die Absorption erzeugten p-Exzitons zurückzuführen sind. Die Aufspaltung der p-Exzitonen-Linie wird auch hier durch die Austauschterm hervorgerufen: Je nach Einstellung des Spins des zusätzlich erzeugten p-Elektrons bzw. p-Lochs relativ zu dem des s-Elektrons bzw. s-Lochs liefern die Austauschterm der Coulomb-Wechselwirkung entweder einen verschwindenden oder einen nicht-verschwindenden Beitrag.

Für das Absorptionsspektrum von mehr als zwei Exzitonen aus dem Grundzustand ändert sich die Lage der Absorptionslinie kaum. Dies ist verständlich, wenn man bedenkt, dass durch die Absorption nur zusätzliche p-Exzitonen erzeugt werden können und diese durch die „versteckte Symmetrie“ alle mehr oder weniger dieselbe Energie besitzen.

2.7 Die Hartree-Fock-Näherung für ein wechselwirkendes Elektron-Loch-Gas

Nachdem wir in den vorangegangenen Abschnitten das Vielteilchensystem der wechselwirkenden Elektronen und Löcher mittels exakter Diagonalisierung untersucht haben, beschäftigt sich dieser Abschnitt mit den Hartree-Fock-Gleichungen für ein wechselwirkendes Gas von Elektronen und Löchern. Die Beschreibung eines wechselwirkenden Vielteilchen-Systems in Hartree-Fock-Näherung ist in der Festkörperphysik weit verbreitet, da diese Methode vergleichsweise einfach ist und häufig bereits die wichtigsten Wechselwirkungsbeiträge beinhaltet. Nachdem im nächsten Abschnitt zunächst die Hartree-Fock-Gleichungen vorgestellt und erläutert werden, geben wir in den Abschnitten 2.7.2 und 2.7.3 zwei unterschiedliche Wege zur Herleitung dieser Gleichungen an. Anschließend wird in Abschnitt 2.7.4 – motiviert durch die beiden Herleitungen – das aus Kapitel 2.4 bekannte Ausbleiben einer Singulett-Triplett Aufspaltung im Grundzustand für den Fall eines Elektron-Loch-Paares diskutiert. Abschnitt 2.7.5 behandelt schließlich die Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen und vergleicht die so gewonnenen Grundzustandsenergien mit denen der exakten Diagonalisierung.

2.7.1 Die Hartree-Fock-Gleichungen

Für ein zweikomponentiges wechselwirkendes Gas aus Elektronen (e) und Löchern (h) lauten die gekoppelten Hartree-Fock-Gleichungen für die Envelope-Funktionen der Elektronen und Löcher

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^e(\mathbf{r}) + V_H^e(\mathbf{r}) - V_H^h(\mathbf{r}) \right] \varphi_i^e(\mathbf{r}) - \int d^3r' V_X^e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i^e(\mathbf{r}') &= \zeta_i^e \varphi_i^e(\mathbf{r}) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^h(\mathbf{r}) + V_H^h(\mathbf{r}) - V_H^e(\mathbf{r}) \right] \varphi_i^h(\mathbf{r}) - \int d^3r' V_X^h(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i^h(\mathbf{r}') &= \zeta_i^h \varphi_i^h(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.23)$$

mit dem lokalen Hartree-Potential

$$V_H^\lambda(\mathbf{r}) = \int d^3r' \left(\sum_j n_j^\lambda |\varphi_j^\lambda(\mathbf{r}')|^2 \right) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (2.24)$$

und dem nicht-lokalen Fock- oder Austausch-Potential

$$V_X^\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \sum_j n_j^\lambda \varphi_j^{\lambda*}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

Dabei gibt n_j^λ an, ob der Zustand $\varphi_j^\lambda(\mathbf{r})$ besetzt ist oder nicht. $\lambda \in \{e, h\}$ bezeichnet den Bandindex und $V(\mathbf{r})$ ist das Coulomb-Potential. In den folgenden Abschnitten steht $\varphi_j^\lambda(\mathbf{r})$ für $\tilde{\varphi}_j^\lambda(\mathbf{r})\chi_j(\sigma)$, worin $\tilde{\varphi}_j^\lambda(\mathbf{r})$ den reinen Bahnzustand und $\chi_j(\sigma) = \langle \sigma | \chi_j \rangle$ die Projektion des Spinzustandes $|\chi_j\rangle$ auf den Spineigenzustand $|\sigma\rangle$ bezeichnet. Da sowohl der Einteilchen-Anteil des Hamiltonoperators als auch die Coulomb-Wechselwirkung spinunabhängig sind, kann man annehmen, dass $|\chi_j\rangle$ ein Eigenzustand des Spinoperators ist, d.h. $|\chi_j\rangle = |\sigma\rangle$. Weiterhin ist $\int d^3r$ im Folgenden als $\sum_\sigma \int d^3r$ aufzufassen.

Die Hartree-Potentiale entsprechen den klassischen Coulomb-Potentialen, welche durch die mittlere Ladungsverteilung aller Elektronen bzw. Löcher erzeugt werden. Der Fockterm besitzt kein klassisches Analogon. Im Gegensatz zum Hartreeterm liefert der Fockterm nur einen Beitrag zwischen Wellenfunktionen gleichen Spins. Dies sieht man wie folgt:

$$\begin{aligned} \int d^3r' V_X^\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i^\lambda(\mathbf{r}') &= - \int d^3r' \sum_j n_j^\lambda \varphi_j^{\lambda*}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) \varphi_i^\lambda(\mathbf{r}') \\ &= - \int d^3r' \sum_{\sigma'} \sum_j n_j^\lambda \tilde{\varphi}_j^{\lambda*}(\mathbf{r}') \chi_j^*(\sigma') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) \tilde{\varphi}_i^\lambda(\mathbf{r}') \chi_i(\sigma') \\ &= - \int d^3r' \sum_j \delta_{\sigma_j, \sigma_i} n_j^\lambda \tilde{\varphi}_j^{\lambda*}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) \tilde{\varphi}_i^\lambda(\mathbf{r}') . \end{aligned}$$

Im ersten Schritt wurde die Definition der Fock-Potentiale aus Gleichung (2.25) eingesetzt, dann wurde $\varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) = \tilde{\varphi}_j^\lambda(\mathbf{r})\chi_j(\sigma)$ benutzt und schließlich wurde $\sum_{\sigma'} \chi_j^*(\sigma') \chi_i(\sigma') = \delta_{\sigma_j, \sigma_i}$ verwendet.

Das Gleichungssystem (2.23) kann auf zwei sehr verschiedenen Wegen hergeleitet werden. Diese beiden Herleitungen, die Licht auf den Elektron-Loch-Hamiltonoperator (2.26) bzw. (1.14) mit den darin enthaltenen bzw. nicht enthaltenen Prozessen werfen, werden im Folgenden kurz skizziert.

2.7.2 Erste Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen

In Envelope-Näherung lässt sich die Einteilchen-Basis als $\psi_{n,\lambda}(\mathbf{r}) = \varphi_n^\lambda(\mathbf{r})u_\lambda(\mathbf{r})$ schreiben (s. Abschnitt 1.1), wobei $\{\varphi_n^\lambda(\mathbf{r})\}_n$ eine Basis des Raumes der quadratintegrablen Funktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$ bildet. Bezüglich einer solchen Einteilchen-Basis hat der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung immer die Form:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \sum_{ij} \varepsilon_{ij}^e e_i^\dagger e_j + \sum_{ij} \varepsilon_{ij}^h h_i^\dagger h_j \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \left\{ V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l + [V_{ij,kl}^{hh}]^* h_i^\dagger h_j^\dagger h_k h_l - 2[V_{ik,jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l \right\} . \end{aligned} \quad (2.26)$$

Hierbei bezeichnet $e_i^\dagger (e_i)$ wie üblich den Erzeuger (Vernichter) eines Elektrons im Einteilchen-Zustand $\varphi_i^e(\mathbf{r})$ im Leitungsband. Analog erzeugen (vernichten) die Operatoren $h_i^\dagger (h_i)$ ein Loch im Einteilchen-Zustand $\varphi_i^h(\mathbf{r})$ im Valenzband. Der Index i beinhaltet dabei sowohl den Bahn- als auch den Spinindex.

Der Hamiltonoperator hängt über die Matrixelemente

$$V_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \int d^3r \int d^3r' \varphi_i^{\lambda*}(\mathbf{r}) \varphi_j^{\lambda'*}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \varphi_k^{\lambda'}(\mathbf{r}') \varphi_l^\lambda(\mathbf{r}) \quad (2.27)$$

und

$$\varepsilon_{ij}^\lambda = \int d^3r \varphi_i^{\lambda*}(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^\lambda(\mathbf{r}) \right] \varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

noch explizit von den Envelope-Einteilchen-Zuständen ab. Diese Abhängigkeit verwenden wir im Folgenden, um die Hartree-Fock-Wellenfunktionen zu ermitteln. Um dies zu erreichen suchen wir den Grundzustand mit N_e Elektronen und N_h Löchern in der Form

$$|\phi\rangle = \prod_{\substack{i \\ \sum_i n_i^e = N_e}} (e_i^\dagger)^{n_i^e} \prod_{\substack{j \\ \sum_j m_j^h = N_h}} (h_j^\dagger)^{m_j^h} |0\rangle \quad (2.29)$$

und bestimmen nun die orthonormierten Envelope-Einteilchen-Basen $\{\varphi_i^e(\mathbf{r})\}_i$ und $\{\varphi_i^h(\mathbf{r})\}_i$ derart, dass das Funktional

$$E\{|\phi\rangle\} = \frac{\langle\phi|\mathbf{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \quad (2.30)$$

minimal wird. Zu diesem Zweck können wir mit einem beliebigen Basissatz $\{\varphi_i^e(\mathbf{r})\}_i$ für die Elektronen und $\{\varphi_i^h(\mathbf{r})\}_i$ für die Löcher starten und das Energiefunktional (2.30) mittels der Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle\phi| \sum_{ij} \varepsilon_{ij}^e e_i^\dagger e_j + \sum_{ij} \varepsilon_{ij}^h h_i^\dagger h_j |\phi\rangle &= \sum_i \varepsilon_{ii}^e n_i^e + \sum_i \varepsilon_{ii}^h n_i^h \\ \langle\phi| \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{ee} e_i^\dagger e_j^\dagger e_k e_l |\phi\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{ij} (V_{ij,ji}^{ee} - V_{ij,ij}^{ee}) n_i^e n_j^e \\ \langle\phi| \frac{1}{2} \sum_{ijkl} [V_{ij,kl}^{hh}]^* h_i^\dagger h_j^\dagger h_k h_l |\phi\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{ij} ([V_{ij,ji}^{hh}]^* - [V_{ij,ij}^{hh}]^*) n_i^h n_j^h \\ \langle\phi| - \sum_{ijkl} [V_{ik,jl}^{he}]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l |\phi\rangle &= - \sum_{ij} [V_{ij,ji}^{he}]^* n_i^h n_j^e, \end{aligned} \quad (2.31)$$

die man den Gleichungen (1.40) und (1.47) aus Kapitel 1.6.2 entnehmen kann, auswerten. Mit den oben angeführten Envelope-Einteilchen-Basen findet man auf diese Weise einen Energieerwartungswert E^* . Verwendet man nun einen anderen Satz von Envelope-Einteilchen-Basen $\{\varphi_i'^e(\mathbf{r})\}_i$ und $\{\varphi_i'^h(\mathbf{r})\}_i$, kann man unter Verwendung der Gleichungen (2.29) und (2.31) den zugehörigen Energieerwartungswert E'^* wieder über die Gleichung (2.30) bestimmen. Würde man nun die Erwartungswerte aller unendlich vieler Basen bestimmen und am Schluss das Basispaar auswählen, welches das minimale E^* liefert, so hätte man das – im Sinne des Ritz'schen Variationsverfahrens – optimale Einteilchen-Basenpaar gefunden.

Die gerade beschriebene Suche nach der optimalen Einteilchen-Basis kann unter Verwendung der Variationsableitung systematisiert werden, da man mit ihrer Hilfe ein selbstkonsistent zu lösendes Eigenwertproblem erhält. Unter Verwendung der Funktionalableitung

$$\frac{\delta(\varphi_i^{\lambda*}(\mathbf{r}))}{\delta(\varphi_{i'}^{\lambda'*}(\mathbf{r}'))} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{i,i'} \delta_{\lambda,\lambda'}, \quad (2.32)$$

wie auch der Gleichungen (2.27) und (2.28) gelangt man, wenn man noch die Symmetrie $V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ausnutzt, mit der Forderung

$$\frac{\delta(\langle\phi|\mathbf{H}|\phi\rangle - \zeta_i^\lambda (n_i^\lambda \int d^3r |\varphi_i^\lambda(\mathbf{r})|^2 - 1))}{\delta(\varphi_i^{\lambda'*}(\mathbf{r}''))} \stackrel{!}{=} 0, \quad (2.33)$$

die der Extremalisierung des Funktional (2.30) entspricht, zu Gleichung (2.23). Im letzten Schritt wurde der Lagrange-Multiplikator ζ_i^λ eingeführt, um normierte Zustände zu erhalten. Weiterhin wurde die Normierung $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ für die Zustände (2.29) verwendet.

2.7.3 Zweite Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen

In erster Quantisierung lautet der allgemeine Elektron-Loch-Hamiltonoperator in Envelope-Näherung:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \underbrace{\sum_{i_e} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}_{i_e}} + V_{\text{conf}}^e(\mathbf{r}_{i_e}) \right]}_{\mathbf{H}_0^e} + \underbrace{\sum_{i_h} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_{\mathbf{r}_{i_h}} + V_{\text{conf}}^h(\mathbf{r}_{i_h}) \right]}_{\mathbf{H}_0^h} \\ & + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i_e \neq j_e} V(\mathbf{r}_{i_e} - \mathbf{r}_{j_e})}_{\mathbf{H}_{\text{WW}}^{ee}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i_h \neq j_h} V(\mathbf{r}_{i_h} - \mathbf{r}_{j_h})}_{\mathbf{H}_{\text{WW}}^{hh}} - \underbrace{\sum_{i_e, j_h} V(\mathbf{r}_{i_e} - \mathbf{r}_{j_h})}_{\mathbf{H}_{\text{WW}}^{eh}} . \end{aligned} \quad (2.34)$$

Um zu den Hartree-Fock-Gleichungen zu gelangen, macht man für den Grundzustand folgenden Ansatz:

$$\phi(\mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_2^e, \dots, \mathbf{r}_{N_e}^e; \mathbf{r}_1^h, \mathbf{r}_2^h, \dots, \mathbf{r}_{N_h}^h) = \phi_e(\mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_2^e, \dots, \mathbf{r}_{N_e}^e) \phi_h(\mathbf{r}_1^h, \mathbf{r}_2^h, \dots, \mathbf{r}_{N_h}^h) . \quad (2.35)$$

Hierbei bezeichnen $\phi_e(\mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_2^e, \dots, \mathbf{r}_{N_e}^e)$ und $\phi_h(\mathbf{r}_1^h, \mathbf{r}_2^h, \dots, \mathbf{r}_{N_h}^h)$ jeweils Slaterdeterminanten für die Elektronen bzw. Löcher, d.h.

$$\begin{aligned} & \phi(\mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_2^e, \dots, \mathbf{r}_{N_e}^e; \mathbf{r}_1^h, \mathbf{r}_2^h, \dots, \mathbf{r}_{N_h}^h) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{N_e!}} \sum_{P \in S_{N_e}} \text{sign}(P) \varphi_{n_{P(1)}}^e(\mathbf{r}_1^e) \dots \varphi_{n_{P(N_e)}}^e(\mathbf{r}_{N_e}^e) \right) \\ & \times \left(\frac{1}{\sqrt{N_h!}} \sum_{P' \in S_{N_h}} \text{sign}(P') \varphi_{n_{P'(1)}}^h(\mathbf{r}_1^h) \dots \varphi_{n_{P'(N_h)}}^h(\mathbf{r}_{N_h}^h) \right) . \end{aligned} \quad (2.36)$$

S_N bezeichnet dabei die Menge der Permutationen von N Teilchen und $\text{sign}(P)$ ist $+1$, falls die Permutation gerade ist und -1 , wenn die Permutation ungerade ist. In diesem Ansatz behandelt man also jeweils die Elektronen und Löcher untereinander als ununterscheidbar, geht aber davon aus, dass man Elektronen und Löcher sehr wohl voneinander unterscheiden kann.

Nun sucht man wieder die Einteilchen-Funktionen, welche das Energiefunktional (2.30) minimieren. Aufgrund des Produktansatzes und unter der Annahme, dass die Einteilchen-Zustände $\{\varphi_i^e(\mathbf{r})\}_i$ und $\{\varphi_i^h(\mathbf{r})\}_i$ untereinander jeweils orthonormiert sind, ergibt sich:

$$E\{|\phi\rangle\} = \langle \phi | \mathbf{H} | \phi \rangle = \langle \phi_e | \mathbf{H}_0^e + \mathbf{H}_{\text{WW}}^{ee} | \phi_e \rangle + \langle \phi_h | \mathbf{H}_0^h + \mathbf{H}_{\text{WW}}^{hh} | \phi_h \rangle + \langle \phi | \mathbf{H}_{\text{WW}}^{eh} | \phi \rangle . \quad (2.37)$$

Die Auswertung der ersten beiden Summanden erfolgt z.B. in [8] und liefert in unserer Notation

$$\begin{aligned} & \langle \phi_\lambda | \mathbf{H}_0^\lambda + \mathbf{H}_{\text{WW}}^{\lambda\lambda} | \phi_\lambda \rangle \\ &= \sum_i \int d^3r \varphi_i^{\lambda*}(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^\lambda(\mathbf{r}_{i\lambda}) \right] \varphi_i^\lambda(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^3r \int d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[|\varphi_i^\lambda(\mathbf{r})|^2 |\varphi_j^\lambda(\mathbf{r}')|^2 - \varphi_i^{*\lambda}(\mathbf{r}) \varphi_j^{*\lambda}(\mathbf{r}') \varphi_i^\lambda(\mathbf{r}') \varphi_j^\lambda(\mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

mit $\lambda \in \{e, h\}$. Für den letzten Summanden aus Gleichung (2.37) findet man nach ein paar Zeilen Rechnung

$$\langle \phi | \mathbf{H}_{\text{WW}}^{eh} | \phi \rangle = \sum_{ie, jh} \int d^3r^e \int d^3r^h V(\mathbf{r}^e - \mathbf{r}^h) |\varphi_{ie}^e(\mathbf{r}^e)|^2 |\varphi_{jh}^h(\mathbf{r}^h)|^2 . \quad (2.39)$$

Durch Variation unter Verwendung der Gleichungen (2.32) und (2.33) gelangt man auch auf diesem Wege wieder zu den Hartree-Fock-Gleichungen (2.23).

2.7.4 Folgerungen

Nun haben wir die Hartree-Fock-Gleichungen (2.23) für ein System wechselwirkender Elektronen und Löcher in Envelope-Näherung auf zwei verschiedenen Wegen gewonnen. Zum einen ausgehend von dem Hamiltonoperator¹² (2.26), formuliert in Envelope-Näherung und zweiter Quantisierung, und zum anderen durch einen Variationsansatz für die Gesamtwellenfunktion des Grundzustandes. In diesem Ansatz sind wir davon ausgegangen, dass man die Elektronen von den Löchern unterscheiden kann. Diese *Unterscheidbarkeit* hat zur Folge, dass in den Hartree-Fock-Gleichungen für die Elektronen (Löcher) nur der Hartree-Term der Löcher (Elektronen) auftritt und kein Austauschterm.

Die Tatsache, dass beide Ansätze dieselben Hartree-Fock-Gleichungen liefern, legt die Vermutung nahe, dass auch der Elektron-Loch-Hamiltonoperator (2.26) die Elektronen und Löcher als voneinander unterscheidbar behandelt. Diese Vermutung wird auch dadurch gestützt, dass der Grundzustand (berechnet mittels exakter Diagonalisierung unter Verwendung des Hamiltonoperators (2.26)) des mit einem Elektron-Loch-Paar gefüllten Quantenpunktes vierfach entartet ist (siehe Abbildung 2.2 auf Seite 34) und es somit zu keiner Singulett-Triplett Aufspaltung kommt. Bei identischen Teilchen würde man aber eine solche Singulett-Triplett Aufspaltung schon aufgrund der folgenden anschaulichen Überlegung erwarten: Da die Coulomb-Wechselwirkung spinunabhängig ist, und auch der Einteilchen-Hamiltonoperator keine Spinabhängigkeit beinhaltet, kann man die Gesamtwellenfunktion stets als das Produkt der Spinwellenfunktion und der Ortswellenfunktion darstellen. Da weiterhin die Gesamtwellenfunktion für identische Fermionen antisymmetrisch bezüglich Vertauschung zweier Teilchenindices sein muss und die Triplettzustände symmetrisch sind, muss die Ortswellenfunktion der Triplettzustände antisymmetrisch sein. Dies bedeutet aber insbesondere, dass Elektron und Loch sich

¹²Der Hamiltonoperator (2.26) bzw. (1.14) wird in der Literatur sehr häufig als Ausgangspunkt gewählt, ohne darauf hinzuweisen, welche Näherungen dieser Darstellung zu Grunde liegen und welche Effekte somit ausgehend von diesem Hamiltonoperator nicht beschrieben werden können. Aus diesem Grund hat uns sowohl das Ausbleiben der Singulett-Triplett Aufspaltung als auch die Äquivalenz der beiden oben angeführten Herleitungen zunächst überrascht.

in diesem Fall nicht am selben Ort aufhalten können. Für den Singulettzustand ist dies aber erlaubt, so dass man eine stärkere Bindung des Elektron-Loch-Paares im Falle eines Singulettzustands erwartet.

Es stellt sich also die Frage wann wir die Terme, welche eine Singulett-Triplett Aufspaltung verursachen, verloren haben. Es zeigt sich, dass wir diese Terme im Rahmen der Envelope-Näherung vernachlässigt haben. Der allgemeine Wechselwirkungs-Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung lautet nämlich (vgl. Abschnitt 1.2):

$$\frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) . \quad (2.40)$$

Entwickelt man nun die darin enthaltenen Feldoperatoren wie folgt nach einer Einteilchen-Basis von Valenz- und Leitungsbandelektronen

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda, i} a_i^\lambda \varphi_i^\lambda(\mathbf{r}) \quad \text{und} \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda, i} (a_i^\lambda)^\dagger \varphi_i^{\lambda*}(\mathbf{r}) \quad \text{mit } \lambda \in \{c, v\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

und setzt diese Entwicklung in (2.40) ein, erhält man insgesamt 16 Summanden, welche sich in den darin enthaltenen Erzeugern und Vernichtern unterscheiden. In Envelope-Näherung sind nur vier dieser Terme ungleich Null, da die anderen aufgrund der Orthogonalität der Blochfunktionen verschwinden (vgl. Abschnitt 1.2). Diese vier Terme sind in Gleichung (2.26) zusammengefasst. Neben diesen vier Termen existieren noch 2 weitere Terme, welche die Anzahl der Ladungsträger im Valenz- und Leitungsband nicht ändern. (D.h. dies Terme besitzen die gleiche Anzahl von Erzeugern c^\dagger und Vernichtern c bzw. v^\dagger und v .) Die restlichen 10 Terme haben eine ungerade Anzahl von Erzeugern und Vernichtern einer Sorte (z.B. $c^\dagger c^\dagger c v$). Ein solcher Term entspricht einem durch Coulomb-Wechselwirkung induzierten Interbandübergang, welcher aufgrund der hohen Bandlückenenergien nicht sehr wahrscheinlich ist.

Die beiden oben angesprochenen Terme, welche die Anzahl der Elektronen und Löcher nicht ändern, liefern folgenden Beitrag zum Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_X^{cv} &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \left\{ \overbrace{c_i^\dagger v_j^\dagger c_k v_l \int d^3r \int d^3r' \varphi_i^{c*}(\mathbf{r}) \varphi_j^{v*}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_k^c(\mathbf{r}') \varphi_l^v(\mathbf{r})}^{V_{ij,kl}^{cv, cv}} \right. \\ &\quad \left. + \overbrace{v_i^\dagger c_j^\dagger v_k c_l \int d^3r \int d^3r' \varphi_i^{v*}(\mathbf{r}) \varphi_j^{c*}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_k^v(\mathbf{r}') \varphi_l^c(\mathbf{r})}^{V_{ij,kl}^{vc, vc} = V_{ji, lk}^{cv, cv}} \right\} . \end{aligned}$$

Durch Umnummerierung erhält man daraus:

$$\mathbf{H}_X^{cv} = - \sum_{ijkl} \left[V_{lk, ij}^{vc, vc} \right]^* v_i^\dagger c_j^\dagger c_k v_l .$$

Geht man nun zum Elektron-Loch-Bild über, so liefert dies den Beitrag¹³

$$\mathbf{H}_X^{eh} = - \sum_{ijkl} \left[V_{ik, lj}^{he, he} \right]^* h_i^\dagger e_j^\dagger e_k h_l . \quad (2.42)$$

¹³Auch hier vernachlässigen wir wieder die Einteilchen-Beiträge, die durch das Vertauschen der Operatoren erzeugt werden. (Vgl. dazu auch die Diskussion in Abschnitt 1.2.)

Wie bereits erwähnt verschwindet dieser Beitrag in Envelope-Näherung, da die $V_{ij,kl}^{cv,cv}$, aufgrund der Orthogonalität der Blochfaktoren, identisch Null sind. Nimmt man nun allerdings an, dass das Skalarprodukt der Blochfaktoren der Elektronen und Löcher nicht gänzlich verschwindet, sondern einen kleinen Beitrag $\alpha \ll 1$ liefert, so gilt für die Coulomb-Matrixelemente $[V_{ik,lj}^{he,he}]^* = \alpha^2 [V_{ik,lj}^{he,eh}]^*$. Addiert man nun den Elektron-Loch-Austausch-Hamiltonoperator (2.42) zu dem Hamiltonoperator (2.26), liefert dieser neue Hamiltonoperator in der Tat eine Aufspaltung des vorher vierfach entarteten Grundzustandes in einen einfach und einen dreifach entarteten Zustand (siehe Abbildung 2.19). Auch liegt der Singulettzustand – wie erwartet – energetisch tiefer.

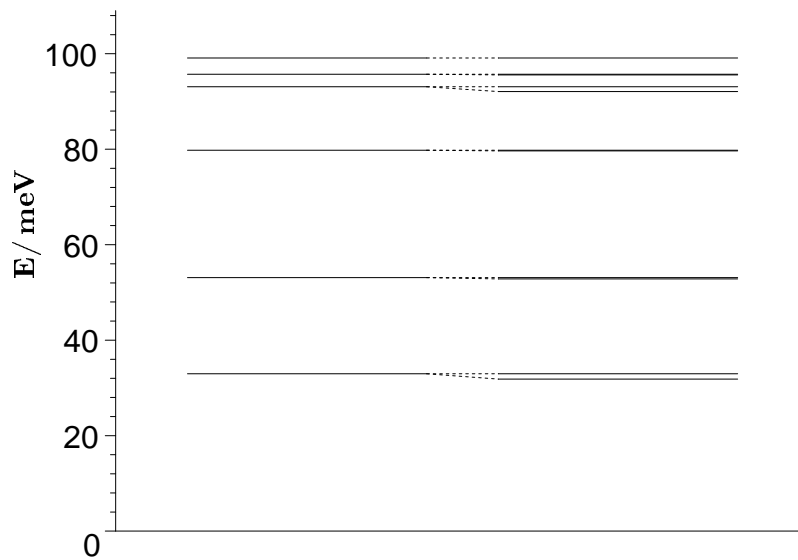


Abbildung 2.19: Energiespektrum für 1 Elektron-Loch-Paar. Links: Ohne \mathbf{H}_X^{eh} . Rechts: mit \mathbf{H}_X^{eh} für $\alpha^2 = 0.02$. (Quantenfilmdicke: $L = 4$ nm, Oszillatorlänge $l_k = 5.4$ nm.)

Wie man anhand der Beispielrechnung erkennt, ist die Elektron-Loch-Austausch-Wechselwirkung für das Aufspalten des Grundzustandes in einen Singulett- und einen Triplettzustand verantwortlich. Es bleibt allerdings zu klären, warum dies der Fall ist. Es zeigt sich, dass \mathbf{H}_X^{eh} die Aufspaltung bewirkt, da dieser zusätzliche Beitrag zum Hamiltonoperator die Symmetrie des Gesamthamiltonoperators verändert. Der Elektron-Loch-Austausch-Beitrag \mathbf{H}_X^{eh} kommutiert nämlich – im Gegensatz zum Hamiltonoperator (2.26) – *nicht* mit den einzelnen Spin-Komponenten der Elektronen ($S_i^{\text{ges},e}$ mit $i \in \{x, y, z\}$) und Löcher ($S_i^{\text{ges},h}$), sondern nur noch mit der Summe $S_i^{\text{ges},e} + S_i^{\text{ges},h}$ dieser beiden Beiträge. Dies bedeutet, dass die Elektronen- und Lochspins erst durch die Elektron-Loch-Austausch-Wechselwirkung miteinander gekoppelt werden. Möchte man nun analog zum Abschnitt 1.5 Leiteroperatoren konstruieren, um den durch den Spin hervorgerufenen Entartungsgrad zu ermitteln, so muss das in diesem Fall für den Gesamtspin $\mathbf{S}^{\text{ges}} = \mathbf{S}^{\text{ges},e} + \mathbf{S}^{\text{ges},h}$ geschehen. Da man dafür bereits im Falle eines Elektron-Loch-Paares zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen koppeln muss, gibt es die Möglichkeiten $S_{\text{ges}} = 0, 1$. Somit erhält man entsprechend den durch den Spin verursachten Entartungsgrad 1 bzw. 3. (Es besteht natürlich die Möglichkeit, dass diese vier Niveaus immer noch zufällig entartet sind. Im obigen Beispiel ist dies jedoch nicht der Fall.)

2.7.5 Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen

Um nun die Hartree-Fock-Grundzustandsenergien bestimmen zu können, muss das Gleichungssystem (2.23) selbstkonsistent gelöst werden. Im Prinzip könnte man zu diesem Zweck mit einem beliebigen Satz von N_e Elektronen- und N_h Löcher-Wellenfunktionen als nullte Näherung starten (am einfachsten wäre es natürlich hierzu die wechselwirkungsfreien Einteilchen-Wellenfunktionen zu verwenden), und damit die Hartree- und Fock-Potentiale berechnen. Unter Verwendung dieser Potentiale wäre dann das Eigenwertproblem (2.23) zu lösen, d.h. man müsste die Funktionen im Raum der quadratintegrablen Funktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$ finden, welche die Eigenwertgleichungen erfüllen. Die so ermittelte erste Näherung könnte dann verwendet werden, um damit eine zweite Näherung zu bestimmen usw.

Im Rahmen der exakten Diagonalisierung (siehe Abschnitt 1.6) haben wir die Vielteilchen-Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher als eine Linearkombination aus Slaterdeterminanten dargestellt. Diese Slaterdeterminanten wurden aus den N_s^e (N_s^h) Einteilchen-Wellenfunktionen des eingeschränkten Einteilchen-Hilbertraumes $\overline{\mathcal{H}}_{N_s^e}$ ($\overline{\mathcal{H}}_{N_s^h}$) für die Elektronen (Löcher) aufgebaut. Um eine bessere Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, werden wir auch in den Hartree-Fock-Rechnungen nur Zustände aus $\overline{\mathcal{H}}_{N_s^e}$ bzw. $\overline{\mathcal{H}}_{N_s^h}$ zulassen und somit nur einen Teilraum von $L^2(\mathbb{R}^3)$ betrachten. Dieses Vorgehen hat den zusätzlichen Vorteil, dass man die Hartree-Fock-Gleichungen als einfaches niedrigdimensionales Matrixproblem formulieren und lösen kann. Zu diesem Zweck entwickelt man die Hartree-Fock-Wellenfunktionen $\varphi_i^\lambda(\mathbf{r})$ nach den Eigenfunktionen $\phi_i^\lambda(\mathbf{r})$ von $\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda}\Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^\lambda(\mathbf{r})\right]$:

$$\begin{aligned} \varphi_p^e(\mathbf{r}) &= \sum_i e_i(p) \phi_i^e(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^e(\mathbf{r})\right] \phi_i^e(\mathbf{r}) = E_i^e \phi_i^e(\mathbf{r}) \\ \varphi_s^h(\mathbf{r}) &= \sum_i h_i(s) \phi_i^h(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m_h}\Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{conf}}^h(\mathbf{r})\right] \phi_i^h(\mathbf{r}) = E_i^h \phi_i^h(\mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (2.43)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass es sich bei den oben auftretenden Faktoren $e_i(p)$ und $h_i(s)$ um Entwicklungskoeffizienten und nicht um die Vernichter eines Elektrons bzw. Lochs handelt. Eine Verwechslung ist allerdings auch durch das weitere Argument der Entwicklungskoeffizienten weitgehend ausgeschlossen.

Setzt man nun diese Entwicklungen in die Gleichungen (2.23) ein und wendet $\int d^3r \phi_q^{e*}(\mathbf{r})$ bzw. $\int d^3r \phi_q^{h*}(\mathbf{r})$ auf diese Gleichungen an, so ergibt sich für die Elektronen:

$$\begin{aligned} E_q^e e_q(p) + \sum_l \overbrace{\left(\sum_j n_j^e \sum_{ik} e_i^*(j) e_k(j) (V_{qi,kl}^{ee} - V_{qi,lk}^{ee}) \right)}^{(H_{\text{HF}}^e)_{ql}} e_l(p) \\ - \sum_l \underbrace{\left(\sum_j n_j^h \sum_{ik} h_i^*(j) h_k(j) V_{qi,kl}^{eh} \right)}_{(H_H^h)_{ql}} e_l(p) = \zeta_p^e e_q(p) . \end{aligned} \quad (2.44)$$

Eine analoge Gleichung ergibt sich für die Löcher, indem man in Gleichung (2.44) die Ersetzung $e \leftrightarrow h$ vornimmt. Führt man nun, wie oben bereits angedeutet, die Matrizen $\underline{\underline{H}}_{\text{HF}}^{e,h}$ und $\underline{\underline{H}}_H^{e,h}$

ein, kann man das Gleichungssystem kompakt als

$$\begin{aligned} \left[\underline{E}^e + \underline{H}_{\text{HF}}^e - \underline{H}_H^h \right] \mathbf{e} &= \zeta \mathbf{e} \\ \left[\underline{E}^h + \underline{H}_{\text{HF}}^h - \underline{H}_H^e \right] \mathbf{h} &= \zeta \mathbf{h} \end{aligned} \quad (2.45)$$

schreiben. Hierzu wurden die zu ermittelnden Eigenvektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_p &= (e_1(p), e_2(p), \dots, e_{N_e}(p)) \\ \mathbf{h}_p &= (h_1(p), h_2(p), \dots, h_{N_h}(p)) \end{aligned}$$

sowie den Matrizen $(\underline{E}^e)_{ql} = \delta_{ql} E_q^e$, $(\underline{E}^h)_{ql} = \delta_{ql} E_q^h$ und

$$\begin{aligned} (\underline{H}_{\text{HF}}^e)_{ql} &= \sum_j n_j^e \sum_{ik} e_i^*(j) e_k(j) \left(V_{qi,kl}^{ee} - V_{qi,lk}^{ee} \right), \\ (\underline{H}_H^e)_{ql} &= \sum_j n_j^h \sum_{ik} e_i^*(j) e_k(j) V_{qi,kl}^{he}, \\ (\underline{H}_{\text{HF}}^h)_{ql} &= \sum_j n_j^h \sum_{ik} h_i^*(j) h_k(j) \left(V_{qi,kl}^{hh} - V_{qi,lk}^{hh} \right), \\ (\underline{H}_H^h)_{ql} &= \sum_j n_j^e \sum_{ik} h_i^*(j) h_k(j) V_{qi,kl}^{eh} \end{aligned} \quad (2.46)$$

definiert. Die Wechselwirkung in jedem der Bänder setzt sich aus zwei Anteilen zusammen. Zum einen aus der Hartree-Fock-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern des einen Bandes und zum anderen aus der Hartree-Wechselwirkung der Ladungsträger des jeweils anderen Bandes.

Versucht man nun das Gleichungssystem (2.45) selbstkonsistent zu lösen, kann man $e_q(p) = \delta_{qp}$ und $h_q(p) = \delta_{qp}$ als Startwerte verwenden und damit die Matrizen aus den Gleichungen (2.46) berechnen. Dabei nimmt man an, dass

$$n_j^{e(h)} = \begin{cases} 1 & ; \quad \text{für die ersten } N_e(N_h) \text{ Zustände niedrigster Energie} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (2.47)$$

ist. Hat man die Matrizen (2.46) bestimmt, kann man das Eigenwertproblem (2.45) lösen und erhält damit aus den Eigenvektoren neue Werte für $e_q(p)$ und $h_q(p)$, die in dem folgenden Iterationsschritt zur Berechnung der Matrizen (2.46) verwendet werden. Dieses Verfahren setzt man so lange fort bis sich die Eigenenergien und die Eigenzustände innerhalb der gewünschten Genauigkeit nicht mehr ändern und damit Selbstkonsistenz erreicht ist.

Will man die Grundzustandsenergie des zweikomponentigen, wechselwirkenden Systems in Hartree-Fock-Näherung berechnen, kann man – genau wie im Falle des wechselwirkenden, einkomponentigen Systems – nicht einfach die ζ 's aufsummieren. Dies ist der Fall, da die ζ 's, obwohl sie formal wie die Einteilchen-Energien der Hartree-Fock-Einteilchen-Wellenfunktionen aussehen, keine direkte physikalische Bedeutung haben. Bei der direkten Summation werden nämlich die Wechselwirkungsbeiträge doppelt gezählt [8]. Eine zu einem einkomponentigen System analoge Rechnung liefert für die Grundzustandsenergie:

$$\begin{aligned} E_{\text{gs}}^{\text{HF}} &= \langle \phi | \mathbf{H}_{\text{WW}}^{eh} | \phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_p n_p^h \left[\zeta_p^h + \sum_i E_i^h |h_i(p)|^2 \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_p n_p^e \left[\zeta_p^e + \sum_i E_i^e |e_i(p)|^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Anzahl der Exzitonen	$E_{\text{gs}}^{\text{HF}} / \text{meV}$	$E_{\text{gs}}^{\text{Ex.Diag.}} / \text{meV}$	$\frac{\Delta E}{E} / \%$
1	33.77	32.96	2.5
2	67.53	64.03	5.5
3	153.46	147.74	3.7
4	239.38	230.54	3.7
5	318.47	314.37	1.3
6	397.57	397.57	0.0

Tabelle 2.2: Vergleich der Grundzustandsenergien E_{gs} , berechnet mittels exakter Diagonalisierung und in Hartree-Fock-Näherung.

In Tabelle 2.2 sind die auf diese Weise ermittelten Hartree-Fock-Grundzustandsenergien, die Grundzustandsenergien der exakten Diagonalisierung und der relative Fehler zusammengestellt. Man erkennt, dass die Hartree-Fock-Energien oberhalb der Energien liegen, welche mittels exakter Diagonalisierung berechnet wurden. Dies entspricht der Erwartung, dass die exakte Diagonalisierung den Grundzustand besser approximiert als eine Hartree-Fock Rechnung. Weiterhin sieht man, dass die weniger aufwendige Hartree-Fock-Rechnung für den Grundzustand bereits einen Großteil, nämlich über 94%, der energetischen Beiträge durch die Wechselwirkung beinhaltet.

Einen Sonderfall stellt der Quantenpunkt mit 6 Elektron-Loch-Paaren dar. Hier liefert die Hartree-Fock-Rechnung dasselbe Ergebnis wie die exakte Diagonalisierung. Dies ist dadurch zu erklären, dass in dem hier untersuchten Quantenpunkt maximal 6 Elektron-Loch-Paare eingelegt werden können und der zugehörige Vielteilchen-Hilbertraum in diesem Fall nur noch aus einem einzigen Zustand besteht. Unter dieser Voraussetzung liefern die Verfahren der exakten Diagonalisierung, Störungsrechnung erster Ordnung und das oben vorgestellte Hartree-Fock-Verfahren unter Verwendung der eingeschränkten Einteilchen-Hilberträume für die Elektronen und Löcher stets identische Resultate.

3 Elektronische Zustände in zylindersymmetrischen Quantenpunkten auf einer Benetzungsschicht

In Kapitel 2 wurden die Einteilchen-Zustände der Elektronen und Löcher durch das Produkt harmonischer Oszillatorzustände in x - y -Richtung und dem niedrigsten Eigenzustand eines unendlich hohen Potentialtopfes in Wachstumsrichtung (z -Richtung) angenähert. In diesem Kapitel werden nun die Einteilchen-Zustände bei vorgegebener Quantenpunktgeometrie berechnet und mit dem oben verwendeten Modell verglichen.

Die hier untersuchten Quantenpunkte werden als linsenförmig angenommen, d.h. man geht davon aus, dass die Höhe des Quantenpunktes klein gegenüber dem Durchmesser ist und die Form keine Kanten aufweist. Neben linsenförmigen Quantenpunkten werden in der Literatur häufig auch pyramidenförmige Quantenpunkte [32] untersucht.

Ein Beispiel für eine linsenförmige Geometrie ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Die Linsenform des Quantenpunktes wird im Folgenden speziell durch eine Kugelkappe, welche auf einer Benetzungsschicht (Wettinglayer) aufliegt, modelliert [22, 35]. Das Auftreten einer Wettinglayer ist typisch für den häufig verwendeten Stranski-Krastanow-Wachstumsmodus [20, 37]. Die Annahme einer zylindersymmetrischen Geometrie verringert den Rechenaufwand erheblich, so dass hier zunächst auf die Verwendung nicht-zylindersymmetrischer Geometrien verzichtet wird. In Kapitel 4 werden dann die Eigenzustände von elliptischen Quantenpunkten behandelt.

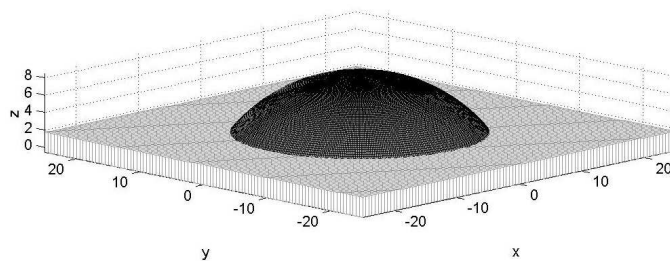


Abbildung 3.1: Quantenpunkt auf einer Benetzungsschicht.

Um unsere Arbeit mit der anderer Autoren in Bezug zu setzen, sei hier zunächst auf drei aktuelle Arbeiten hingewiesen, die sich mit der Berechnung der Einteilchen-Zustände bei vorgegebener rotationssymmetrischer Quantenpunktgeometrie beschäftigen.

Als ein einfaches Modell eines durch selbstorganisiertes Wachstum geformten linsenförmigen Quantenpunktes werden in [13] die Einteilchen-Eigenzustände innerhalb einer Halbkugel betrachtet. Dabei wird ein unendlich hoher Bandversatz angenommen, d.h. dass die Wellenfunktionen an der Halbkugeloberfläche identisch verschwinden müssen. Bedingt durch die Einfachheit des Modells können die Eigenfunktionen und Eigenwerte analytisch angegeben werden. Aufgrund des unendlichen Einschlusspotentials und der vernachlässigten Wettinglayer erhält man unendlich viele gebundene Zustände, was der experimentellen Situation aber nicht gerecht wird.

Da die Quantenpunkte in Wachstumsrichtung meist weniger ausgedehnt sind als in lateraler Richtung [12,37], scheint das Modell in [28] der Realität zumindest ein wenig näher zu kommen. Dort wird anstatt einer Halbkugel eine Kugelkappe betrachtet, aber auch in diesem Modell wird sowohl die Wettinglayer als auch die Endlichkeit des Bandversatzes ignoriert. Aus diesem Grund entsteht wiederum eine unendliche Anzahl von gebundenen Zuständen. Es ist aber möglich den Einfluss des Verhältnisses von Quantenpunkthöhe zu Quantenpunktradius zu studieren. Aufgrund der veränderten Geometrie lassen sich die Zustände jetzt nicht mehr gänzlich analytisch angeben und es wird eine Störungsentwicklung vorgeschlagen.

Noch realistischer ist das Modell von Wojs et al. [35]. Sie betrachten eine Kugelkappe, welche auf einer Wettinglayer aufliegt, und verwenden einen endlichen Bandversatz. Auf diese Weise erhalten sie nur endlich viele gebundene Zustände und können die Abhängigkeit der Energieniveaus von der Größe des Bandversatzes und der Größe des Quantenpunktes studieren. Ein Nachteil dieses Modells besteht darin, dass man das Problem nun nicht mehr analytisch lösen kann.

Der in diesem Artikel vorgeschlagene Weg zur Bestimmung der Energieniveaus unter Verwendung einer Transfermatrixmethode wird auch in dieser Arbeit beschritten und zusätzlich mit einer Diagonalisierung des Hamiltonoperators auf einem Gitter verglichen. Die Diagonalisierung auf einem Gitter wurde teilweise durch [31] motiviert. Neben den in [35] diskutierten Energiespektren, werden in der vorliegenden Arbeit auch die Einteilchen-Eigenfunktionen des Quantenpunktsystems eingehend untersucht.

3.1 Hamiltonoperator

Um die Einteilchen-Zustände und Einteilchen-Energien zu berechnen, wird die zeitunabhängige Einteilchen-Schrödingergleichung in Envelope-Näherung gelöst. Dabei nehmen wir an, dass sich die Elektronen und Löcher durch effektive Massen beschreiben lassen, und dass sowohl für die Elektronen als auch für die Löcher nur ein Band zu berücksichtigen ist (s. Abschnitt 2.1). Weiterhin nehmen wir isotrope effektive Massen an und vernachlässigen im Folgenden, dass sich die effektiven Massen von dem einen Halbleitermaterial zu dem anderen ändern können. Wollte man verschiedene Massen in den angrenzenden Halbleitermaterialien berücksichtigen, so kann man nicht mehr von der stetigen Differenzierbarkeit der Wellenfunktion ausgehen, sondern muss die Stetigkeit der Wellenfunktion und der Wahrscheinlichkeitsstromdichte fordern. Dies hat zur Folge, dass die Wellenfunktion selbst an der Grenzfläche einen „Knick“ bekommen kann. Für unendlich ausgedehnte Quantenfilme ist dies unproblematisch [23]. Im Falle eines Quantenpunktes würde es aber bedeuten, dass wir an jedem Grenzflächenelement diese Randbedingung berücksichtigen müssten, was sehr aufwendig wäre. Weiterhin ist anzunehmen, dass sich die Materialzusammensetzung nicht gänzlich sprunghaft ändert, sondern sich innerhalb eines kleinen Raumbereiches langsam verändert. Dies hat zur Folge, dass ein bei abrupter Änderung eventuell auftretender Knick in der Wellenfunktion stark abgeschwächt wird und somit in erster Näherung vernachlässigbar ist.

Bezeichnet ξ_α die Envelopefunktion des α -ten Eigenzustandes, so muss folgende Gleichung in dem durch $V_\lambda(\mathbf{r})$ gegebenen dreidimensionalen Einschlusspotential gelöst werden ($\lambda \in \{e, h\}$):

$$\mathbf{H}\xi_\alpha = \varepsilon_\alpha \xi_\alpha \quad \text{mit} \quad \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \Delta + V_\lambda(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.1)$$

Das Einschlusspotential für die Elektronen bzw. Löcher entsteht dadurch, dass es an einem Übergang zweier Halbleitermaterialien mit verschiedenen Bandlückenenergien zu einem

sogenannten *Bandversatz* kommt. Wie groß dieser Bandversatz genau ist und wie er sich auf Leitungs- und Lochband verteilt, wird von vielen Faktoren beeinflusst und ist nur sehr schwierig vorherzusagen. Auch experimentell kann der Bandversatz nur indirekt abgeschätzt werden.¹⁴ Für ein InGaAs/GaAs-System nehmen wir im Folgenden einen Bandversatz von $\Delta E_e = 350 \text{ meV}$ und $\Delta E_h = 170 \text{ meV}$ an, was einer gesamten Bandlückendifferenz von 520 meV entspricht. Diese Werte entsprechen auch dem Leitungsbandversatz, der in [22] und [35] verwendet wird.

Unter der Annahme eines konstanten Bandversatzes $V_\lambda^0 = \Delta E_\lambda$ liegt folgende sehr häufig verwendete Näherung für das Einschlusspotential nahe:

$$V_\lambda(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & ; \quad \mathbf{r} \text{ innerhalb des Quantenpunktes und der Wettinglayer,} \\ V_\lambda^0 = \Delta E_\lambda & ; \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.2)$$

Aufgrund der Zylindersymmetrie des vorliegenden Problems ist es für die explizite Lösung von Gleichung (3.1) zweckmäßig zu Zylinderkoordinaten überzugehen. Weiterhin kann man ausnutzen, dass der Hamiltonoperator \mathbf{H} aufgrund der Rotationssymmetrie des Potentials um die z -Achse mit der z -Komponente des Drehimpulsoperators vertauscht ($[\mathbf{H}, l_z] = 0$), so dass man gemeinsame Eigenfunktionen von \mathbf{H} und l_z finden kann. Die Eigenfunktionen von l_z sind aber bekannt und somit reduziert sich die dreidimensionale Schrödingergleichung (3.1) auf eine effektiv zweidimensionale Schrödingergleichung für jede Drehimpulsquantenzahl m :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right\} + V_\lambda(\rho, z) \right] \tilde{\xi}_\alpha(\rho, z) = \varepsilon_\alpha \tilde{\xi}_\alpha(\rho, z) , \quad (3.3)$$

mit

$$\xi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \tilde{\xi}_\alpha(\rho, z) . \quad (3.4)$$

In Gleichung (3.3) geht nur das Quadrat von m ein, woraus folgt, dass das Energiespektrum nur von $|m|$ abhängt. Wenn man den Drehimpuls klassisch deutet ist es auch plausibel, dass die Energien nicht von der Drehrichtung, sondern nur von dem Betrag des Drehimpulses abhängen.

Gleichung (3.3) wird im Folgenden auf zwei verschiedene Arten gelöst. Zum einen wird die zweidimensionale Schrödingergleichung unter Verwendung der sogenannten *adiabatischen Näherung* in Abschnitt 3.2 approximativ in ein System von zwei gekoppelten eindimensionalen Schrödingergleichungen überführt, welches dann mittels Transfermatrizen in Abschnitt 3.3 gelöst wird. Zum anderen wird die zweidimensionale Schrödingergleichung (3.3) auf einem Gitter diskretisiert und das Eigenwertproblem dann durch Matrixdiagonalisierung gelöst. Letzteres erfolgt in Abschnitt 3.5.

3.2 Adiabatische Näherung

Nachdem wir die Rotationssymmetrie ausgenutzt haben und damit die dreidimensionale Schrödingergleichung auf eine zweidimensionale Schrödingergleichung reduziert haben, verwenden wir nun die sogenannte *adiabatische Näherung* [35], um diese Gleichung näherungsweise in ein System von zwei gekoppelten eindimensionalen Schrödingergleichungen zu überführen.

¹⁴In der Tat existieren für das InGaAs/GaAs-System, für welches die folgenden Rechnungen angefertigt werden, verschiedene Angaben, die von $\Delta E_e/\Delta E_h = 85/15$ bis $\Delta E_e/\Delta E_h = 60/40$ reichen [10]. Dabei scheint sich allerdings ein Verhältnis von ca. $1/3$ zu $2/3$ weitgehend durchgesetzt zu haben.

Radius des Quantenpunktes	$r_{\text{Kappe}} = 18 \text{ nm}$
Höhe des Quantenpunktes	$H = 4.4 \text{ nm}$
Dicke der Wettinglayer	$z_0 = 1.6 \text{ nm}$
Bandversatz (Leitungsband)	$\Delta E_e = 350 \text{ meV}$
eff. Masse der Elektronen	$m_e = 0.067 m_0$

Tabelle 3.1: Parameter für den zylindersymmetrischen Quantenpunkt [35].

Die adiabatische Näherung besteht darin $\tilde{\xi}_\alpha(\rho, z)$ als Produkt $g_\rho(z) f_m(\rho)$ zu schreiben und anzunehmen, dass sich $g_\rho(z)$ nur „langsam“ mit ρ ändert und alle „schnellen“ Variationen in $f_m(\rho)$ enthalten sind. Unter dieser Voraussetzung vernachlässigt man dann alle Terme, die Ableitungen von $g_\rho(z)$ nach ρ enthalten und gelangt dann mittels Trennung der Variablen auf folgendes System zweier gekoppelter eindimensionaler Schrödingergleichungen:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\lambda(\rho, z) \right] g_\rho(z) = E_0(\rho) g_\rho(z) , \quad (3.5)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \left\{ -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} \right\} + E_0(\rho) \right] f_m(\rho) = E_m f_m(\rho) . \quad (3.6)$$

Gleichung (3.5) wird nun für jedes feste ρ gelöst und das damit ermittelte $E_0(\rho)$ geht dann als *radiales Potential* in Gleichung (3.6) ein. Bei der Bestimmung von $E_0(\rho)$ wird wieder angenommen, dass nur der Grundzustand für die Bewegung in z -Richtung von Bedeutung ist. Für festes ρ beschreibt Gleichung (3.5) die Bewegung eines Teilchens in einem endlich hohen Potentialkasten der Breite $a = h(\rho)$. Wenn sich die Breite des Potentialkastens nur langsam mit ρ ändert – wie das bei flachen Quantenpunkten der Fall ist – ändern sich auch $g_\rho(z)$ und $E_0(\rho)$ nur langsam mit ρ , so dass man für flache Quantenpunkte erwarten kann, dass die adiabatische Näherung gut erfüllt ist.

Das Problem eines Teilchens in einem endlichen Potentialkasten ist ein Standardproblem der Quantenmechanik und wird der Vollständigkeit halber in Anhang A gelöst. Um die Grundzustandsenergie zu bestimmen, muss die Lösung der transzendenten Gleichung

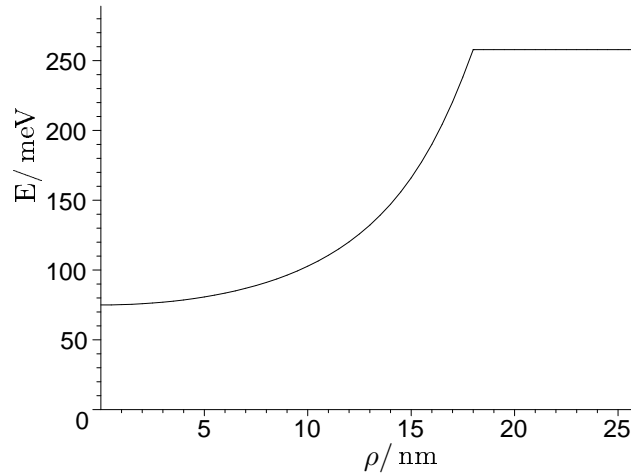
$$\cot(x) = \frac{x}{\sqrt{\frac{m_\lambda V_\lambda^0 a^2}{2\hbar^2} - x^2}} \quad \text{mit } x \in [0, \pi/2] \quad (3.7)$$

gefunden werden. Hat man die Lösung x^* von Gleichung (3.7) gefunden, ergibt sich die Energie zu

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \left(\frac{2x^*}{a} \right)^2 . \quad (3.8)$$

Auf diese Weise erhält man für den in [35] beschriebenen Quantenpunkt für die Elektronen das in Abbildung 3.2 dargestellte radiale Potential. Die bei der Rechnung verwendeten Parameter sind in der Tabelle 3.1 zusammengestellt und die Seitenansicht eines solchen Quantenpunktes kann man Abbildung 3.3 entnehmen. Auf die entsprechenden Rechnungen für die Löcher wird in Abschnitt 3.4.2 eingegangen.

Die Form des radialen Potentials ist qualitativ sehr einfach zu verstehen: Der Quantenpunkt ist in seinem Zentrum am dicksten (vgl. Abbildung 3.3) und somit hat das daraus resultierende radiale Potential bei $\rho = 0$ sein Minimum. Mit zunehmendem ρ nimmt die Dicke des

Abbildung 3.2: Radiales Potential $E_0(\rho)$ in meV. (Für die Materialparameter siehe Tabelle 3.1.)

Quantenpunktes ab, so dass die entsprechende Eigenenergie $E_0(\rho)$ zunimmt. Für $\rho > r_{\text{Kappe}}$ ist die Dicke schließlich konstant gleich der Höhe der Wettinglayer, was in einem konstanten Potential für diesen Bereich resultiert.

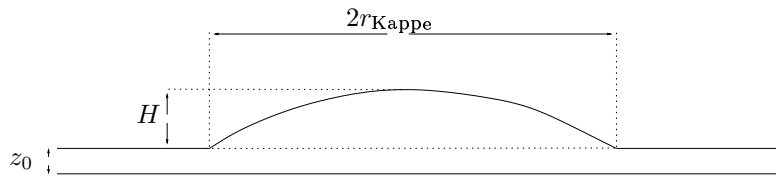


Abbildung 3.3: Quantenpunktgeometrie im Schnitt.

Für den in Abbildung 3.2 dargestellten Verlauf des radialen Potentials scheint es sinnvoll das Potential nahe $\rho = 0$ durch eine Parabel zu approximieren. Für den Grenzfall eines unendlichen Bandversatzes ($\Delta E_e = \infty$), der analytisch behandelt werden kann, folgt

$$E_0^\infty(\rho) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_\lambda h(\rho)^2} . \quad (3.9)$$

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

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

Eine Taylorentwicklung um $\rho = 0$ liefert

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

Identifiziert man den Vorfaktor von ρ^2 mit $\frac{m\omega_\infty^2}{2}$, so erhält man schließlich

$$\hbar\omega_\infty = \frac{\hbar^2 \pi}{m} \sqrt{\frac{2H}{(H + z_0)^3 (H^2 + r_{\text{Kappe}}^2)}} . \quad (3.10)$$

Für den oben beschriebenen Quantenpunkt liefert dies für die Elektronen $\hbar\omega_\infty \approx 38.92 \text{ meV}$.

Für einen endlich hohen Potentialwall, wie er bei einem endlich hohen Bandversatz vorliegt, lässt sich eine solche Abschätzung nicht mehr analytisch durchführen. Fittet man allerdings numerisch eine Parabel an den radialen Potentialverlauf um $\rho = 0$ an, erhält man die Abschätzung $\hbar\omega_{\text{endlich}} \approx 22.20 \text{ meV}$. Im Vergleich erkennt man deutlich den Einfluss eines endlich hohen Bandversatzes.

In Abbildung 3.4 sind die Verläufe des radialen Potentials und die daran angepassten Parabeln für $V_e^0 = \infty$ und $V_e^0 = 350 \text{ meV}$ dargestellt. Bereits für $\rho = 0$ liegt die Energie im Falle eines unendlichen Potentialkastens deutlich oberhalb der Energie des endlichen Potentialkastens. Anschaulich ist dies dadurch zu erklären, dass die Wellenfunktion bei dem endlichen Potentialtopf deutlich in die Barriere eindringt und auf diese Weise ihre kinetische Energie gegenüber dem unendlichen Potentialtopf verringern kann. Mathematisch liegt es daran, dass mit $V_1(x) \geq V_2(x)$ auch die *sortierten* Eigenenergien in dem Potential 1 jeweils oberhalb der von Potential 2 liegen: $E_i^1 \geq E_i^2$. Mit zunehmenden ρ – und somit abnehmender Dicke des Potentialtopfes – nimmt die Differenz der Energien, berechnet unter Verwendung eines unendlichen und eines endlich hohen Bandversatzes, immer mehr zu. Oberhalb von $\rho \approx 12.3 \text{ nm}$ liefert die Rechnung mit $V_e^0 = \infty$ einen Energiewert größer 350 meV . Dies macht besonders deutlich, dass in diesem Bereich die Annäherung des endlichen Potentialkastens der Höhe $V_e^0 = 350 \text{ meV}$ durch einen unendlich hohen Potentialkasten versagt.

Zusätzlich zu den bereits diskutierten Graphen ist auch noch eine Parabel der Form $a\rho^2 + b$ eingetragen, welche das radiale Potential bei endlichem Bandversatz in dem Bereich $[0, \rho_{\text{max}}]$ interpoliert. Die aus der Krümmung dieser Parabel ermittelte Oszillatorenergie beträgt 33.08 meV und stimmt damit sehr gut mit dem in Abschnitt 3.4 bestimmten Wert überein. Die Mittelung wurde über dem Intervall $[0, \rho_{\text{max}}]$ vorgenommen, da man für die gebundenen Zustände erwartet, dass sie im Wesentlichen innerhalb der Quantenpunktstruktur, d.h. im Bereich $\rho < r_{\text{Kappe}}$, lokalisiert sind. Diese Erwartung wird durch die Rechnungen in Abschnitt 3.4 bestätigt.

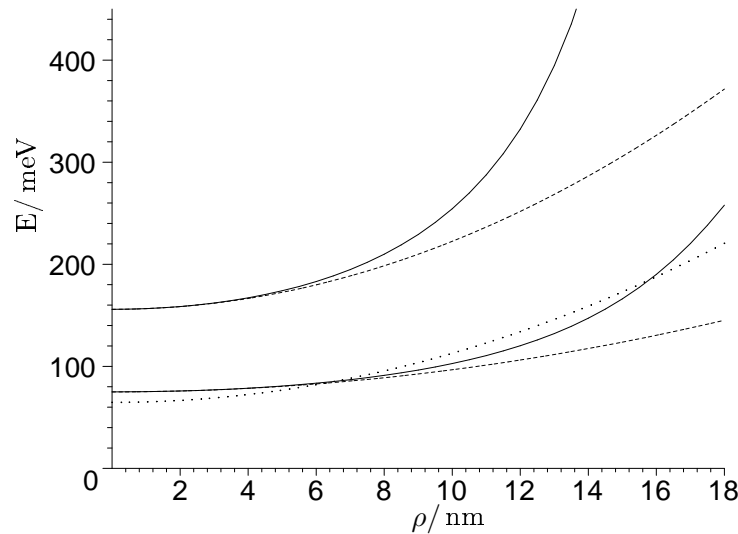


Abbildung 3.4: Exaktes radiales Potential (—) und angeschmiegte Parabeln (---) für $V_e^0 = \infty$ (obere Graphen) und $V_e^0 = 350 \text{ meV}$ (untere Graphen). Zusätzlich ist eine Parabel (...), die über den Potentialverlauf bei endlichem Potentialversatz im Bereich $[0, \rho_{\text{max}}]$ mittelt, eingetragen.

3.3 Transfermatrixmethode

Nachdem wir bis jetzt nur Abschätzungen für eine mögliche Oszillatorenergie angegeben haben, soll in diesem Abschnitt die radiale Schrödingergleichung (3.6) in dem in Abbildung 3.2 dargestellten Potential gelöst werden. Wojs et al. [35] folgend approximieren wir dazu das Potential durch eine n -stufige Treppenfunktion (siehe Abbildung 3.5) und lösen die Schrödingergleichung auf jeder Stufe exakt. Um die Lösungen dann stetig differenzierbar zu einer Gesamtwellenfunktion zusammenzufügen, verwenden wir Transfermatrizen.

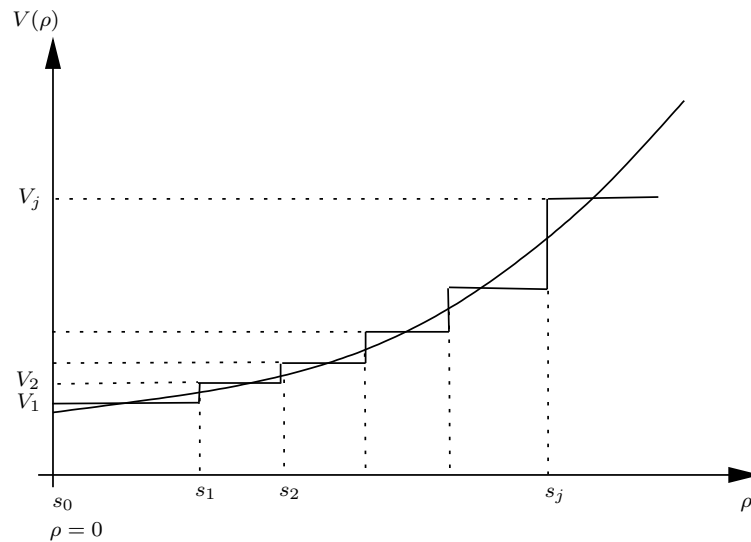


Abbildung 3.5: Annäherung des radialen Potentials $V(\rho) = E_0(\rho)$ durch eine Treppenfunktion.

Das Intervall $[0, \rho_{max}]$, auf welchem wir die Schrödingergleichung lösen wollen, wird in N Subintervalle $[s_{i-1}, s_i]$ mit $i = 1 \dots N$, $s_0 = 0$ und $s_N = \rho_{max}$ zerlegt. Das Potential $V(\rho)$ wird auf diesen Intervallen durch $V_i := \frac{1}{2}[V(s_{i-1}) + V(s_i)]$ angenähert. Wie in Abbildung 3.5 angedeutet, müssen die Stützstellen s_i nicht äquidistant verteilt sein und können dem Potential angepasst gewählt werden, d.h. man kann die Stützstellen dort dichter wählen, wo sich das Potential schnell ändert. Nach der Diskretisierung des Potentials kann nun die radiale Schrödingergleichung (3.6) in jedem Subintervall exakt gelöst werden.

Zu diesem Zweck führen wir die dimensionslose Variable $x = k_i \rho$ ein, wobei $k_i = \sqrt{\frac{2m\lambda}{\hbar^2} |E - V_i|}$ die Wellenvektoren und E die Energie des Teilchens bezeichnet und schreiben Gleichung (3.6) wie folgt um:

$$\left[x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + (\xi x^2 - m^2) \right] f_m(x) = 0 \quad \text{mit} \quad \xi = \text{sign}(E - V_i). \quad (3.11)$$

Diese Differentialgleichung wird für $\xi > 0$ durch die Besselfunktionen der ersten und zweiten Art ($J_m(x)$ und $Y_m(x)$) und für $\xi < 0$ durch die modifizierten Besselfunktionen der ersten und zweiten Art ($I_m(x)$ und $K_m(x)$) gelöst. In Abbildung 3.6 sind einige der Funktionen eingezeichnet, an deren Verlauf man die typischen Eigenschaften der verschiedenen Arten von Besselfunktionen erkennt.

Die allgemeine Lösung von Gleichung (3.11) ist gegeben durch

$$f_m(x) = A_m F_m(x) + B_m G_m(x) \quad (3.12)$$

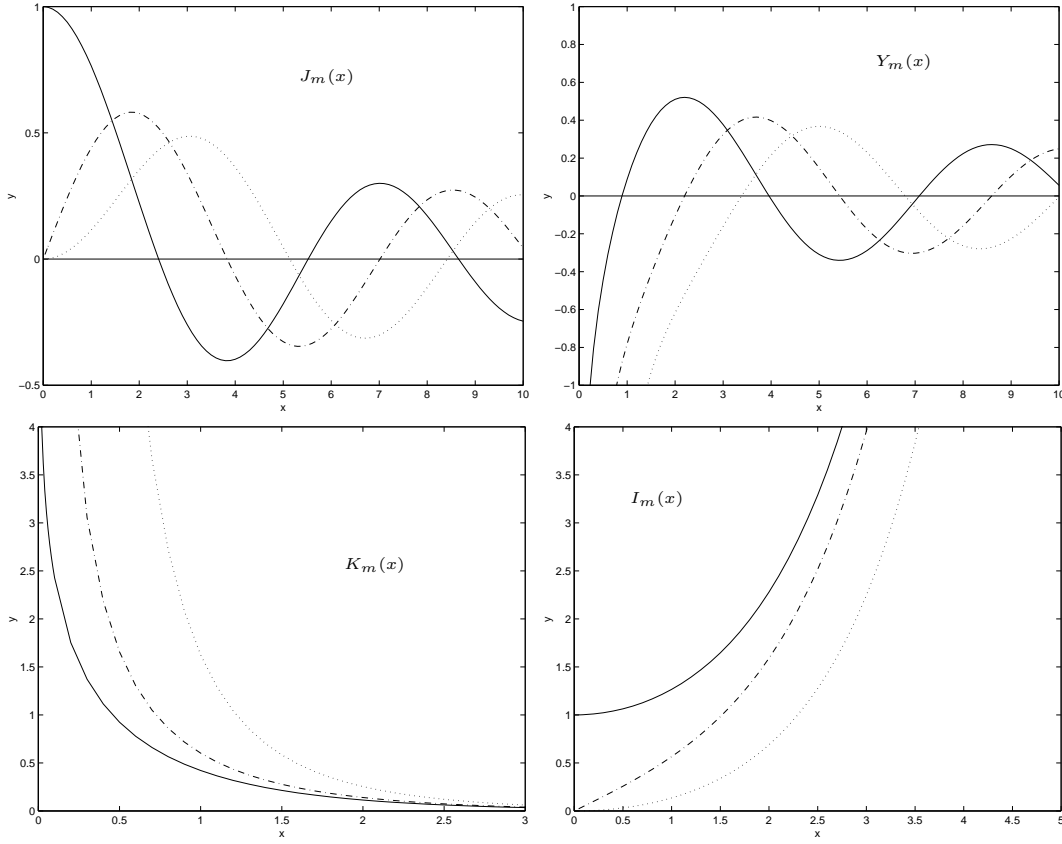


Abbildung 3.6: Besselfunktionen ($J_m(x)$ und $Y_m(x)$) und modifizierte Besselfunktionen ($K_m(x)$ und $I_m(x)$) für $m = 0$ (—), $m = 1$ (···) und $m = 2$ (- · -).

mit

$$(F_m, G_m) = \begin{cases} (J_m, Y_m) & ; \quad E > V_i \\ (K_m, I_m) & ; \quad E < V_i \end{cases} \quad (3.13)$$

Auf diese Weise hat man also die Lösung der Schrödingergleichung auf jeder einzelnen Treppe gefunden. Um diese nun zu der Gesamtwellenfunktion zusammenzusetzen, fordert man die stetige Differenzierbarkeit der Gesamtwellenfunktion an jeder der $(N - 1)$ Trennflächen. Dies erreicht man durch geeignete Wahl der Koeffizientenpaare $\{(A_i, B_i)\}_{i=1}^N$, welche die Lösungen auf den einzelnen Stufen festlegen. (Zur Erläuterung der Notation siehe Abbildung 3.7.)

Durch die Forderung nach stetiger Differenzierbarkeit erhält man an jeder Trennfläche die zwei Gleichungen

$$f_m^i(k_i s_i) = f_m^{i+1}(k_{i+1} s_i) \quad (3.14)$$

$$k_i \frac{\partial f_m^i}{\partial \rho}(k_i s_i) = k_{i+1} \frac{\partial f_m^{i+1}}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) \quad (3.15)$$

mit $i = 1..(N - 1)$. Insgesamt entstehen also $2(N - 1)$ Gleichungen für die $2N + 1$ unbekannten Größen (die $2N$ Koeffizienten $\{(A_i, B_i)\}_{i=1}^N$ und die Energie E). Die Forderung nach Normierbarkeit der Gesamtwellenfunktion liefert zwei Randbedingungen (eine am Ursprung und eine

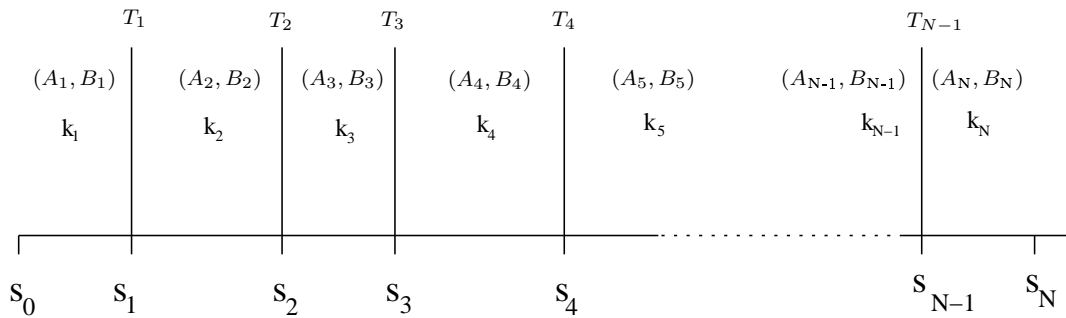


Abbildung 3.7: Zerlegung des Intervalls $[0, \rho_{max}]$ in N Subintervalle und die Zuordnung der Koeffizienten aus Gleichung (3.12) zu den einzelnen Subintervallen.

im Unendlichen), so dass man insgesamt $2N + 1$ Unbekannte und $2N$ Bestimmungsgleichungen erhält. Normiert man die Wellenfunktion, so legt dies den überzähligen Freiheitsgrad bis auf einen Phasenfaktor $e^{i\theta}$ fest. Dieser globale Phasenfaktor kann benutzt werden, um alle Koeffizienten reell zu wählen.

Setzt man nun die allgemeine Lösung (3.12) in die Gleichungen (3.14) und (3.15) ein, ergibt sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_m^i F_m(k_i s_i) + B_m^i G_m(k_i s_i) &= A_m^{i+1} F_m(k_{i+1} s_i) + B_m^{i+1} G_m(k_{i+1} s_i) \\ A_m^i k_i \frac{\partial F_m}{\partial \rho}(k_i s_i) + B_m^i k_i \frac{\partial G_m}{\partial \rho}(k_i s_i) &= A_m^{i+1} k_{i+1} \frac{\partial F_m}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) + B_m^{i+1} k_{i+1} \frac{\partial G_m}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) \end{aligned}$$

oder etwas kompakter mittels Matrizen:

$$\begin{pmatrix} F_m(k_i s_i) & G_m(k_i s_i) \\ k_i \frac{\partial F_m}{\partial \rho}(k_i s_i) & k_i \frac{\partial G_m}{\partial \rho}(k_i s_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_m^i \\ B_m^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_m(k_{i+1} s_i) & G_m(k_{i+1} s_i) \\ k_{i+1} \frac{\partial F_m}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) & k_{i+1} \frac{\partial G_m}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_m^{i+1} \\ B_m^{i+1} \end{pmatrix}.$$

Durch Matrixinversion kann man diese Beziehung nach den Koeffizienten (A_m^{i+1}, B_m^{i+1}) auflösen und erhält somit als Verknüpfung dieser Koeffizienten mit dem Koeffizientenpaar (A_m^i, B_m^i) die Transfermatrix T_i :

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} F_m(k_{i+1} s_i) & G_m(k_{i+1} s_i) \\ k_{i+1} \frac{\partial F_m}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) & k_{i+1} \frac{\partial G_m}{\partial \rho}(k_{i+1} s_i) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} F_m(k_i s_i) & G_m(k_i s_i) \\ k_i \frac{\partial F_m}{\partial \rho}(k_i s_i) & k_i \frac{\partial G_m}{\partial \rho}(k_i s_i) \end{pmatrix}}_{=: T_i} \begin{pmatrix} A_m^i \\ B_m^i \end{pmatrix}.$$

Für die Verknüpfung von dem ersten und letzten Koeffizientenpaar gilt dann:

$$\begin{pmatrix} A_m^N \\ B_m^N \end{pmatrix} = T_{N-1} T_{N-2} \dots T_2 T_1 \begin{pmatrix} A_m^1 \\ B_m^1 \end{pmatrix} =: T \begin{pmatrix} A_m^1 \\ B_m^1 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Im letzten Schritt wurde die Gesamttransfermatrix T eingeführt, welche das erste mit dem letzten Koeffizientenpaar verknüpft.

Bei Vorgabe der Energie E und des diskretisierten Potentials V_i sind die Wellenvektoren k_i festgelegt. Da auch die Funktionen (F_m, G_m) bekannt sind – sie sind je nach Vorzeichen von $(E - V_i)$ durch die (modifizierten) Besselfunktionen gegeben – sind alle Elemente in den einzelnen Transfermatrizen T_i bekannt und somit kann man auch die Gesamttransfermatrix berechnen. Unter Verwendung der Transfermatrizen T_i kann man zu jedem beliebigen Koeffizientenpaar (A_1, B_1) eine überall stetig differenzierbare Funktion konstruieren, die die radiale Schrödingergleichung (3.6) in dem diskretisierten Potential löst. Ob eine solche Funktion aber auch physikalisch sinnvoll ist, hängt davon ab, ob sie normierbar ist.

Aus der Forderung nach der Normierbarkeit der Wellenfunktion folgt sofort, dass der Koeffizient der bei $\rho = 0$ divergenten Lösung verschwinden muss. Daraus ergibt sich für das vorliegende Problem, dass $B_0 = 0$ sein muss (vgl. Gleichung (3.13) und Abbildung 3.6).

In dem hier behandelten Fall ist das Potential für $\rho > r_{\text{Kappe}}$ konstant und man kann $\rho_{\text{max}} = s_N = \infty$ wählen, ohne die Anzahl der Stützstellen bei gleichbleibender Genauigkeit erhöhen zu müssen, da für $\rho > r_{\text{Kappe}}$ keine neuen Stetigkeitsbedingungen entstehen. Unter dieser Voraussetzung liefert die Normierbarkeit der Gesamtwellenfunktion für *gebundene*¹⁵ Zustände ($E < V_{\text{max}}$) die zusätzliche Bedingung $B_N = 0$. Dies ist der Fall, da die Lösung auf der letzten Stufe $([\rho_{N-1}, \infty])$ durch $f_m(x) = AK_m(x) + BI_m(x)$ gegeben ist und $I_m(x)$ für große x , wie in Abbildung 3.6 angedeutet, divergiert. Zusammengefasst heißt das:

$$\text{Normierbarkeit} \Rightarrow B_0 = 0 \text{ und } B_N = 0.$$

Diese Bedingung kann in unserem Problem als Quantisierungsbedingung angesehen werden: Es sind nur solche Energien E^* zugelassen, welche $B_N = 0$ liefern. Dies ist, wegen $B_0 = 0$ äquivalent zu der Forderung $T_{21} = 0$. Die Lösung des Eigenwertproblems ist somit – genau wie im Falle eines Potentialkastens – auf eine Nullstellensuche

$$T_{21}(E) = 0 \tag{3.17}$$

abgebildet worden.

Für Potentiale, die für $\rho > \rho^*$ nicht konstant werden, ist die Forderung $B_N = 0$ nicht exakt begründbar, liefert aber für $E \ll V_N$ zumindest näherungsweise die richtigen Eigenfunktionen und Eigenenergien.¹⁶ Als Test dieser Aussage und des Transfermatrixzugangs allgemein „zwang“ sich der ideale zweidimensionale harmonische Oszillator geradezu auf.

3.4 Ergebnisse in adiabatischer Näherung

In den nachfolgenden drei Unterabschnitten werden die unter Verwendung der adiabatischen Näherung gewonnenen Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Im Abschnitt 3.4.1 werden die gebundenen Zustände für die Elektronen untersucht. Es wird zunächst kurz erläutert wie wir bei der Suche nach den Nullstellen von Gleichung (3.17) vorgegangen sind. Im Anschluss daran werden das so gewonnene Energiespektrum und die zugehörigen Wellenfunktionen diskutiert. In Abschnitt 3.4.2 werden die Lochzustände behandelt und in Abschnitt 3.4.3 werden schließlich Streuzustände diskutiert.

¹⁵Auf die Streuzustände gehen wir in Abschnitt 3.4.3 ein.

¹⁶Einfachheitshalber wird weiterhin ein monoton steigendes Potential angenommen.

3.4.1 Gebundene Elektronenzustände

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit dem Einteilchen-Energiespektrum und den zugehörigen Wellenfunktionen der Elektronen in dem in Abschnitt 3.2 vorgestellten Quantenpunkt. Insbesondere werden die berechneten Wellenfunktionen mit denen eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators verglichen.

Zur Bestimmung der Eigenenergien für feste Drehimpulsquantenzahl m gehen wir folgendermaßen vor: Zunächst „durchfahren“ wir den Energiebereich von dem minimalen Potentialwert V_{\min} startend bis zum maximalen Potentialwert V_{\max} in einem groben Energieraster (hier bietet sich z.B. $\hbar\omega_{\infty}/10$ an) und berechnen für jeden Energiewert E das Transfermatrixelement $T_{21}(E)$. Tritt bei zwei aufeinanderfolgenden T_{21} -Werten ein Vorzeichenwechsel auf, so suchen wir in dem entsprechenden Energieintervall nach einer Nullstelle. Die auf diese Weise gefundene Nullstelle E^* stellt – innerhalb der numerischen Genauigkeit der Nullstellensuche – eine exakte Eigenenergie in dem durch N Treppenfunktionen approximierten Potential $V(\rho)$ dar. Nun wird das Stützstellengitter so lange verfeinert bis sich E^* in der von uns gewünschten Genauigkeit nicht mehr ändert. Auf diese Weise wird sichergestellt, dass die gefundenen Lösungen E^* nur noch sehr wenig von den tatsächlichen Lösungen des kontinuierlichen Potentials $V(\rho)$ abweichen.

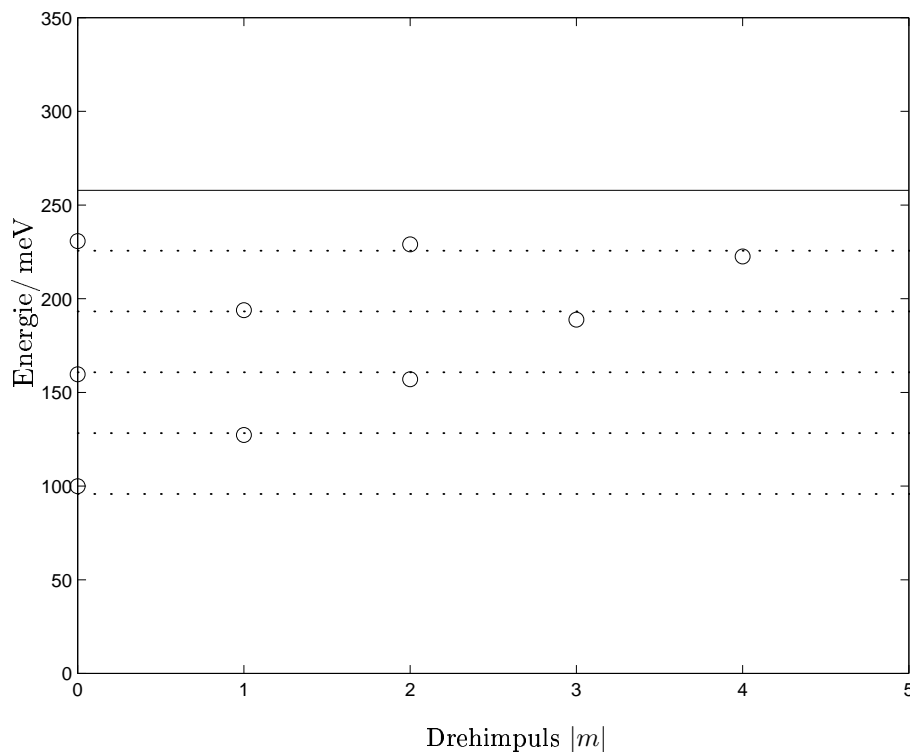


Abbildung 3.8: Quantenpunkt-Energiespektrum für Elektronen (Kreise) als Funktion des Betrages der Drehimpulsquantenzahl $|m|$. Gestrichelte Linie: Energien eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators ($\hbar\omega_{\text{fit}} = 32.44$ meV). Durchgezogene Linie: V_{\max} .

Das so berechnete Energiespektrum als Funktion der Drehimpulsquantenzahl $|m|$ ist in Abbildung 3.8 dargestellt. Die Kreise entsprechen den Quantenpunkt-Eigenenergien und die gestri-

chelten Linien entsprechen den Energien

$$E_{N_r, m} = \hbar\omega(2N_r + |m| + 1) + E_{\text{off}} \quad (3.18)$$

eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit radialer Quantenzahl N_r , Drehimpulsquantenzahl m und dem Energienullpunkt E_{off} [6]. Die radiale Quantenzahl gibt die Anzahl der Nullstellen bzw. die um eins reduzierte Anzahl der lokalen Extrema auf dem offenen ρ -Intervall $(0, \infty)$ an. Im Einklang mit dem Knotensatz der Quantenmechanik [7] besitzt – bei jeweils festem Drehimpuls m – der Zustand niedrigster Energie keine Nullstelle, der erste angeregte eine, der zweite angeregte Zustand zwei Nullstellen usw. Die Frequenz des zweidimensionalen Oszillators wurde so bestimmt, dass das Oszillator-Spektrum das Quantenpunkt-Spektrum möglichst gut wiedergibt. Man erhält:

$$\hbar\omega_{\text{fit}} = 32.44 \text{ meV} .$$

Die durchgezogene Linie in Abbildung 3.8 entspricht V_{max} , dem maximalen Wert des radialen Potentials, oberhalb dessen man – zumindest in adiabatischer Näherung – keine gebundenen Zustände mehr erhält, sondern nur noch das Kontinuum der Wettinglayer-Zustände.

Würden die Quantenpunktenergien genau auf den gestrichelten Linien liegen, hätte man genau das abgeschnittene Spektrum eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators, welches durch die äquidistanten Energieniveaus und die spezielle Entartungsstruktur ausgezeichnet ist. Neben dieser guten Übereinstimmung des Energiespektrums des Quantenpunktes mit dem eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators, findet man auch eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den radialen Wellenfunktionen dieser beiden Systeme.

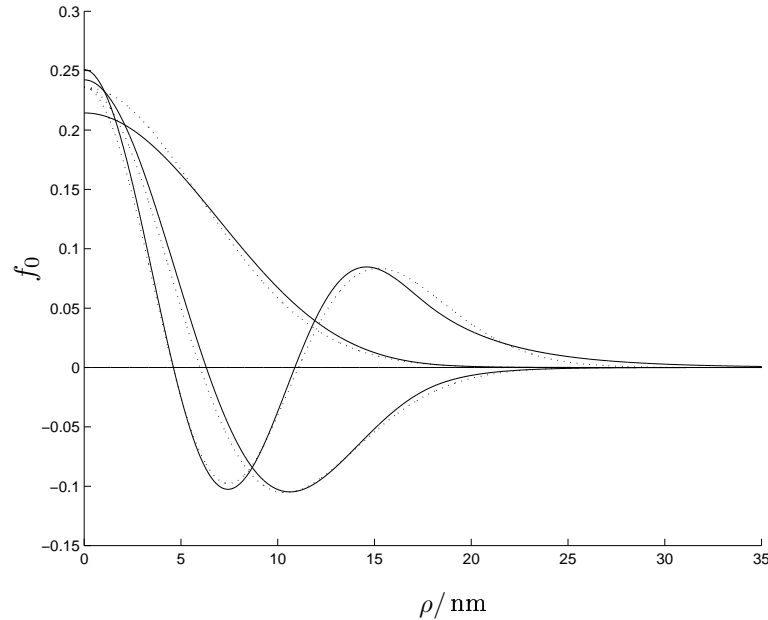


Abbildung 3.9: Radiale Wellenfunktionen der in dem Quantenpunkt gebundenen Zustände (durchgezogen) für Drehimpuls $m = 0$ und die entsprechenden Funktionen eines harmonischen Oszillators (gestrichelt).

In Abbildung 3.9 sind die radialen Wellenfunktionen der gebundenen Zustände des Quantenpunktes und die des zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit der angepassten Energie

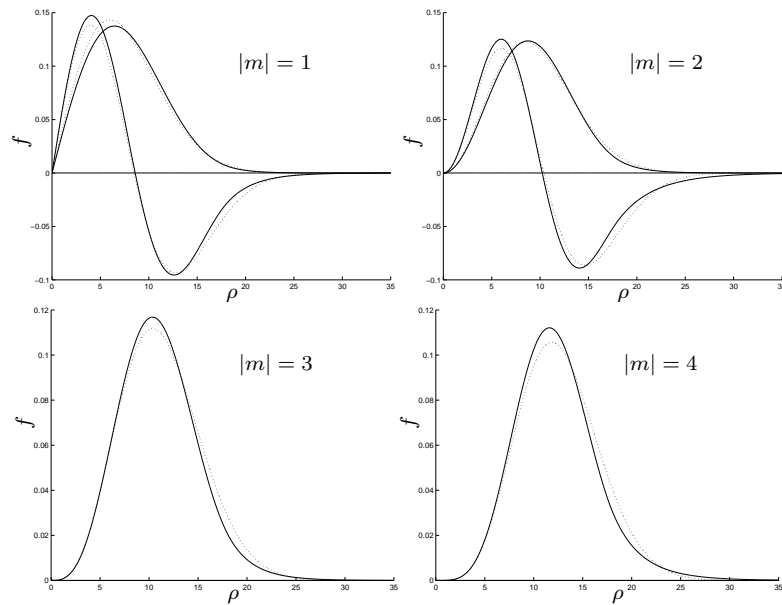


Abbildung 3.10: Radiale Wellenfunktionen gebundener Zustände für $|m| = 1$ (l.o.), $|m| = 2$ (r.o.), $|m| = 3$ (l.u.) und $|m| = 4$ (r.o.).

$\hbar\omega_{\text{fit}}$ für $m = 0$ zusammengestellt. Für $|m| \neq 0$ sind die entsprechenden Wellenfunktionen in Abbildung 3.10 dargestellt. Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Wellenfunktionen des Oszillators und denen der Quantenpunktstruktur. Außerdem kann man den Abbildungen entnehmen, dass sich die Maxima bei gleicher radialer Quantenzahl N_r mit zunehmendem Drehimpuls mehr und mehr nach außen schieben. Dies ist auch von einem klassischen Gesichtspunkt aus plausibel. Extrapoliert man dieses Verhalten, so könnte dies auch erklären, warum es für $|m| > 4$ keinen gebundenen Zustand mehr gibt: Es ist einfach kein ausreichender Anteil der Wellenfunktion mehr innerhalb des Quantenpunktes lokalisiert, um die potentielle Energie soweit abzusenken, dass es zu einem gebundenen Zustand kommt.

3.4.2 Gebundene Lochzustände

In den vorangegangenen Abschnitten wurde die Berechnung der Eigenzustände des Quantenpunktes allgemein erläutert und für den Fall von Leitungsbandelektronen illustriert. Die entsprechenden Ergebnisse für die Löcher werden hier unter Verwendung des schweren Lochs vorgestellt. Da wir nur ein Lochband berücksichtigen (vgl. Diskussion in Abschnitt 2.1), ändern sich in den oben entwickelten Formeln nur die verwendeten Parameter. Am Schluss dieses Abschnitts wird untersucht, inwieweit die in der Literatur häufig verwendete Annahme [16,18] identischer Elektron- und Lochwellenfunktionen gerechtfertigt ist.

Im Gegensatz zum Leitungsband werden die Valenzbänder durch Verspannungen sehr stark beeinflusst. Dies hat zur Folge, dass man für die Lochbänder nicht mehr die effektiven Massen des Volumenmaterials verwenden kann [36]. In der Tat ändert sich die effektive Masse des schweren Lochs in einem verspannten InGaAs/GaAs Quantenfilm von dem Volumenkristallwert $m_{\text{hh}} \approx 0.5 m_0$ [5] nach $m_{\text{hh}} \approx 0.15 m_0$ [33]. Da dieser Wert für m_{hh} sogar noch mit zunehmender Indiumkonzentration abnimmt [33], werden wir im Folgenden den Wert $m_{\text{hh}} = 0.11 m_0$

verwenden. Obgleich die effektive Masse durch Verspannungen im Allgemeinen anisotrop wird, verwenden wir zur Vereinfachung weiterhin isotrope effektive Massen. Als Bandversatz wurde $\Delta E_v = 170 \text{ meV}$ gewählt.

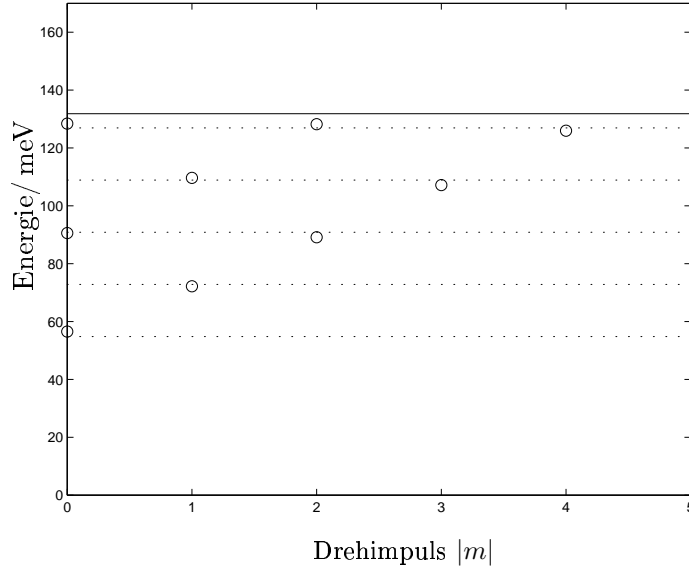


Abbildung 3.11: Quantenpunkt-Energiespektrum der Löcher (Kreise) als Funktion des Betrages der Drehimpulsquantenzahl $|m|$. Gestrichelte Linien: Energien eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators ($\hbar\omega_{\text{fit}} = 18.02 \text{ meV}$). Durchgezogene Linie: V_{max} .

Das mit diesen Parametern ermittelte Energiespektrum für das schwere Loch ist in Abbildung 3.11 dargestellt. Die Kreise entsprechen wieder den Quantenpunkt-Eigenenergien und die gestrichelten Linien entsprechen den Energien eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit geeigneter Frequenz. Im Falle des schweren Lochs ergibt sich durch Anpassung:

$$\hbar\omega_{\text{fit}} = 18.02 \text{ meV}.$$

Die durchgezogene Linie entspricht wiederum dem maximalen Potentialwert V_{max} , oberhalb dessen es keine gebundenen Zustände mehr gibt.

Die Struktur des Energiespektrums für das Loch ist dieselbe wie die des Energiespektrums für ein Elektron: Es gibt genauso viele gebundene Lochzustände wie Elektronenzustände. Auch hier zeigt sich, genau wie bei der Behandlung der Leitungsbandelektronen (vgl. Abbildung 3.8), dass die Energie der fast entarteten Energieniveaus mit zunehmender Drehimpulsquantenzahl abnimmt. Ein Unterschied besteht – neben der anderen Energieskala – darin, dass die hoch-energetischen gebundenen Lochzustände näher am Kontinuum liegen als die entsprechenden Elektronenzustände.

In Abbildung 3.12 sind exemplarisch die radialen Wellenfunktionen der gebundenen Zustände des Quantenpunktes für $|m| = 2$ eingetragen. Zusätzlich sind auch die radialen Wellenfunktionen des zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit der angepassten Energie $\hbar\omega_{\text{fit}}$ eingezeichnet. Man erkennt, dass die Übereinstimmung der Oszillator- und Quantenpunkt-Wellenfunktionen für kleine ρ in beiden Fällen sehr gut ist. Für größere ρ fällt auf, dass die Quantenpunkt-Wellenfunktion höherer Energie (d.h. höherer radialer Quantenzahl N_r) langsamer als die entsprechende Oszillatorfunktion abfällt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass

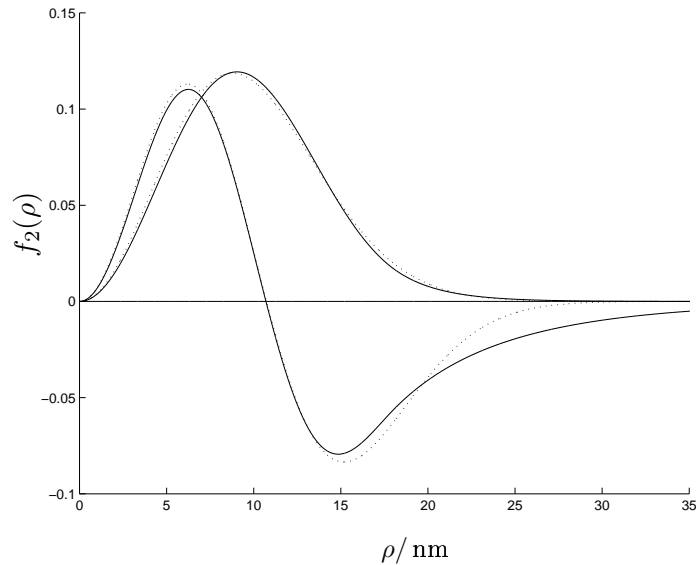


Abbildung 3.12: Radiale Wellenfunktionen gebundener Zustände (durchgezogene Linien) für $|m| = 2$ und die entsprechenden Oszillatorzustände (gestrichelte Linien).

die zugehörige Energie nahe am Kontinuum liegt (vgl. Abbildung 3.11) und somit der entsprechende Wellenvektor klein ist, was in einem lang gestreckten Abfall der Wellenfunktion resultiert.

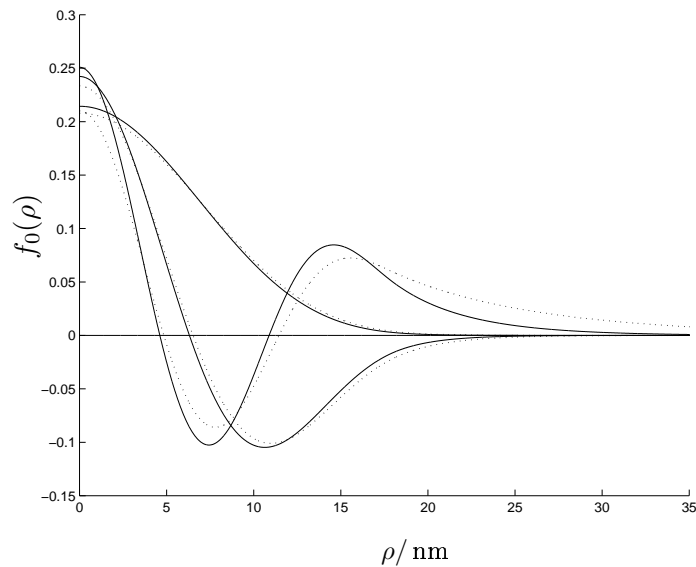


Abbildung 3.13: Die gebundenen Quantenzustände des Elektrons (durchgezogene) und des schweren Lochs (gestrichelt) für die Drehimpulsquantenzahl $m = 0$.

In Kapitel 2 wurde zumeist mit identischen Elektron- und Lochwellenfunktionen gerechnet. Um zu überprüfen inwiefern diese Näherung, die auch häufig in der Literatur [16, 18] verwendet wird, erfüllt ist, wurden die Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher exemplarisch für $m = 0$ in ein Bild eingetragen. In Abbildung 3.13 erkennt man, dass die Übereinstimmung der

beiden niederenergetischen Wellenfunktionen sehr gut ist. Für den hochenergetischen Eigenzustand von Elektron und Loch ist die Übereinstimmung immer noch recht gut, wird aber durch das langsame Abfallen der Lochwellenfunktion für große ρ verringert. Dieser Unterschied ist darauf zurückzuführen, dass die Lochwellenfunktion energetisch näher am Kontinuum liegt als die entsprechende Elektronwellenfunktion. Dadurch fällt die Wellenfunktion des Elektrons für große ρ schneller ab als die des Lochs. Insgesamt lässt sich die Übereinstimmung der Elektron- und Lochwellenfunktion als sehr gut bezeichnen und damit die Verwendung von identischen Wellenfunktionen für das Elektron und das Loch zumindest für den hier untersuchten Quantenpunkt rechtfertigen.

3.4.3 Streuzustände

In den vorangegangenen Abschnitten wurden die gebundenen Zustände des Quantenpunktes diskutiert. Hier werden nun die Streuzustände behandelt, d.h. Eigenzustände mit Energien, die größer als die maximale Energie V_{\max} des radialen Potentials sind. Insbesondere untersuchen wir, inwieweit die Streuzustände durch die Existenz der Quantenpunktstruktur gegenüber den freien Lösungen modifiziert werden. Hierbei ist besonders interessant zu untersuchen, ob man ein Regime im Energie- und Drehimpulsraum, in welchem der Einfluss des Quantenpunktes vernachlässigt werden kann, ausfindig machen kann. Die Existenz eines solchen Bereiches würde bedeuten, dass man dort die Eigenfunktionen des Quantenpunktes durch die Wellenfunktionen freier Teilchen ersetzen kann. Exemplarisch werden hier nur die Streuzustände der Elektronen behandelt.

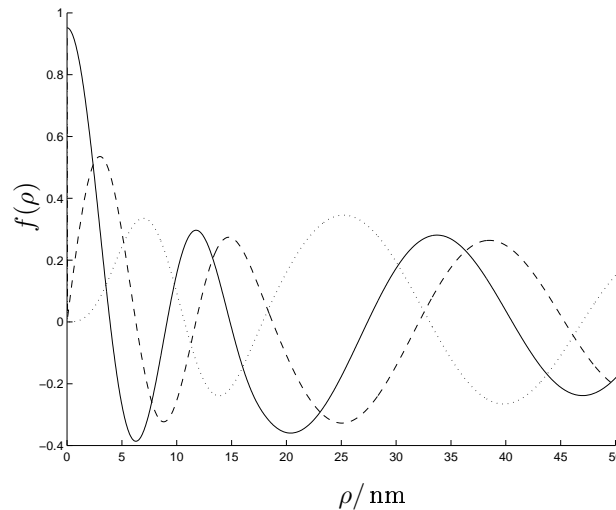


Abbildung 3.14: Streuzustände mit $E = 290 \text{ meV}$ und $|m| = 0$ (durchgezogen), $|m| = 1$ (gestrichelt), $|m| = 3$ (gepunktet).

Da die Energie der Streuzustände oberhalb der maximalen potentiellen Energie V_{\max} liegt, ist die Lösung der Schrödingergleichung auf jeder einzelnen Treppenstufe durch eine Linearkombination von $J_m(x)$ und $Y_m(x)$ gegeben (vgl. Gleichung (3.13)). Fordert man die Normierbarkeit der Wellenfunktion, so muss der Koeffizient von $Y_m(x)$ auf der Treppenstufe, welche den Ursprung enthält, verschwinden, da $Y_m(x)$ bei $x = 0$ divergiert (vgl. Abbildung 3.6 auf Seite 68). Dies bedeutet, dass $B_1 = 0$ gelten muss. Startet man mit $A_1 = 1$ und $B_1 = 0$, so kann man – wie in Abschnitt 3.3 erläutert – mittels der Transfermatrizen stetig differenzierbare

Funktionen für beliebige Energien E und beliebige Drehimpulse m ermitteln. Für $E > V_{\max}$ sind diese Funktionen – im Gegensatz zu den Funktionen für $E < V_{\max}$ – auch physikalisch sinnvolle Wellenfunktionen, da die Normierbarkeit der Wellenfunktion für Streuzustände keine Randbedingung für $\rho = \infty$ impliziert.

In Abbildung 3.14 sind exemplarisch die Eigenzustände der Elektronen mit einer Energie $E = 290 \text{ meV}$, die oberhalb von V_{\max} liegt, und Drehimpulsen $|m| = 0, 1, 3$ aufgetragen. Man kann deutlich erkennen, dass der Abstand der Maxima für $\rho < r_{\text{Kappe}} = 18 \text{ nm}$ kleiner als in dem Bereich größerer ρ ist. Dies ist dadurch zu erklären, dass der Wellenvektor $k \propto \sqrt{E - V_i}$ für $\rho < r_{\text{Kappe}}$ größer ist, als in dem Bereich $\rho > r_{\text{Kappe}}$.

Die Asymptotik der radialen Wellenfunktionen ist durch die beiden Koeffizienten A_N und B_N auf der letzten Treppenstufe $[s_{N-1}, \infty]$ bestimmt. Da die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators *ohne* Quantenpunkt durch $J_m(x)$ gegeben sind, d.h. $A_i = 1$ und $B_i = 0$ für alle Treppennummern i , würde ein kleines Verhältnis B_N/A_N bedeuten, dass man den Einfluss der Quantenpunktstruktur für große ρ vernachlässigen kann. In Abbildung 3.15 ist das Verhältnis B_N/A_N als Funktion der Energie für $m = 0$ aufgetragen. Das Verhältnis B_N/A_N variiert ersichtlich sehr stark mit der Energie und divergiert sogar nahe $E = 321 \text{ meV}$. Dies bedeutet, dass man für $m = 0$ den Einfluss der Quantenpunktstruktur in keinem Energiebereich vernachlässigen kann.

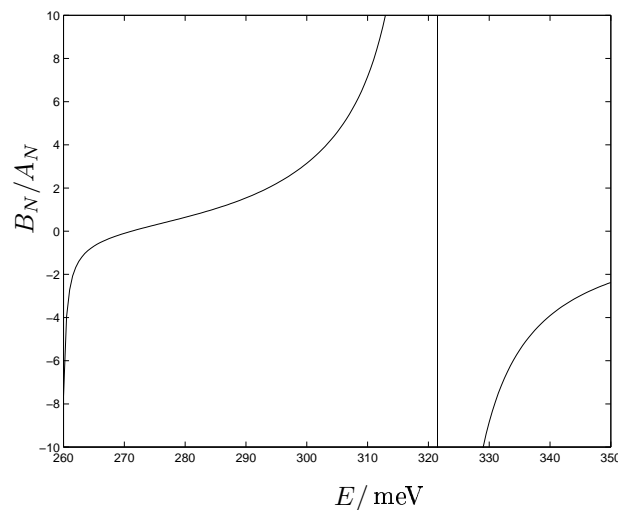


Abbildung 3.15: Verhältnis B_N/A_N als Funktion der Energie für die Streuzustände ($E > V_{\max}$) und Drehimpuls $m = 0$.

Die radiale Wellenfunktion zu höheren Drehimpulsen ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Mit zunehmendem Drehimpuls wird das erste Maximum mehr und mehr nach außen verschoben, so dass die Wellenfunktion innerhalb des Quantenpunktes für große Drehimpulsquantenzahlen $|m|$ nahezu Null ist. Diese Verlagerung der Maxima zu höheren Radien mit zunehmendem Drehimpuls ist bereits klassisch verständlich. Die geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit für kleine ρ ist durch die Entwicklung von $J_m(x)$ plausibel. Im Grenzfalle kleiner x gilt nämlich: $J_m(x) \approx \frac{1}{m!}(\frac{x}{2})^m$. Für große Drehimpulse sollte man also erwarten können, dass der Einfluss des Quantenpunktes vernachlässigbar ist, da die Wellenfunktion den Quantenpunkt nicht mehr „spüren“ sollte. In der Tat ist für die oben dargestellten radialen Wellenfunktionen mit bloßem Auge kaum ein Unterschied zu den entsprechenden Besselfunktionen $J_m(k_N \rho)$ zu erkennen, so

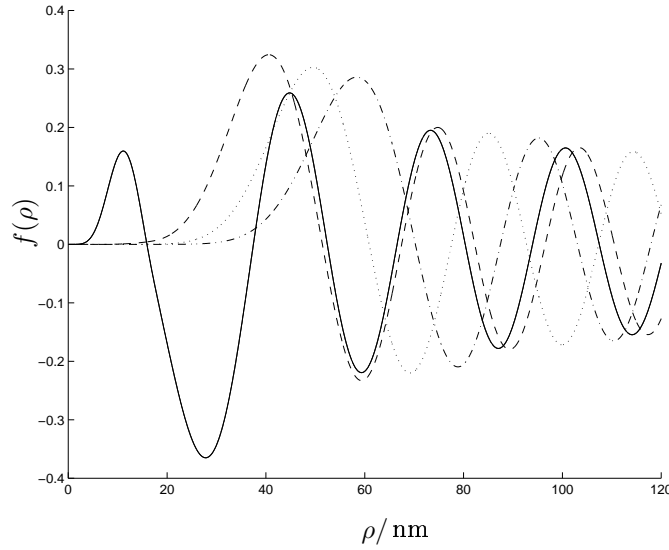


Abbildung 3.16: Streuzustände mit $E = 290 \text{ meV}$ und $|m| = 5$ (durchgezogen), $|m| = 8$ (gestrichelt), $|m| = 10$ (gepunktet), $|m| = 12$ (gestrich-punktet).

dass sie in Abbildung 3.16 weggelassen wurden. Leider trifft diese Beobachtung aber nicht für beliebige Energien zu, sondern nur für einen Bereich um V_{\max} . Dass dies der Fall ist entnimmt man Abbildung 3.17, in der das Verhältnis B_N/A_N für $m = 7$ als Funktion der Energie E aufgetragen ist. Obgleich das Verhältnis B_N/A_N oberhalb von $V_{\max} \approx 260 \text{ meV}$ zunächst sehr klein ist, wächst das Verhältnis mit zunehmender Energie langsam an und divergiert schließlich. Dies bedeutet, dass auch im Falle hoher Drehimpulsquantenzahlen die Näherung $f_{E,m}(\rho) \approx J_m(\sqrt{\frac{2m\lambda}{\hbar^2}|E - V_N|} \rho)$ nicht im ganzen Energiebereich gerechtfertigt ist.

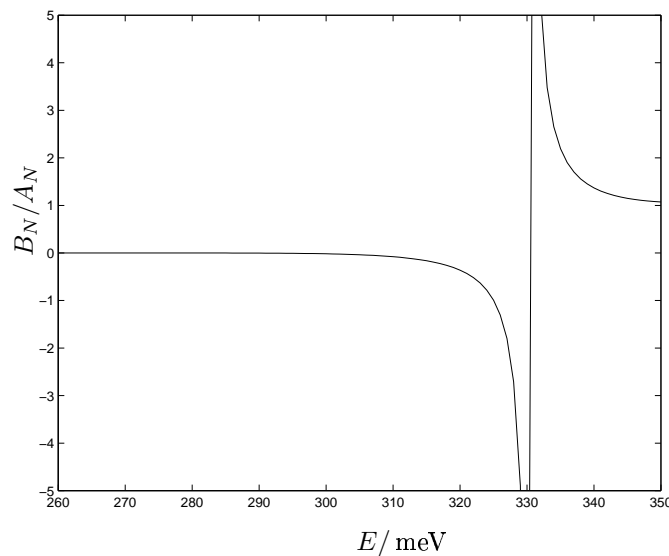


Abbildung 3.17: Verhältnis B_N/A_N als Funktion der Energie für die Streuzustände ($E > V_{\max}$) und Drehimpuls $m = 7$.

Zum Schluss dieses Abschnitts sei noch etwas über die Orthogonalisierung der Streuzustände gesagt: Wenn $f_{m,E}(\rho)$ die Lösung der radialen Schrödingergleichung zur Energie E , Drehimpuls m und den die Asymptotik der Wellenfunktion beschreibenden Koeffizienten (A_N, B_N) bezeichnet, so kann man damit die normierten Funktionen

$$\tilde{f}_{m,k}(\rho) := \sqrt{\frac{k}{A_N^2 + B_N^2}} f_{m,E}(\rho)$$

mit $k = k_N = \sqrt{\frac{2m\lambda}{\hbar^2}|E - V_N|}$ definieren. Für diese Wellenfunktionen kann man zeigen, dass sie die Orthogonalitätsrelation

$$\int d\rho \rho \tilde{f}_{k,m}^*(\rho) \tilde{f}_{k',m}(\rho) = \delta(k - k')$$

erfüllen. Berücksichtigt man auch noch den Winkelanteil und die z -Abhängigkeit, so erhält man für die Streuzustände $\xi_{m,k}(\mathbf{r}) = e^{im\phi} \tilde{f}_{m,k}(\rho) g_\rho(z)$ schließlich insgesamt die Relation:

$$\langle \xi_{m,k} | \xi_{m',k'} \rangle = \delta_{m,m'} \delta(k - k') . \quad (3.19)$$

3.5 Diagonalisierung auf einem Gitter

Wie bereits angekündigt muss man bei der Berechnung der Eigenfunktionen des Hamiltonoperators – zumindest für die gebundenen Zustände – nicht den „Umweg“ über die adiabatische Näherung gehen, sondern kann die zweidimensionale Schrödingergleichung (3.3) auch direkt auf einem Gitter lösen. Diese Methode ist allerdings, verglichen mit der Transfermatrixmethode, sehr rechenintensiv, da man das Potential nun in zwei Raumrichtungen diskretisieren muss. Die Dimension der dabei zu diagonalisierenden Matrizen ist gleich dem Produkt der Anzahl der Stützstellen in ρ - und z -Richtung, so dass bei gleichmäßiger Verfeinerung des Gitters die Matrixdimension quadratisch anwächst. Dies bedeutet, dass man schnelle Algorithmen benötigt, um das hochdimensionale Eigenwertproblem effektiv zu lösen.

Trotz des höheren Rechenaufwandes ist es gewinnbringend diese Methode zu implementieren, da wir auf diese Weise die Ergebnisse, welche wir in den vorangegangenen Abschnitten mit Hilfe der adiabatischen Näherung und der 1-Subband-Approximation gewonnen haben, überprüfen können. Es wird sich zeigen, dass die Ergebnisse beider Methoden sehr gut übereinstimmen.

Im folgenden Abschnitt wird zunächst erläutert, wie man das Eigenwertproblem (3.3) aus dem Raum der quadratintegrierbaren Funktionen $L^2(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \rho)$ ¹⁷ näherungsweise in ein Matrix-Eigenwertproblem überführt. Besonderes Augenmerk muss dabei auf die Randbedingungen gelegt werden, da diese von der Drehimpulsquantenzahl m abhängen. Nachdem das Vorgehen erläutert wurde, werden in Abschnitt 3.6 die Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Dabei wird es auch um den Vergleich der Ergebnisse der Gitterdiagonalisierung mit denen der Transfermatrixmethode gehen.

¹⁷Da wir Zylinderkoordinaten verwenden, müssen die Funktionen, die auf dem Intervall $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$ definiert sind, unter Verwendung der Gewichtsfunktion $w(\rho, z) = \rho$ quadratintegrabel sein. Dies bedeutet, dass das Integral $\int dz \int d\rho \rho |f(\rho, z)|^2$ existieren muss.

3.5.1 Diskretisierung I

Starten wir unsere Betrachtung also wieder von der Gleichung (3.3) aus Abschnitt 3.1. Unter Verwendung der Produktregel lässt sich diese Gleichung direkt zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right\} + V_\lambda(\rho, z) \right] \tilde{\xi}_\alpha = \varepsilon_\alpha \tilde{\xi}_\alpha \quad (3.20)$$

umschreiben. Wählt man nun in ρ - und z -Richtung jeweils ein äquidistantes Gitter mit Abstand $\Delta\rho$ bzw. Δz , kann man die Ableitungen im Inneren¹⁸ des Gebietes $U = [0, \rho_{\max}] \times [z_{\min}, z_{\max}]$ durch die symmetrischen Differenzenquotienten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \rho} \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) &\approx \frac{\tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i+1}, z_j) - \tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i-1}, z_j)}{2\Delta\rho}, \\ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) &\approx \frac{\tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i+1}, z_j) - 2\tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) + \tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i-1}, z_j)}{(\Delta\rho)^2}, \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) &\approx \frac{\tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_{j+1}) - 2\tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) + \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_{j-1})}{(\Delta z)^2} \end{aligned} \quad (3.21)$$

approximieren. Wenn die Stützstellen in z -Richtung mit $j = 0..(\tilde{J} + 1)$ und die Stützstellen in ρ -Richtung mit $i = 1..(\tilde{I} + 1)$ nummeriert werden,¹⁹ besteht das Innere von U aus den Punkten (ρ_i, z_j) mit $i = 2..\tilde{I}$ und $j = 1..\tilde{J}$. Das Gitter und seine Ränder sind schematisch in Abbildung 3.18 dargestellt. Verwendet man nun die Differenzenquotienten (3.21), so lässt sich die Schrödingergleichung (3.20) im Inneren von U diskretisiert als

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{(\Delta\rho)^2} - \frac{1}{2\rho_i\Delta\rho} \right) \tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i+1}, z_j) + \left(-\frac{1}{(\Delta\rho)^2} + \frac{1}{2\rho_i\Delta\rho} \right) \tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i-1}, z_j) \\ - \frac{1}{(\Delta z)^2} \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_{j+1}) - \frac{1}{(\Delta z)^2} \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_{j-1}) \\ + \left(\frac{2}{(\Delta\rho)^2} + \frac{m^2}{\rho_i^2} + \frac{2}{(\Delta z)^2} + V_\lambda(\rho_i, z_j) \right) \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) = \varepsilon_\alpha \tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) \end{aligned} \quad (3.22)$$

schreiben. Um zu dieser Darstellung zu gelangen wurden noch dimensionslose Variablen eingeführt, d.h. alle Längen werden im Folgenden in Einheiten einer Basislänge L und die Energien in Einheiten von $\frac{\hbar^2}{2m_\lambda L^2}$ gemessen.

3.5.2 Randbedingungen

Bis jetzt haben wir uns noch keine Gedanken über die Ränder gemacht. Diese müssen getrennt von den anderen Punkten behandelt werden, weil die Ableitungen auf einem Randpunkt nicht mehr über die Differenzenquotienten aus Gleichung (3.21) definiert sind, da diese immer die Existenz zweier Nachbarn voraussetzen. Die Ränder mit $\rho = \rho_{\max}$ oder $z = z_{\max}$ wie auch $z = z_{\min}$ sind dabei im Prinzip unproblematisch, da man diese so weit außen wählen kann, dass die Wellenfunktion eines gebundenen Zustandes dort bereits weitestgehend abgeklungen

¹⁸An den Rändern kann man diese Approximationen nicht mehr verwenden, da diese Näherungsausdrücke allesamt die Existenz von Nachbarn zu beiden Seiten erfordern (s.u.).

¹⁹Die Asymmetrie in der Nummerierung mag zunächst etwas befremdlich erscheinen, sie hat sich allerdings als recht nützlich erwiesen.

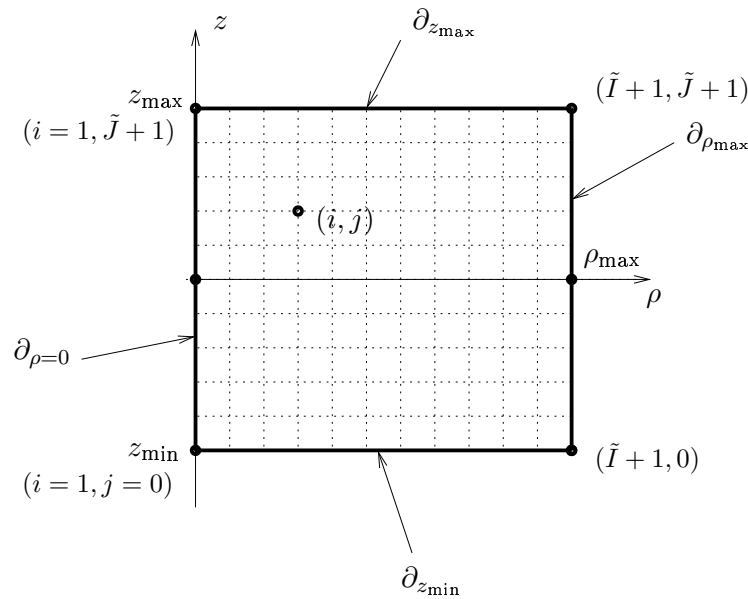


Abbildung 3.18: Skizze des zweidimensionalen Gitters, welches zur Diskretisierung herangezogen wird, und dessen Ränder.

ist. Unter dieser Voraussetzung kann man die Wellenfunktion auf diesen Rändern Null setzen. Anders formuliert kann man auf diesen Rändern Dirichlet'sche Randbedingungen mit $\tilde{\xi}|_{\partial} = 0$ verwenden.

Problematischer ist der Rand mit $\rho = 0$, da dort die Wellenfunktion im Allgemeinen nicht verschwindet. Um das Verhalten der Lösung der Schrödingergleichung (3.20) bei $\rho = 0$ zu studieren, betrachten wir diese Gleichung in einer infinitesimalen Umgebung um $\rho = 0$. Aufgrund der Geometrie des Quantenpunktes kann man das Potential dort in beliebig guter Näherung durch $V(\rho, z) \approx V(0, z)$ approximieren und die Gleichung (3.20) dann in dieser Umgebung exakt lösen. Da das Potential unter dieser Voraussetzung unabhängig von ρ ist, zerfällt der Hamiltonoperator in einen ρ - und einen z -abhängigen Anteil und die Lösungen der Eigenwertgleichung sind um $\rho = 0$ durch

$$\tilde{\xi}_{\alpha}(\rho, z) = J_m(k\rho)g_H(z) \quad (3.23)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet $J_m(x)$ die Besselfunktionen erster Art und $g_H(x)$ ist eine Lösung der eindimensionalen Schrödingergleichung für den endlich tiefen Potentialtopf der Tiefe V_{λ}^0 und der Breite H . In der Tat zerfällt der Hamiltonoperator (3.20) in einer unendlich kleinen Umgebung von $\rho = 0$ genau in die beiden Anteile, die wir bereits im Rahmen der adiabatischen Näherung (Gleichungen (3.5) und (3.6)) kennengelernt haben. In der unendlich kleinen Umgebung ist die Entkopplung allerdings exakt, da $E_0(\rho)$ um $\rho = 0$ konstant ist.

Aus der Reihenentwicklung von $J_m(k\rho)$ um $\rho = 0$ folgt, dass für $|m| \neq 0$ die Wellenfunktion bei $\rho = 0$ verschwindet (vgl. auch Abbildung 3.6 auf Seite 68). Für Drehimpulse $|m| \neq 0$ kann man also auf dem gesamten Randgebiet Dirichlet'sche Randbedingungen verwenden. Anders für $m = 0$, hier verschwindet die Wellenfunktion für $\rho = 0$ nicht, so dass der Wert der Wellenfunktion $\tilde{\xi}_{\alpha}(\rho = 0, z)$ noch explizit aus der Eigenwertgleichung gewonnen werden muss.

Da nun aber

$$\left. \frac{dJ_0(k\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=0} = 0$$

gilt, folgt aus Gleichung (3.23) sofort

$$\left. \frac{\partial}{\partial \rho} \tilde{\xi}_\alpha(\rho, z) \right|_{\rho=0} = 0 . \quad (3.24)$$

Dies bedeutet aber nichts anderes, als dass man auf dem $\rho = 0$ -Rand Neumann'sche Randbedingungen, bei denen die Normalenableitung auf dem Randgebiet verschwinden, verwenden muss. Aus der verschwindenden Ableitung folgert man

$$0 = \left. \frac{\partial}{\partial \rho} \tilde{\xi}_\alpha(\rho, z) \right|_{\rho=0} \approx \frac{\tilde{\xi}_\alpha(\rho_{1+1}, z_j) - \tilde{\xi}_\alpha(\rho_{1-1}, z_j)}{2\Delta\rho} \Rightarrow \tilde{\xi}_\alpha(\rho_2, z_j) \approx \tilde{\xi}_\alpha(\rho_0, z_j) , \quad (3.25)$$

so dass man für diesen Fall eine Bestimmungsgleichung für die Funktionswerte der linken Nachbarpunkte, die außerhalb von U liegen, gefunden hat. Diese Funktionswerte werden im Folgenden verwendet, um die Wellenfunktion auf dem Rand $\partial_{\rho=0}$ für den Drehimpuls $m = 0$ zu bestimmen.

Zusammengefasst lässt sich also feststellen, dass wir für

- $m \neq 0$ überall mit Dirichlet'schen Randbedingungen arbeiten können, so dass sich die Menge der effektiv zu berechnenden Funktionswerte auf das Innere von U beschränkt.
- $m = 0$ auf dem Rand $\partial_{\rho=0}$ mit Neumann'schen Randbedingungen arbeiten müssen, aber auf den anderen Rändern ebenfalls Dirichlet'sche Randbedingungen verwenden können. In diesem Fall müssen also die Funktionswerte für $U \cup \partial_{\rho=0}$ bestimmt werden.

3.5.3 Diskretisierung II

Nach diesem Einschub über die Randbedingungen, können wir wieder dazu übergehen das Eigenwertproblem (3.20) in Matrixform zu formulieren. Bis jetzt ist die Wellenfunktion noch auf dem zweidimensionalen Gitter definiert und wir haben dabei die Matrix $\tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j)$ verwendet. Um nun die Gleichung (3.22) auf ein Matrixproblem zurückzuführen, definiert man die Komponenten Λ_n des Vektors $\mathbf{\Lambda}$ mittels

$$\Lambda_n := \tilde{\xi}_\alpha(\rho_{i(n)}, z_{j(n)}) \quad \text{mit} \quad j(n) = (n \bmod \tilde{J}) \quad \text{und} \quad i(n) = \frac{n - j(n)}{\tilde{J}} + 1 . \quad (3.26)$$

Unter Verwendung von

$$\tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j) = \Lambda_{\tilde{J}(i-1)+j} \quad (3.27)$$

lässt sich dann aus dem Vektor $\mathbf{\Lambda}$ die Wellenfunktion $\tilde{\xi}_\alpha(\rho_i, z_j)$ auf dem zweidimensionalen Gitter rekonstruieren.

Vermöge des Vektors $\mathbf{\Lambda}$ lässt sich nun Gleichung (3.22) als

$$a_{i(n)}\Lambda_{n+\tilde{J}} + b_{i(n),j(n)}\Lambda_n + c_{i(n)}\Lambda_{n-\tilde{J}} + d(\Lambda_{n+1} + \Lambda_{n-1}) = \varepsilon\Lambda_n \quad (3.28)$$

schreiben. Dabei sind die Koeffizienten definiert als:

$$\begin{aligned} a_i &:= -\frac{1}{(\Delta\rho)^2} - \frac{1}{2\rho_i\Delta\rho}, \\ b_{ij} &:= \frac{2}{(\Delta\rho)^2} + \frac{m^2}{\rho_i^2} + \frac{2}{(\Delta z)^2} + V_\lambda(\rho_i, z_j), \\ c_i &:= -\frac{1}{(\Delta\rho)^2} + \frac{1}{2\rho_i\Delta\rho}, \\ d &:= -\frac{1}{(\Delta z)^2}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Drehimpulsquantenzahl $m \neq 0$

Für $m \neq 0$ beschränken sich die zu ermittelnden Funktionswerte auf das Innere von U (d.h. $n = (\tilde{J} + 1) \dots \tilde{J}\tilde{I}$). Da dies gerade der Bereich ist, in welchem Gleichung (3.22) und somit Gleichung (3.28) gültig ist, lässt sich – wenn man noch bedenkt, dass $\tilde{\xi}_\alpha(\rho, z)$ auf den Rändern verschwindet – Gleichung (3.28) umschreiben zu:

$$\underline{H}_{m \neq 0} \mathbf{\Lambda} = E \mathbf{\Lambda} . \quad (3.30)$$

Die Matrix des diskretisierten Hamiltonoperator ist über

$$\begin{aligned} \underline{H}_{m \neq 0} &= \text{Diag}([b_{i(\tilde{J}+1),j(\tilde{J}+1)}, b_{i(\tilde{J}+2),j(\tilde{J}+2)}, \dots, b_{i(\tilde{J}\tilde{I}),j(\tilde{J}\tilde{I})}]; +0, N) \\ &\quad + \text{Diag}([d, \dots, d]; +1) + \text{Diag}([d, \dots, d]; -1, N) \\ &\quad + \text{Diag}([c_{i(2\tilde{J}+1)}, c_{i(2\tilde{J}+2)}, \dots, c_{i(\tilde{I}\tilde{J})}]; -\tilde{J}, N) \\ &\quad + \text{Diag}([a_{i(\tilde{J}+1)}, a_{i(\tilde{J}+2)}, \dots, a_{i((\tilde{I}-1)\tilde{J})}]; +\tilde{J}, N) \end{aligned} \quad (3.31)$$

definiert. Hierbei ist $N = \tilde{I}(\tilde{J} - 1)$ die Dimension der Matrix und es wurde die $N \times N$ -Matrix $\text{Diag}([a_1, a_2, \dots, a_{N-k}]; k, N)$ definiert, welche auf der k -ten Nebendiagonale die Einträge $[a_1, a_2, \dots, a_{N-k}]$ besitzt und sonst nur Nullen enthält.

Die Matrix, welche durch Gleichung (3.31) definiert ist, ist sehr dünn besetzt: Sie besteht nur aus fünf Diagonalen, nämlich der Haupt- und den beiden direkten Nebendiagonalen sowie den $\pm\tilde{J}$ -ten Nebendiagonalen. Die explizite Gestalt der Matrix (3.31) zeigt Abbildung 3.19. Um zu dieser Form zu gelangen wurde noch die Definition (3.26) verwendet.

Alles in allem ist es also für $m \neq 0$ gelungen das Eigenwertproblem näherungsweise aus dem unendlichdimensionalen Raum der quadratintegrablen Funktionen $L^2(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \rho)$ in den endlichdimensionalen Raum $\mathbb{R}^{\tilde{I}(\tilde{J}-1)}$ zu holen.

Drehimpulsquantenzahl $m = 0$

Für $m = 0$ gelangt man zwar für die inneren Punkte wieder zu Gleichung (3.28), muss aber die Punkte auf dem Rand $\partial_{\rho=0}$ getrennt behandeln. Aufgrund der Neumann'schen Randbedingung (3.24) verschwindet die erste Ableitung nach ρ aus Gleichung (3.20), so dass die Diskretisierung mittels der Gleichungen (3.21) unter Verwendung von Gleichung (3.25) schließlich

$$\varepsilon \Lambda_n = d(\Lambda_{n+1} + \Lambda_{n-1}) + \begin{cases} \tilde{a} \Lambda_{n+\tilde{J}} + \tilde{b}_{i(n),j(n)} \Lambda_n & ; n = 1 \dots \tilde{J} \\ a_{i(n)} \Lambda_{n+\tilde{J}} + b_{i(n),j(n)} \Lambda_n + c_{i(n)} \Lambda_{n-\tilde{J}} & ; n = \tilde{J} + 1 \dots \tilde{I}\tilde{J} \end{cases} \quad (3.32)$$

$$\underline{\underline{H}}_{m \neq 0} = \begin{bmatrix} \begin{array}{c|c|c|c|c} b_{2,1} & d & & & \\ d & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & b_{2,\tilde{J}} & & \\ \hline c_3 & & \ddots & & \\ & \ddots & & c_3 & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \end{array} & \begin{array}{c|c|c|c|c} a_2 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & a_2 & & \\ \hline b_{3,1} & \ddots & & & \\ \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & & b_{3,\tilde{J}} & \\ \hline c_4 & & \ddots & & \\ & \ddots & & c_4 & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \end{array} & \begin{array}{c|c|c|c|c} & & & & \\ & & & & \\ & & a_3 & & \\ \hline & & \ddots & & \\ & & & a_3 & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \end{array} & \begin{array}{c|c|c|c|c} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{array} & \begin{array}{c|c|c|c|c} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{array} \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \end{bmatrix}$$

Abbildung 3.19: Explizite Darstellung der Matrix (3.31).

liefert. Die neuen Koeffizienten sind definiert als:

$$\begin{aligned} \tilde{a} &:= -\frac{2}{(\Delta\rho)^2}, \\ \tilde{b}_{ij} &:= \frac{2}{(\Delta\rho)^2} + \frac{2}{(\Delta z)^2} + V(\rho_i, z_j) . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Die Gleichungen mit $n = 1 \dots \tilde{J}$ entsprechen den neu hinzugekommenen Punkten des $\partial_{\rho=0}$ - Randes. Die in diesen Gleichungen neu definierten Koeffizienten geben die veränderten Randbedingungen bei $\rho = 0$ wieder. Unter Verwendung der Dirichlet'schen Randbedingungen an den anderen drei Rändern, gelangt man nun wieder zu einem Matrixproblem $\underline{\underline{H}}_{m=0} \mathbf{\Lambda} = E \mathbf{\Lambda}$ mit der erweiterten Matrix

$$\begin{aligned} \underline{\underline{H}}_{m=0} &= \text{Diag}([\tilde{b}_{i(1)j(1)}, \dots, \tilde{b}_{i(\tilde{J})j(\tilde{J})}, b_{i(\tilde{J}+1),j(\tilde{J}+1)}, b_{i(\tilde{J}+2),j(\tilde{J}+2)}, \dots, b_{i(\tilde{J}\tilde{I}),j(\tilde{J}\tilde{I})}]; +0, \tilde{I}\tilde{J}) \\ &+ \text{Diag}([d, \dots, d]; +1, \tilde{I}\tilde{J}) + \text{Diag}([d, \dots, d]; -1, \tilde{I}\tilde{J}) \\ &+ \text{Diag}([c_{i(\tilde{J}+1)}, c_{i(\tilde{J}+2)}, \dots, c_{i(\tilde{J}\tilde{I})}]; -\tilde{J}, \tilde{I}\tilde{J}) \\ &+ \text{Diag}([\underbrace{\tilde{a}, \dots, \tilde{a}}_{\tilde{J} \text{ Einträge}}, a_{i(\tilde{J}+1)}, a_{i(\tilde{J}+2)}, \dots, a_{i((\tilde{I}-1)\tilde{J})}]; +\tilde{J}, \tilde{I}\tilde{J}), \end{aligned} \quad (3.34)$$

deren explizite Gestalt unter Verwendung der Definition (3.26) in Abbildung 3.20 dargestellt ist. Die neu eingeführten gefüllten Blöcke sind alle $(\tilde{J} \times \tilde{J})$ -Matrizen. Sie stammen von den \tilde{J} Punkten des $\rho = 0$ -Randes, die durch die Verwendung der Neumann'schen Randbedingung hinzukommen. Durch Verwendung der veränderten Randbedingungen ist es also auch

für $m = 0$ gelungen das Eigenwertproblem (3.20) im $L^2(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \rho)$ approximativ auf ein endlichdimensionales Eigenwertproblem abzubilden.

$$\underline{\underline{H}}_{m=0} = \left[\begin{array}{cc|c} \begin{array}{ccc} \tilde{b}_{1,1} & d & \\ d & \ddots & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \tilde{b}_{1,\bar{J}} \end{array} & \begin{array}{c} \tilde{a} \\ \ddots \\ d \end{array} & \underline{\underline{0}} \\ \hline \begin{array}{c} c_2 \\ \ddots \\ c_2 \end{array} & \begin{array}{c} d \\ \ddots \\ c_2 \end{array} & \begin{array}{c} \tilde{a} \\ \ddots \\ c_2 \end{array} \\ \hline \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{H}}_{m \neq 0} & \end{array} \right]$$

Abbildung 3.20: Explizite Darstellung der Matrix (3.34).

Sowohl die Matrix $\underline{\underline{H}}_{m=0}$ als auch $\underline{\underline{H}}_{m \neq 0}$ sind sehr einfach strukturiert, dünn besetzt und besitzen ausschließlich reelle Einträge. Da die Matrizen allerdings nicht symmetrisch sind, kann man zunächst nicht erwarten, dass alle Eigenwerte reell sind. Dies ist aber – wie man es für physikalisch sinnvolle Energien auch erwartet – der Fall, da wir die Matrizen durch Diskretisierung eines hermiteschen Hamiltonoperators erhalten haben. Die Hamilton'sche Matrix selbst ist allerdings nicht hermitesch. Dies liegt daran, dass der Hamiltonoperator aus Gleichung (3.20) nicht bezüglich des Skalarproduktes $\langle f|g \rangle = \int d\rho \int dz f^*(\rho, z) g(\rho, z)$, sondern bezüglich des um den Gewichtungsfaktor $w(\rho, z) = \rho$ erweiterten Skalarproduktes $\langle f|g \rangle = \int dz \int d\rho w(\rho, z) f^*(\rho, z) g(\rho, z)$ hermitesch ist. Der Gewichtungsfaktor resultiert aus der Verwendung von Zylinderkoordinaten.

Da die Hamilton'sche Matrix nicht hermitesch ist, sind auch die zugehörigen Eigenvektoren nicht orthogonal im Sinne der linearen Algebra. Die daraus ermittelten Wellenfunktionen $\tilde{\xi}(\rho, z)$ sind aber bezüglich des oben angeführten Skalarproduktes in Zylinderkoordinaten orthogonal. Aufgrund der oben erwähnten Asymmetrie der Matrizen ist es nicht möglich die

schnellen, auf reelle symmetrische Matrizen spezialisierten Algorithmen zu verwenden. Man muss stattdessen allgemeinere und damit langsamere Algorithmen verwenden.

Zum Schluss dieses Abschnitts soll die Rolle des Gewichtungsfaktors noch etwas näher beleuchtet werden. Dazu betrachten wir ein eindimensionales Beispiel. Sei \hat{A} ein Operator und \underline{A} eine diskretisierte Approximation dieses Operators, d.h. $(\hat{A}f)(x_i) \approx (\underline{A}\mathbf{f})_i$ mit $\mathbf{f} = (f(x_1), \dots, f(x_N))^t$. Dann gilt für das Skalarprodukt $\langle f|g \rangle := \int dx w(x) f^*(x) g(x) \approx \sum_i \Delta x w(x_i) f^*(x_i) g(x_i) = (\underline{W}\mathbf{f})^\dagger \mathbf{g}$. Hierbei wurde die Diagonal-Matrix \underline{W} mit den Einträgen $W_{ij} = \delta_{ij} \Delta x w(x_i)$ eingeführt. Falls \hat{A} hermitesch ist, gilt $\langle f|\hat{A}g \rangle = \langle \hat{A}f|g \rangle$. Für die Matrixdarstellung bedeutet das: $(\underline{W}\mathbf{f})^\dagger \underline{A}\mathbf{g} = (\underline{W}\underline{A}\mathbf{f})^\dagger \mathbf{g}$ und somit $\underline{W}^\dagger \underline{A} = \underline{A}^\dagger \underline{W}$. Wenn die Gewichtsfunktion reell ist, gilt $\underline{A} = \underline{A}^\dagger$, falls der Kommutator $[\underline{A}, \underline{W}] = 0$ verschwindet. Wenn \underline{W} nicht entartet ist, ist dies nur möglich wenn \underline{A} bereits diagonal ist (d.h. \hat{A} einer Multiplikation entspricht). Wenn man von Multiplikationsoperatoren absieht, bedeutet dies, dass die Matrixdarstellung des Operators \hat{A} im Allgemeinen nur dann hermitesch ist, wenn $\underline{W} \propto \underline{1}$ gilt. Dies bedeutet für die Gewichtsfunktion $w(x)$, dass sie konstant sein muss.

Da in unserem Fall der Gewichtungsfaktor von ρ nicht aber von z abhängt, kann der z -abhängige Teil der Hamilton'schen Matrix hermitesch gewählt werden. Und in der Tat ist in unserem Fall der Teil der Matrix, der die z -Abhängigkeit des Operators beschreibt, symmetrisch.

3.6 Durchführung und Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden wir zunächst auf die Wahl des zweidimensionalen Gitters eingehen und im Anschluss daran die Ergebnisse, die durch Diskretisierung des Hamiltonoperators auf diesem Gitter gewonnen wurden, vorstellen. Diese werden dann mit den mittels Transfermatrizen gewonnenen Resultaten verglichen und es werden Vor- und Nachteile der beiden Methoden diskutiert.

Die Wahl des zweidimensionalen Gitters, auf dem die Diskretisierung des Eigenwertproblems stattfindet, ist kritisch. Die Matrixdimension ist nämlich gleich dem Produkt aus der Anzahl der Diskretisierungspunkte in ρ - und z -Richtung und zusätzlich wächst die Rechenzeit überproportional mit der Matrixdimension an. Von diesem Standpunkt aus wäre es also sinnvoll das Gitter möglichst klein zu wählen.

Wählt man aber das Gitter nicht fein genug, kann man auch nicht erwarten, dass die Differenzenquotienten (3.21) die Ableitungen in Gleichung (3.20) gut approximieren. Und wenn man die Ränder nicht so weit nach außen legt, dass die exakten Lösungen von Gleichung (3.20) genügend abgeklungen sind, so werden die Wellenfunktionen diese Ränder „spüren“ und sich ihnen anpassen.²⁰ Dies würde zu einer unerwünschten Veränderung des Spektrums und der Wellenfunktionen führen.

Durch systematische Variation sowohl der Ränder (durch Veränderung von z_{\min} , z_{\max} und ρ_{\max}) als auch der Schrittweiten ($\Delta\rho$ und Δz) wurde für den in Abschnitt 3.2 eingeführten Quantenpunkt folgende Gitterparameter als guter Kompromiss zwischen der benötigten Rechenzeit und dem Wunsch das Gitter möglichst fein und groß zu wählen gefunden:

$$d\rho = 0.5, \rho_{\max} = 40 \text{ nm}, dz = 0.05, z_{\min} = -26.6 \text{ nm}, z_{\max} = 29.4 \text{ nm} .$$

²⁰Die Dirichlet'schen Randbedingungen wirken so, als ob sich den Rändern ein unendlich hoher Potentialtopf anschließt.

Für das mit diesen Parametern definierte Gitter liegen die Änderungen der Energie des niedrigsten $|m| = 1$ -Zustandes bei Verfeinerung des Gitters oder Verschiebung der Ränder zu größeren Werten alle deutlich unter einem Prozent.

Betrachtet man die gewählten Gitterparameter, so fällt auf, dass die Schrittweite in z -Richtung deutlich kleiner gewählt wurde als in ρ -Richtung. Dies mag zunächst überraschen, ist aber plausibel, wenn man bedenkt, dass die Ausdehnung der Quantenpunktstruktur in z -Richtung deutlich kleiner als in radialer Richtung ist. Die geringe Ausdehnung in z -Richtung bedingt, dass sich die Wellenfunktion in z -Richtung teilweise schneller verändert als in ρ -Richtung und somit ein feineres Gitter nötig ist, um diese Veränderung aufzulösen.

Die vergleichsweise geringe Ausdehnung des Quantenpunktes in z -Richtung (insbesondere für $\rho > r_{\text{Kappe}}$) in Verbindung mit der endlichen Höhe des Einschlusspotentials bringt die weitere Schwierigkeit mit sich, dass die Wellenfunktionen in z -Richtung relativ langsam abfallen, so dass man den Abstand der Ränder zur Nanostruktur relativ groß wählen muss. Die zwei Grenzen z_{\min} und z_{\max} wurden eingeführt, um den gleichen minimalen Abstand der Ränder von der Quantenpunktstruktur zu beiden Seiten hin zu gewährleisten.

Die ρ -Richtung ist weitaus unkomplizierter, da hier eine relativ große Schrittweite völlig ausreicht und die Wellenfunktion für $\rho = 2r_{\text{Kappe}}$ auch schon weitestgehend abgeklungen ist. Das schnelle Abklingen der Wellenfunktion in radialer Richtung ist auch schon aus der Behandlung mittels Transfermatrizen bekannt (vgl. Abbildung 3.9 und 3.10 auf Seite 73).

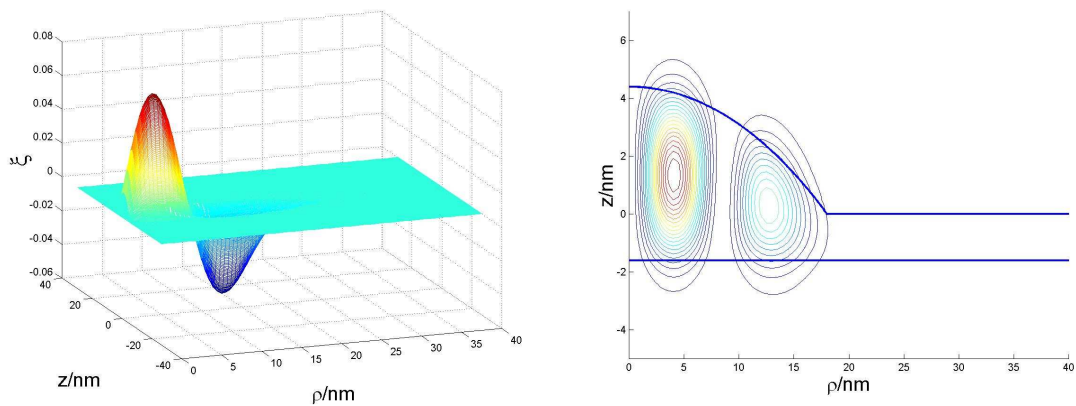


Abbildung 3.21: Elektron-Wellenfunktion für $(m = 1, N_r = 1)$ aufgetragen über z und ρ . Links eine dreidimensionale Darstellung und rechts der dazugehörige Contourplot.

In Abbildung 3.21 ist die Wellenfunktion $\tilde{\xi}(\rho, z)^{21}$ für die Drehimpulsquantenzahl $|m| = 1$ und die radiale Quantenzahl $N_r = 1$ über ρ und z aufgetragen. In der dreidimensionalen Darstellung der Wellenfunktion erkennt man zum einen die Flanken in z -Richtung, die dadurch entstehen, dass die Wellenfunktion in das Material mit höherer Bandlücke eindringt, und zum

²¹Da die Wellenfunktion reell ist, kann man $\tilde{\xi}$ direkt auftragen und muss nicht den Umweg über das Betragsquadrat gehen. Dies erlaubt auch einen besseren Vergleich mit den Ergebnissen aus der Transfermatrixmethode, bei der es ebenfalls möglich war die radiale Wellenfunktion direkt aufzutragen. Dass es auch hier möglich ist, die Wellenfunktion reell zu wählen, liegt daran, dass die Hamilton'sche Matrix \underline{H} nur reelle Einträge besitzt und das Energiespektrum für festen Drehimpuls m nicht entartet ist.

anderen – in radialer Richtung – den Verlauf den wir schon aus der Behandlung mittels Transfermatrizen kennen. Der Contourplot von $\tilde{\xi}_{(m=1, N_r=1)}$ zeigt, wie sich die Wellenfunktion der Quantenpunktgeometrie (angedeutet durch die durchgezogenen, dicken Linien) anpasst. Dies ist besonders gut am zweiten Extremum ersichtlich.

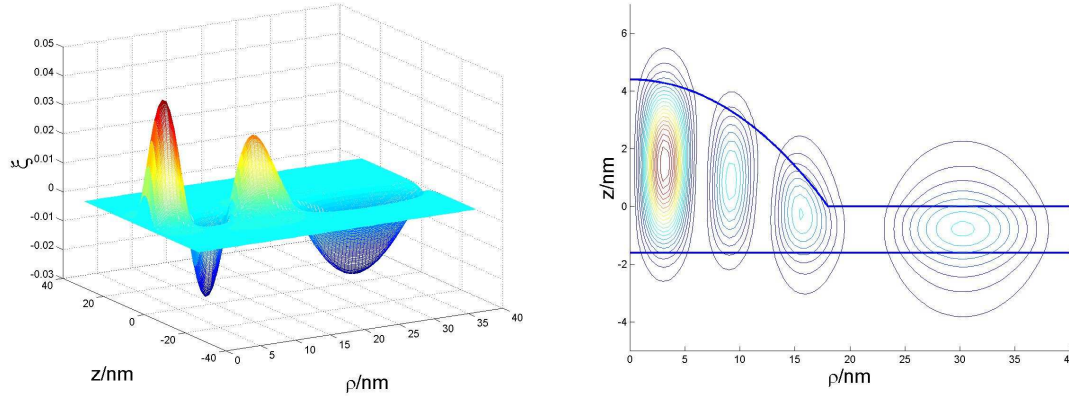


Abbildung 3.22: Wellenfunktion des ungebundenen Zustandes ($m = 1, N_r = 3$) eines Elektrons. Zum einen in einer dreidimensionalen Darstellung und zum anderen als Contourplot.

Noch deutlicher wird dieser „Geometrie-Effekt“ für den Fall eines ungebundenen Zustandes, der in Abbildung 3.22 dargestellt ist. Dafür, dass es sich bei diesem Zustand nicht um einen gebundenen Zustand handelt, sprechen mehrere Indizien:

1. Der Zustand ist deutlich schwächer lokalisiert als die Eigenzustände zu niedrigeren Energien.
2. Der letzte Wellenberg verlängert sich bis zum neuen Rand, wenn man ρ_{\max} vergrößert, wohingegen die als gebunden klassifizierten Zustände ihre Form behalten. Wenn man bedenkt, dass die Dirichlet'schen Randbedingungen wie ein unendlich hoher Kasten wirken, erwartet man von einem ungebunden Zustand auch genau dieses Verhalten. Durch die Verlagerung des Randes zu größeren ρ -Werten ist es der Wellenfunktion nämlich möglich eine größere Wellenlänge zu verwirklichen und somit ihre Energie zu verringern.
3. Die Energie liegt oberhalb von V_{\max} , dem maximalen Wert des radialen Potentials.²²

Ein Beispiel einer Wellenfunktion mit Drehimpuls $m = 0$ ist in Abbildung 3.23 angegeben ($N_r = 2$). Man erkennt deutlich den qualitativen Unterschied zu den $m \neq 0$ -Zuständen. Dieser Unterschied wird durch die Verwendung Neumann'scher Randbedingungen hervorgerufen. In radialer Richtung reproduziert sich auch hier wieder der aus dem Transfermatrixzugang bekannte Verlauf (vgl. Abbildung 3.9 auf Seite 72).

In Tabelle 3.2 sind die Eigenenergien der gebundenen Zustände zusammengestellt. Berechnet wurden sie zum einen mittels Diskretisierung auf dem zweidimensionalen Gitter und zum anderen unter Verwendung von Transfermatrizen. Weiterhin ist der Betrag des Matrixelementes T_{21} aufgelistet, welches ein Indikator für die Genauigkeit der Transfermatrixmethode darstellt

²²Wie sich zeigt, ist dieses Kriterium relativ schwach, da wir in der Tat gebundene Zustände knapp oberhalb von V_{\max} gefunden haben.

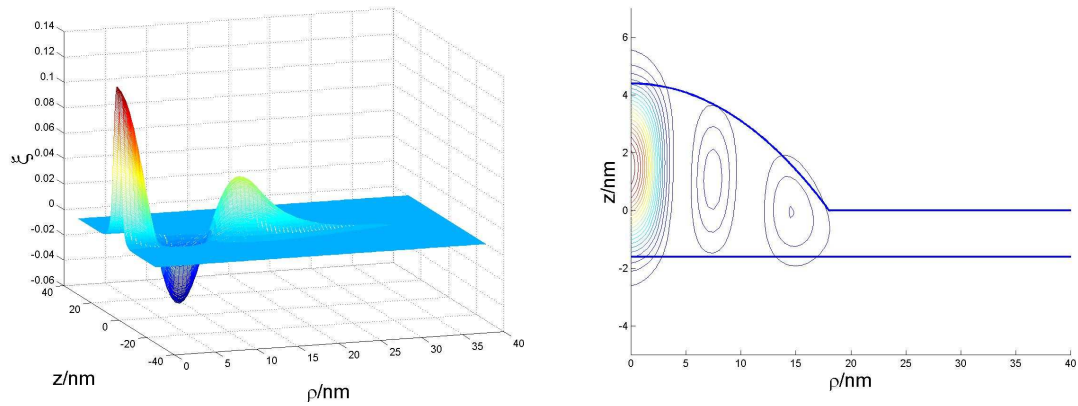


Abbildung 3.23: Wellenfunktion in dreidimensionaler Darstellung und als Contourplot ($m = 0, N_r = 2$).

(im Idealfall: $T_{21} = 0$). Es fällt auf, dass man auf dem Gitter zwei zusätzliche gebundene Zustände findet. Die Energie dieser Zustände liegt oberhalb der maximalen Energie des radialen Potentials, welches in der Transfermatrixmethode verwendet wird ($V_{\max} = 257.8745 \text{ meV}$), so dass diese beiden Zustände in dem Transfermatrixzugang auch nicht gebunden sein können. Hier zeigt sich eine Schwäche der adiabatischen Näherung.

m	N_r	$E_{\text{Gitter}} / \text{meV}$	$E_{\text{Transfer}} / \text{meV}$	$ T_{21} / 10^{-15}$
0	0	99.7260	99.8612	0.0154
0	1	159.3183	159.5718	0.0051
0	2	229.3797	230.7062	0.1724
1	0	127.3072	127.2264	0.0076
1	1	193.4417	193.7725	0.0036
2	0	157.1909	156.9312	0.0257
2	1	228.3749	228.9177	0.0719
3	0	189.1728	188.7709	0.0391
3	1	261.4149	ungebunden	—
4	0	222.9497	222.4449	0.0360
5	0	257.9465	ungebunden	—

Tabelle 3.2: Vergleich zwischen den mittels Transfermatrizen ($d\rho = 0.01$) und Diagonalisierung auf einem zweidimensionalen Gitter ($d\rho = 0.5, \rho_{\max} = 40 \text{ nm}$, $dz = 0.05$, $z_{\min} = -26.6 \text{ nm}$, $z_{\max} = 29.4 \text{ nm}$) ermittelten Energieniveaus.

In Abbildung 3.24 ist das veränderte Spektrum dargestellt. Die beiden zusätzlichen Punkte fügen sich sehr schön in die bestehende Ordnung ein. Hätte man noch einen weiteren gebundenen Zustand mit $m = 1$ leicht oberhalb von V_{\max} (in der Abbildung durch die durchgezogene Linie angedeutet), so würde sich – in guter Näherung – wieder das abgeschnittene Spektrum eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators ergeben. Bei den energetisch nahezu entarteten

Eigenzuständen zeigt sich auch hier wieder, dass die Zustände mit höherem Drehimpulsbetrag $|m|$ etwas niedrigere Energien aufweisen. Wenn man davon ausgeht, dass dies generell der Fall ist, kann dies das Ausbleiben eines zusätzlichen gebundenen Zustandes für $m = 1$ erklären.

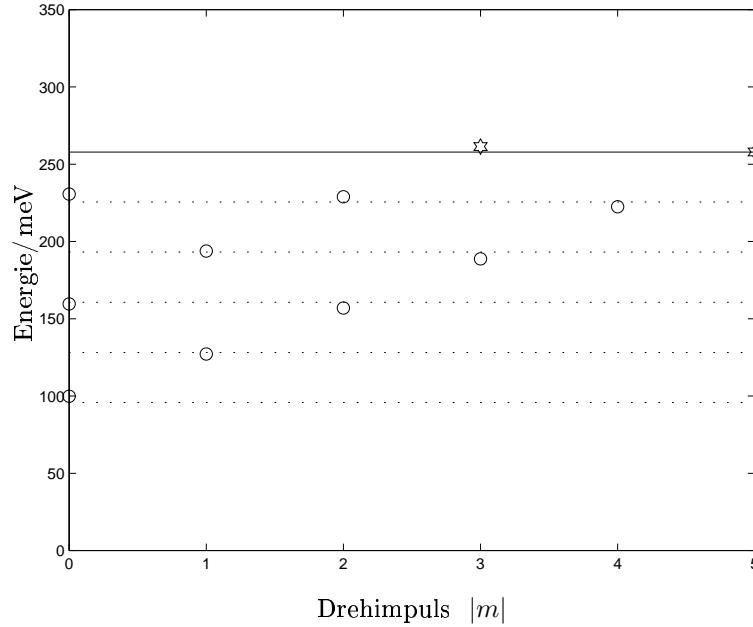


Abbildung 3.24: Energiespektrum eines Elektrons im Quantenpunkt. Gegenüber Abbildung 3.8 wurde das Spektrum um zwei gebundene Zustände erweitert, die sich aus der Gitterdiagonalisierung ergeben.

Wie man der Tabelle 3.2 entnehmen kann, zeigen die Eigenenergien der Zustände unterhalb von V_{\max} eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Methoden (die relativen Abweichungen liegen alle unter einem Prozent). Die größte Abweichung zeigt sich hier für den Zustand mit $(m = 0, N_r = 2)$. Dabei fällt zunächst auch auf, dass das Matricelement $|T_{21}|$ deutlich größer ist als bei den anderen Zuständen (wenngleich auch dieses Matricelement immer noch von der Größenordnung 10^{-15} ist), was darauf hindeuten scheint, dass der Fehler auf der Seite des Transfermatrixzugangs liegt. Dies ist allerdings nicht der Fall, da man die Nullstellensuche in der Transfermatrixmethode noch verfeinern kann, wodurch sich zwar das Matricelement T_{21} weiter reduzieren lässt, sich die Energie (innerhalb der angegebenen Genauigkeit) aber nicht mehr ändert. Verfeinert man aber das Gitter für die Diskretisierung in ρ -Richtung, so nähert sich der Energiewert dem des Transfermatrixzugangs. Bei dieser Verfeinerung ändern sich die Energien der Zustände $(m = 0, N_r = 0)$ und $(m = 0, N_r = 1)$ weit weniger als die des Zustandes mit $(m = 0, N_r = 2)$. Dies ist dadurch zu erklären, dass der Zustand mit $N_r = 2$ insgesamt 3 Extrema aufweist, wodurch auch die mittlere Krümmung der Wellenfunktion in ρ -Richtung zunimmt. Dies bedeutet, dass man für $N_r = 2$ mehr Stützstellen benötigt, um die Struktur der Wellenfunktion in ρ -Richtung mit gleicher Genauigkeit wie im Falle von $N_r = 0$ und $N_r = 1$ aufzulösen.

Die geringe Veränderung der Eigenenergien durch die Verfeinerung des Gitters steht allerdings in keinem Verhältnis zu dem deutlich erhöhten Rechenaufwand, der mit dieser Verfeinerung verknüpft ist. Deshalb ist es sinnvoll weiterhin mit dem auf Seite 86 eingeführten Gitter zu rechnen, auch wenn man damit auf die letzten Promille an Energieänderung verzichtet. (Verringert man – bei gleicher Gesamtzahl an Stützstellen – den Abstand Δz der Stützstellen zu

Gunsten des ρ -Abstandes, so fallen die Abweichungen deutlich stärker aus. Dies zeigt, dass die obige Wahl von Δz und $\Delta \rho$ bei fester Gesamtzahl an Stützstellen für den vorliegenden Quantenpunkt optimal ist.)

Alles in allem lässt sich feststellen, dass die adiabatische Näherung und 1-Subband-Approximation für Energien $E < V_{\max}$ sehr gute Näherungen darstellen. Da die hochenergetischen Zustände des Lochs sehr nahe an V_{\max} liegen (vgl. Abbildung 3.11 auf Seite 74) und somit keine weiteren Zustände knapp oberhalb von V_{\max} zu erwarten sind, kann für die Löcher auf eine Berechnung der Eigenzustände mittels exakter Diagonalisierung verzichtet werden.

Zum Schluss des Kapitels sind in Tabelle 3.3 einige Aspekte der Transfermatrixmethode und des Gitterdiagonalisierungs-Zugangs zusammengestellt.

Transfermatrixmethode	Gitterdiagonalisierung
<ul style="list-style-type: none"> • Erfordert nur die Berechnung von Besselfunktionen und Matrizenmultiplikationen. • Findet nur gebundene Zustände unterhalb von V_{\max}. • Kann beliebige Streuzustände mit $E > V_{\max}$ ermitteln. • Die Wahl eines beliebigen Stützstellengitters ist unproblematisch, so dass man z.B. eine dem Potential angepasste Stützstellenverteilung wählen kann. 	<ul style="list-style-type: none"> • Benötigt spezielle Algorithmen, um große Matrizen effektiv zu diagonalisieren. • Findet gebundene Zustände auch knapp oberhalb von V_{\max}. • Kann, aufgrund der Randbedingungen, nur solche Streuzustände finden, welche bei $\rho = \rho_{\max}$ verschwinden. • Die Wahl eines nicht äquidistanten Gitters bringt einen erheblich höheren Aufwand mit sich, da dann die Approximation der Ableitungen nicht einheitlich ist.

Tabelle 3.3: Gegenüberstellung einiger Aspekte der Transfermatrix- und Gitterdiagonalisierungsmethode.

4 Elektronische Zustände in elliptischen Quantenpunkten auf einer Benetzungsschicht

In den vorangegangenen Kapiteln wurden ausschließlich Quantenpunkte untersucht, welche um die z -Achse rotationssymmetrisch waren. Da die Aussagen über die Form der Quantenpunkte in der Literatur stark variieren und häufig nur von „linsenförmigen“ Quantenpunkten die Rede ist, ohne die genaue Form zu spezifizieren, liegt es nahe zu untersuchen, welche Auswirkung eine Abweichung von der Rotationssymmetrie auf die Einteilchen-Zustände hat.

Im Folgenden wird die Asymmetrie des Quantenpunktes durch eine Ellipsoidkappe, welche auf einer Wettinglayer aufliegt, modelliert. Da man durch den Verlust der Rotationssymmetrie die dreidimensionale Schrödingergleichung nicht mehr auf eine zweidimensionale Schrödingergleichung reduzieren kann, muss man im Prinzip das volle dreidimensionale Eigenwertproblem lösen. Wenn man sich allerdings wieder auf flache Quantenpunkte beschränkt, kann man die Schrödingergleichung in adiabatischer Näherung zumindest approximativ auf ein zweidimensionales Problem reduzieren. Die resultierende zweidimensionale Schrödingergleichung wird analog zu Abschnitt 3.5 auf ein Matrixproblem zurückgeführt und dann numerisch gelöst.

Die Geometrie des Modellquantenpunktes wird in Abschnitt 4.1 näher erläutert. Das Aufstellen des Hamiltonoperators und der Schrödingergleichung in adiabatischer Näherung erfolgt in Abschnitt 4.2. In Abschnitt 4.3 wird die Abbildung auf ein Matrixproblem besprochen und zum Schluss werden die Ergebnisse in Abschnitt 4.4 vorgestellt und diskutiert.

4.1 Modellgeometrie

Wie bereits angekündigt wird die Asymmetrie des Quantenpunktes durch eine Ellipsoidkappe der Höhe H , welche auf einer Wettinglayer der Dicke z_0 aufliegt, modelliert. Der Schnitt des Ellipsoids mit der Wettinglayer definiert eine Ellipse mit den Halbachsen l_1 und l_2 . Im

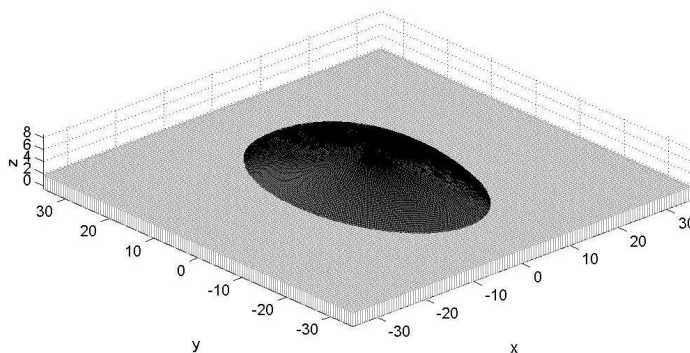


Abbildung 4.1: Elliptischer Quantenpunkt auf einer Wettinglayer.

Folgenden werden wir diese beiden Halbachsen als Parameter verwenden. Bei vorgegebener Grundrissellipse und gegebener Höhe der Struktur gibt es aber immer noch unendlich viele Ellipsoide, von denen die Ellipsoidkappe stammen kann. Insgesamt gibt es nämlich folgende

einparametrische Schar von Höhenfunktionen $h_\delta(x, y)$ mit $\delta > 0$, die sowohl alle eine Ellipse mit Halbachsen l_1 und l_2 als Grundriss haben als auch alle von einer Ellipsoidkappe stammen und eine Höhe H besitzen:

$$h_\delta(x, y) = (H + \delta) \sqrt{1 - \left\{ \frac{x^2}{l_1^2} + \frac{y^2}{l_2^2} \right\} \left\{ 1 - \left(\frac{\delta}{H + \delta} \right)^2 \right\}} - \delta . \quad (4.1)$$

Man sieht leicht, dass

$$h_\delta(0, 0) = H \quad \text{und} \quad h_\delta(x', y') = 0 \quad \text{falls} \quad \frac{x'^2}{l_1^2} + \frac{y'^2}{l_2^2} = 1$$

gilt. Der Parameter δ ist implizit durch den Steigungswinkel α , welcher in Abbildung 4.2 eingetragen ist, definiert:

$$\tan \alpha = \left. \frac{\partial h_\delta(0, y)}{\partial y} \right|_{y=-l_2} .$$

Verwendet man nun Gleichung (4.1), so lässt sich obige Gleichung nach δ auflösen und man erhält:

$$\delta = \frac{H^2}{l_2 \tan \alpha - 2H} . \quad (4.2)$$

Wegen der Positivität des Parameters δ kann der Steigungswinkel α nicht beliebig sein, sondern muss in dem Intervall $\left[\arctan\left(\frac{2H}{l_2}\right), 90^\circ \right]$ liegen.

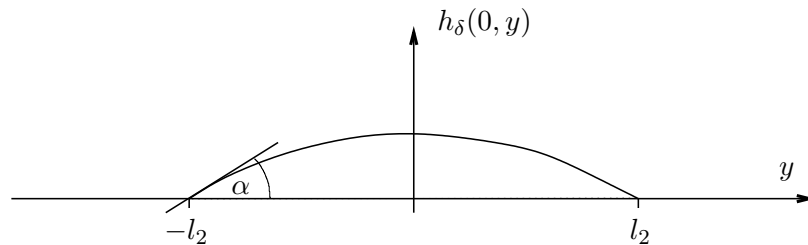


Abbildung 4.2: Zur Definition des Steigungswinkels α .

Im Folgenden verwenden wir den Steigungswinkel α , den man für die Kugelkappe aus Abschnitt 3.2 erhält. Durch diese Wahl lassen sich die Ergebnisse der Ellipsoidkappe besser mit den in Kapitel 3 ermittelten Resultaten vergleichen.

Für eine Kugelkappe erhält man für den Steigungswinkel α die Gleichung

$$\sin \alpha = \frac{r_{\text{Kappe}}}{R} = \frac{2Hr_{\text{Kappe}}}{H^2 + r_{\text{Kappe}}^2}$$

und somit für die Werte aus Tabelle 3.1

$$\alpha = 27.47^\circ \Rightarrow \delta = 34.62 \text{ nm} . \quad (4.3)$$

4.2 Schrödingergleichung in adiabatischer Näherung

Genau wie in Kapitel 3, ermitteln wir die Einteilchen-Zustände und Einteilchen-Energien, indem wir die zeitunabhängige Einteilchen-Schrödingergleichung in Envelope-Näherung lösen. Dabei werden wir wieder annehmen, dass sich die Elektronen und Löcher durch isotrope effektive Massen beschreiben lassen und berücksichtigen auch hier nur je ein Band für die Elektronen und Löcher.

Wenn ξ_α den α -ten Eigenzustand in Envelope-Näherung bezeichnet, so muss

$$\mathbf{H}\xi_\alpha = \varepsilon_\alpha \xi_\alpha \quad \text{mit} \quad \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \Delta + V_\lambda(\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

mit $\lambda \in \{e, h\}$ in dem durch $V_\lambda(\mathbf{r})$ gegebenen dreidimensionalen Einschlusspotential gelöst werden. Unter der Annahme eines für die Elektronen und Löcher jeweils konstanten Bandversatzes ΔE_λ erhält man für das Einschlusspotential:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & ; \quad \mathbf{r} \text{ innerhalb des Quantenpunktes und der Wettinglayer,} \\ V_\lambda^0 = \Delta E_\lambda & ; \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.5)$$

Aufgrund der fehlenden Rotationssymmetrie ist es an dieser Stelle jetzt nicht mehr möglich die Schrödingergleichung exakt auf eine effektive zweidimensionale Schrödingergleichung zurückzuführen. Für flache Quantenpunkte können wir aber die Dimension des Problems, genau wie in Abschnitt 3.2 für die Kugelkappe, mittels der adiabatischen Näherung um eins reduzieren. Somit können wir die dreidimensionale Schrödingergleichung zumindest näherungsweise auf eine zweidimensionale Schrödingergleichung abbilden. Da es sich für die rotationssymmetrischen Quantenpunkte gezeigt hat, dass die adiabatische Näherung für flache Quantenpunkte sehr gute Ergebnisse liefert, kann man davon ausgehen, dass man auch für die elliptischen Quantenpunkte unter Verwendung der adiabatischen Näherung sehr gute Resultate erhält. Motiviert durch diese Erkenntnis setzen wir $\xi(x, y, z)$ als Produkt $g_{xy}(z) \tilde{\xi}(x, y)$ an. Dabei nehmen wir an, dass $g_{xy}(z)$ nur „langsam“ mit (x, y) variiert, so dass man die partiellen Ableitungen von $g_{xy}(z)$ nach x und y vernachlässigen kann. Auf diese Weise gelangt man mittels Trennung der Variablen zu einem System gekoppelter Eigenwertgleichungen:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z) \right] g_{xy}(z) = E_0(x, y) g_{xy}(z) , \quad (4.6)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + E_0(x, y) \right] \tilde{\xi}(x, y) = E \tilde{\xi}(x, y) . \quad (4.7)$$

Dieses System kann man wie folgt lösen: Für festes (x, y) beschreibt Gleichung (4.6) das Problem eines Teilchens in einem endlich hohen Potentialkasten der Höhe $h_\delta(x, y)$. Dies lösen wir, wie in Anhang A erläutert, für jeden Punkt (x, y) . Nachdem auf diese Weise $E_0(x, y)$ bestimmt wurde, nutzen wir dies als das zweidimensionale Potential in der Schrödingergleichung (4.7). Die verbleibende Gleichung (4.7) lösen wir dann, wie im nächsten Abschnitt erläutert wird, durch Diskretisierung und anschließende Diagonalisierung auf einem Gitter.

Die Gültigkeit der adiabatischen Näherung kann man sich an dieser Stelle noch einmal plausibel machen: Für flache Quantenpunkte ändert sich die Höhe $h_\delta(x, y)$ nur langsam mit der Position (x, y) . Dies bedeutet, dass sich auch $E_0(x, y)$ und damit $g_{xy}(z)$ nur langsam mit (x, y) ändern. Man kann somit die Änderung von $g_{xy}(z)$ in x - y -Richtung im Vergleich zur Änderung von $\tilde{\xi}(x, y)$ in diesen Richtungen vernachlässigen.

4.3 Diagonalisierung auf einem Gitter

Nachdem die dreidimensionale Schrödingergleichung (4.4) im vorangegangenen Abschnitt für flache Quantenpunkte näherungsweise auf ein System einer eindimensionalen und einer zweidimensionalen Schrödingergleichung reduziert wurde, wird es in diesem Abschnitt um die Lösung der zweidimensionalen Schrödingergleichung durch Diagonalisierung auf einem Gitter gehen. (Die Lösung des eindimensionalen Problems erfolgt genau wie in Abschnitt 3.2.)

Die Lösung des Eigenwertproblems (4.7) erfolgt durch Diskretisierung auf einem Gitter unter Verwendung der symmetrischen Differenzenquotienten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\xi}(x_i, y_j) &\approx \frac{\tilde{\xi}(x_{i+1}, y_j) - 2\tilde{\xi}(x_i, y_j) + \tilde{\xi}(x_{i-1}, y_j)}{(\Delta x)^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} \tilde{\xi}(x_i, y_j) &\approx \frac{\tilde{\xi}(x_i, y_{j+1}) - 2\tilde{\xi}(x_i, y_j) + \tilde{\xi}(x_i, y_{j-1})}{(\Delta y)^2} .\end{aligned}\quad (4.8)$$

Dabei wurde angenommen, dass die Gitterpunkte auf einem äquidistanten Gitter im Abstand Δx in x -Richtung und Δy in y -Punkte liegen. Ein solches Gitter mit seinen Rändern zeigt Abbildung 4.3.

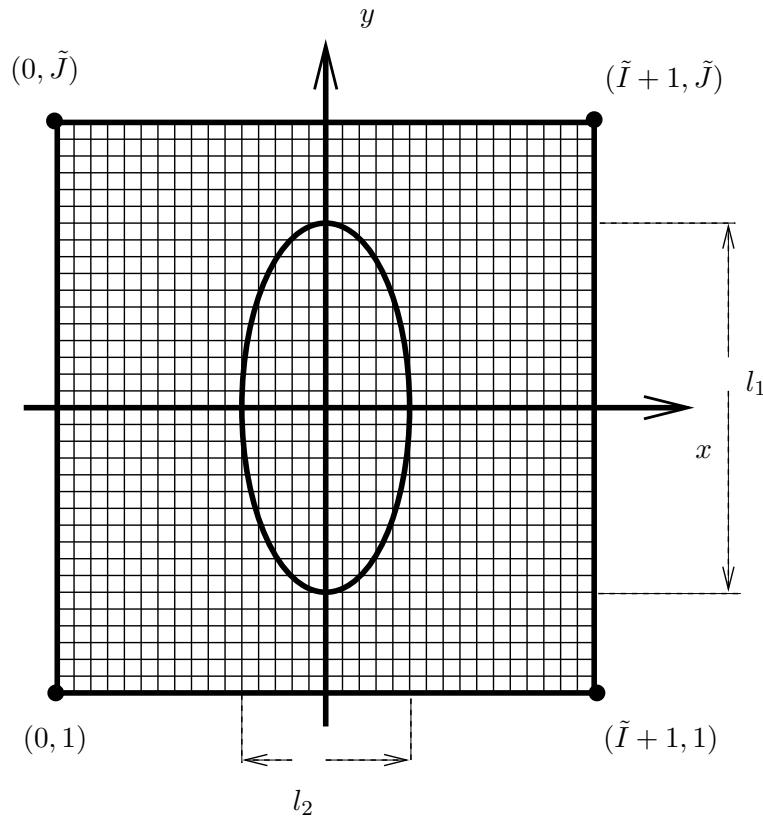


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung des Gitters, auf welchem die zweidimensionale Schrödingergleichung gelöst wird, zusammen mit dem Grundriss des elliptischen Quantenpunktes.

Führt man nun die naheliegende Abkürzung $\tilde{\xi}(x_i, y_i) = \tilde{\xi}_{i,j}$ ein, so lässt sich der negative zweidimensionale Laplace-Operator $-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$ im Inneren des Gitters näherungsweise als

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \tilde{\xi}_{i,j} \approx +a(\tilde{\xi}_{i-1,j} + \tilde{\xi}_{i+1,j}) - 2(a+b)\tilde{\xi}_{i,j} + b(\tilde{\xi}_{i,j-1} + \tilde{\xi}_{i,j+1}) \quad (4.9)$$

schreiben. Hierbei wurden die beiden Konstanten $a = -\frac{1}{(\Delta x)^2}$ und $b = -\frac{1}{(\Delta y)^2}$ eingeführt. Definiert man nun wieder in völliger Analogie zu Abschnitt 3.5 den Vektor Λ über seine Komponenten

$$\Lambda_n := \tilde{\xi}(\rho_{i(n)}, z_{j(n)}) \quad \text{mit} \quad j(n) = (n \bmod \tilde{J}) \quad \text{und} \quad i(n) = \frac{n - j(n)}{\tilde{J}} + 1 \quad (4.10)$$

mit der Umkehrung

$$\tilde{\xi}(\rho_i, z_j) = \Lambda_{\tilde{J}(i-1)+j} \quad , \quad (4.11)$$

so kann man Gleichung (4.9) als

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \Lambda_n \approx a(\Lambda_{n+\tilde{J}} + \Lambda_{n-\tilde{J}}) - 2(a+b)\Lambda_n + b(\Lambda_{n+1} + \Lambda_{n-1}) \quad (4.12)$$

schreiben. Im Gegensatz zur Diskretisierung in Abschnitt 3.5 hängen die Koeffizienten a und b im vorliegenden Fall nicht mehr von dem betrachteten Gitterpunkt ab, sondern sind überall konstant. Dieser Unterschied entsteht dadurch, dass wir in Kapitel 3.5 anstatt kartesischer Koordinaten Zylinderkoordinaten verwendet haben. Durch den Übergang von kartesischen Koordinaten zu Zylinderkoordinaten erhält der Laplace-Operator aber über die Jacobi-Matrix, welche bei der Transformation von dem einen zu dem anderen Koordinatensystem auftritt, eine zusätzliche Ortsabhängigkeit.

Die Unabhängigkeit der Koeffizienten a und b vom Ort hat zur Folge, dass die Matrix, welche den zweidimensionalen diskretisierten Laplace-Operator in kartesischen Koordinaten darstellt, symmetrisch ist. Somit lassen sich die schnellen, auf reelle symmetrische Matrizen spezialisierten Algorithmen verwenden.

Verwendet man nun Dirichlet'sche Randbedingungen in x -Richtung und periodische Randbedingungen in y -Richtung, so lässt sich die zweidimensionale Schrödingergleichung (4.7) wie folgt als Matrix-Eigenwertproblem schreiben:

$$\underline{\underline{\mathbf{H}}} \Lambda = \varepsilon \Lambda \quad (4.13)$$

mit der Matrix

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbf{H}}} = & \text{Diag}([\tilde{V}_{i(1)j(1)}, \tilde{V}_{i(2)j(2)}, \dots, \tilde{V}_{i(N)j(N)}]; 0, N) \\ & - \text{Diag}([2(a+b), \dots, 2(a+b)]; 0, N) \\ & + \text{Diag}([b, \dots, b]; +1, N) + \text{Diag}([b, \dots, b]; -1, N) \\ & + \text{Diag}([a, \dots, a]; -\tilde{J}, N) + \text{Diag}([a, \dots, a]; +\tilde{J}, N) \quad . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Dabei bezeichnet „Diag“ die in Abschnitt 3.5 definierten Diagonalmatrizen. $N = \tilde{I}\tilde{J}$ ist die Matrixdimension und alle Längen werden in Einheiten der Basislänge L gemessen. Dementsprechend sind die Terme $\tilde{V}_{i,j}$, die von dem Potentialterm der Schrödingergleichung stammen, als $\tilde{V}_{i,j} := \frac{2m_\lambda L^2}{\hbar^2} V(x_i, y_j)$ definiert. Der erste Summand in Gleichung (4.14) entspricht der

$$\underline{\underline{\mathbf{H}}} = \begin{bmatrix} \begin{array}{ccc|ccc} c_{1,1} & b & & & & \\ b & c_{1,2} & b & & & \\ & b & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & c_{1,\tilde{J}} & & \end{array} & \begin{array}{ccc|ccc} a & & & & & \\ & a & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \end{array} & & \\ \hline \begin{array}{ccc|ccc} a & & & & & \\ & a & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \end{array} & \begin{array}{ccc|ccc} c_{2,1} & & & & & \\ & c_{2,2} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & c_{2,\tilde{J}} & & \end{array} & \begin{array}{ccc|ccc} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \end{array} & \\ \hline & & & \begin{array}{ccc|ccc} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \end{array} & \begin{array}{ccc|ccc} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \end{array} & \begin{array}{ccc|ccc} & & & & a & \\ & & & & & a \end{array} \\ \hline & & & & & \begin{array}{ccc|ccc} & & & & c_{\tilde{I},1} & \\ & & & & \ddots & c_{\tilde{I},2} & b \\ & & & & & b & \ddots & b \\ & & & & & & b & c_{\tilde{I},\tilde{J}} \end{array} \end{bmatrix}$$

Abbildung 4.4: Explizite Darstellung der Matrix (4.14), die dem diskretisierten Hamiltonoperator (4.7) in kartesischen Koordinaten entspricht. Zur Abkürzung wurden die Elemente $c_{i,j} := \tilde{V}_{i,j} - 2(a+b)$ eingeführt.

Diskretisierung des Potentialterms und die übrigen 5 Summanden stammen von der Diskretisierung des Laplace-Operators. Die explizite Darstellung der Matrix kann man Abbildung 4.4 entnehmen.

Bei der Verwendung Dirichlet'scher Randbedingungen in x -Richtung müssen nur die Funktionswerte für die Punkte mit $i = 1..\tilde{I}^{23}$ und $j = 1..\tilde{J}$ berechnet werden, da die Wellenfunktion auf dem rechten und linken Rand durch die Randbedingungen festgelegt ist. Dass die in Abbildung 4.4 dargestellte Matrix tatsächlich der Verwendung Dirichlet'scher Randbedingungen in x -Richtung entspricht, erkennt man daran, dass die ersten \tilde{J} und die letzten \tilde{J} Elemente des Vektors $\mathbf{\Lambda}$ – im Gegensatz zu allen anderen Elementen – nur mit einem Element der $\pm\tilde{J}$ -Nebendiagonalen verknüpft werden. Es sind aber gerade die $\pm\tilde{J}$ -ten Nebendiagonalen, die eine Verknüpfung mit den nächsten Nachbarn in x -Richtung herstellen und es sind die ersten und die letzten \tilde{J} Elemente des Vektors $\mathbf{\Lambda}$, die einen der x -Ränder als Nachbarn haben. Das Ausbleiben der Verknüpfung mit dem x -Rand ist gleichbedeutend damit, dass man die Wellenfunktion auf diesem Rand Null setzt.

²³Durch die Randbedingungen starten die Indices der effektiv zu berechnenden Elemente beide bei 1, so dass die anfängliche Asymmetrie in der Zählweise der Gitterpunkte (vgl. Abbildung 4.3) nun nicht mehr vorhanden ist.

In y -Richtung wurden in folgendem Sinne periodische Randbedingungen verwendet: Falls ein Punkt auf einem der zwei y -Ränder des Gitters liegt, so verknüpft die Matrix (4.14) diesen Punkt sowohl mit den beiden direkten Nachbarn in x -Richtung und dem direkten Nachbarn in y -Richtung als auch mit einem Punkt auf dem gegenüberliegenden y -Rand. Im Prinzip könnte man natürlich auch in y -Richtung Dirichlet'sche Randbedingungen wählen. Dadurch würde aber die sehr einfache Struktur der Matrix (4.14) etwas komplizierter werden. Wenn man aber die x - und y -Ränder so weit außen wählt, dass die Wellenfunktion eines gebundenen Zustandes dort bereits abgeklungen ist, gibt es praktisch keinen Unterschied zwischen periodischen und Dirichlet'schen Randbedingungen, so dass wir die periodischen Randbedingungen in y -Richtung weiter beibehalten.

Da das Einschlusspotential der elliptischen Quantenpunkte die Symmetrie

$$V_\lambda(\pm x, \pm y, z) = V_\lambda(x, y, z) \quad (4.15)$$

besitzt, könnte man die Eigenzustände im Prinzip nach ihrer Parität in x - und y -Richtung klassifizieren und damit das Gebiet des Gitters, auf welchem die Hamilton'sche Matrix diagonalisiert werden muss, auf einen der vier Quadranten einschränken. Bei einer solchen Verkleinerung müsste man dann je nach der Parität des gesuchten Zustandes entlang der x - und y -Achse entweder Dirichlet'sche oder Neumann'sche Randbedingungen verwenden. Da auch in diesem Fall der zusätzliche Aufwand größer als der zu erwartende Gewinn ist, diagonalisieren wir im Folgenden auf dem vollen aus vier Quadranten bestehenden Gitter.

4.4 Ergebnisse und Diskussion

Nachdem in den vorangegangenen Abschnitten die nötige Theorie zusammengestellt wurde, präsentieren wir in diesem Abschnitt die Ergebnisse. Wir werden die Wellenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ für verschieden starke Abweichung von der Zylindersymmetrie diskutieren und mit denen eines zweidimensionalen, anisotropen harmonischen Oszillators vergleichen. Ebenso wird das Energiespektrum mit dem eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators verglichen.

Um unsere neu entwickelten Programme zu testen und um ein System zu haben mit dem man die Ergebnisse der elliptischen Quantenpunkte vergleichen kann, haben wir zunächst das Energiespektrum und die Eigenfunktionen für den in Kapitel 3 verwendeten zylindersymmetrischen Quantenpunkt ermittelt. In diesem Fall ist also $l_1 = l_2 = r_{\text{Kappe}}$. Wählt man ein äquidistantes Gitter mit $\Delta x = \Delta y = 0.5 \text{ nm}$ und die x - und y -Ränder bei $x = \pm 2.5l_1$ und $y = \pm 2.5l_2$, so sind die Abweichungen zwischen den hier und den in Kapitel 3 ermittelten Eigenwerten deutlich unter einem Prozent.

Die ersten 16 der zugehörigen Wellenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ sind in Abbildung 4.5 dargestellt. Auch hier ist es wieder möglich die Wellenfunktionen direkt zu plotten, da die Eigenvektoren bedingt durch die Symmetrie der Hamilton'schen Matrix reell sind. Die dargestellten Eigenfunktionen sind allerdings im Gegensatz zu den in Kapitel 3 bestimmten Wellenfunktionen keine Eigenfunktionen der z -Komponente des Drehimpulsoperators. Sie sind vielmehr Linearkombinationen dieser, da sie ansonsten auch nicht reell wären. Um die „blumenstraussartige“ Symmetrie der Wellenfunktionen zu verstehen, kann man die folgende Linearkombination der energetisch entarteten Zustände $\tilde{\xi}_{m,N_r}(\rho, \varphi)$ und $\tilde{\xi}_{-m,N_r}(\rho, \varphi)$ betrachten:

$$\begin{aligned} & \xi_{m,N_r}(\rho, \varphi) \pm \xi_{-m,N_r}(\rho, \varphi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(f_{m,N_r}(\rho) e^{im\varphi} \pm f_{-m,N_r}(\rho) e^{-im\varphi} \right) \propto f_{m,N_r}(\rho) \cdot \begin{cases} \sin(m\varphi) \\ \cos(m\varphi) \end{cases}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

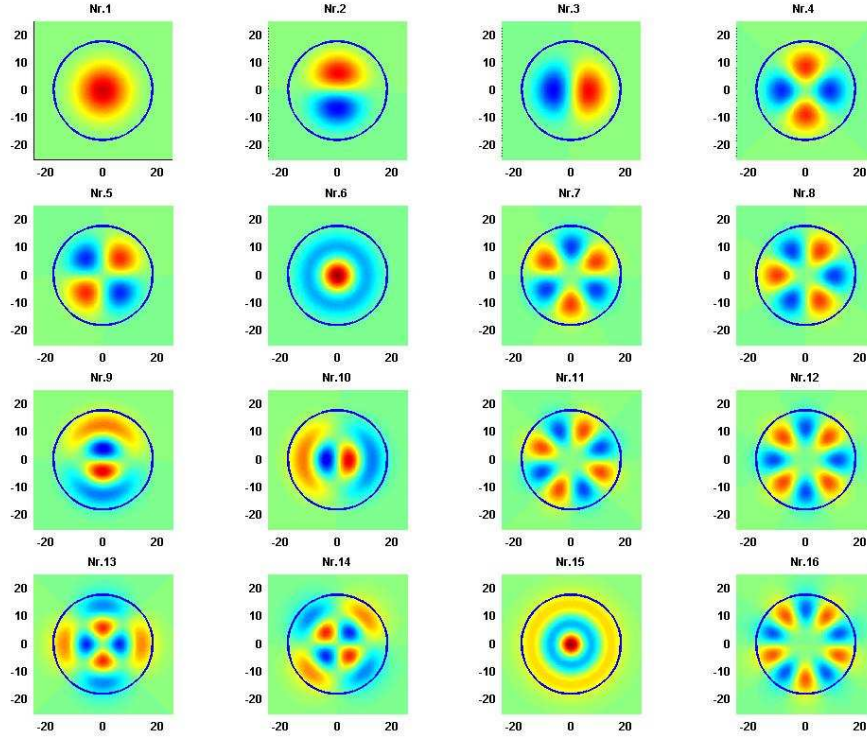


Abbildung 4.5: Die ersten 16 Eigenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ des Quantenpunktes A gegen x und y aufgetragen. Der Funktionswert ist durch die Farbe angedeutet. Die Farbskala interpoliert zwischen blau für die negativen Werte und rot für die positiven Werte. Die Quantenpunktparameter entsprechen denen aus Kapitel 3. Zusätzlich zu den Wellenfunktionen ist der Grundriss des Quantenpunktes blau eingezeichnet. ($\Delta x = \Delta y = 0.5$ nm.)

Hierbei wurde ausgenutzt, dass die radialen Wellenfunktionen $f_{m,N_r}(\rho)$ nur vom Betrag der Drehimpulsquantenzahl m abhängen. Bei fester Drehimpulsquantenzahl zerlegen die trigonometrische Funktionen die x - y -Ebene in die $2m$ Sektoren, deren Grenzen durch $\sin(m\varphi) = 0$ bzw. $\cos(m\varphi) = 0$ gegeben sind. Ist die Funktion in einer der Sektoren bekannt, kann man daraus die Wellenfunktion in den restlichen Sektoren konstruieren. Die Eigenzustände zu gleicher Energie gehen durch Rotation um $\pm \frac{\pi}{2m}$ auseinander hervor.

Genau wie im Falle der Transfermatrixmethode hat man bei der hier verwendeten Diagonalisierungsmethode, bedingt durch die Verwendung der adiabatischen Näherung, wieder einen maximalen Potentialwert V_{\max} oberhalb dessen man keine gebundenen Zustände erhalten kann. Bei der Diagonalisierung in Kapitel 3, die ohne adiabatische Näherung auskam, hatten wir im Vergleich zur Transfermatrixmethode zwei weitere gebundene Zustände knapp oberhalb von V_{\max} gefunden. Einer dieser Zustände, nämlich der zum Drehimpuls $|m| = 5$, rutscht in dem hier gewählten Zugang unterhalb von V_{\max} und ist damit trotz adiabatischer Näherung gebunden. Wahrscheinlich ist dies allerdings ein numerischer Artefakt: Verfeinert man nämlich das Gitter, welches zur Diagonalisierung verwendet wird, so vergrößert sich der entsprechende Eigenwert. Würde man den Abstand auf dem Gitter ähnlich eng wie die Stützstellen für die Transfermatrixmethode wählen, so kann man erwarten, dass der Energiewert schließlich größer als V_{\max} wird. Damit würden dann die beiden Methoden, die die adiabatische Näherung verwenden, die gleiche Anzahl an gebundenen Zuständen liefern.

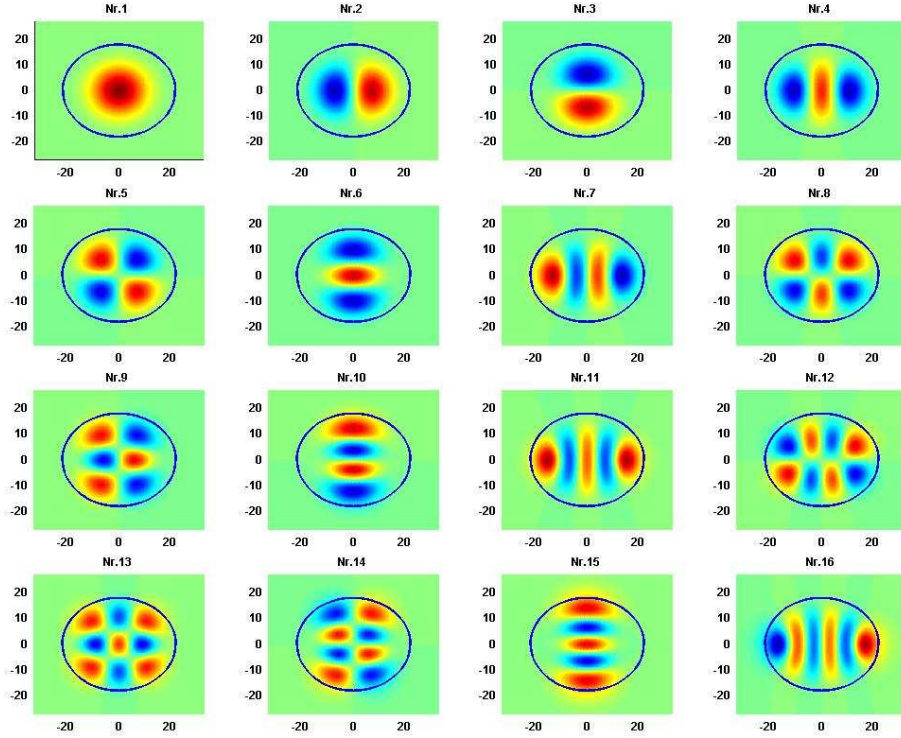


Abbildung 4.6: Die ersten 16 Eigenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ des Quantenpunktes B gegen x und y aufgetragen. Der Funktionswert ist durch die Farbe angedeutet. Die Farbskala interpoliert zwischen blau für die negativen Werte und rot für die positiven Werte. Zusätzlich zu den Wellenfunktionen ist der Grundriss des Quantenpunktes blau eingezeichnet.

Kommen wir nun zu den elliptischen Quantenpunkten. In Abbildung 4.6 sind die ersten 16 der insgesamt 21 gebundenen Zustände des Quantenpunktes B aufgetragen. Die verwendeten Parameter sind in Tabelle 4.1 auf Seite 103 zusammengestellt. Offensichtlich ist die Symmetrie der Wellenfunktionen des elliptischen Quantenpunktes – wie erwartet – nicht mehr ganz so hoch wie im Fall des zylindersymmetrischen Quantenpunktes. Die Eigenzustände sind allerdings immer noch Paritätseigenzustände bezüglich der x - und y -Achse. Man kann die Eigenfunktionen nach der Anzahl der Extrema oder der Anzahl der Nullstellen n_x in x - und n_y in y -Richtung klassifizieren. So kann man z.B. Zustand Nummer 9 durch $(n_x = 1, n_y = 2)$ und Zustand Nummer 10 durch $(n_x = 0, n_y = 3)$ beschreiben.

Vergrößert man nun die „Elliptizität“ des Quantenpunktes ein wenig, indem man die erste Halbachse der Grundrissellipse vergrößert, so erhält man die in Abbildung 4.7 dargestellten Zustände. Im Vergleich mit Abbildung 4.6 erkennt man, dass sich die ersten 9 Zustände qualitativ sehr ähnlich sind und dass es erst ab dem 10. Zustand zu Abweichungen in der Klassifikation kommt.

Durch eine weitere Erhöhung des Wertes l_1 erhält man Abbildung 4.8. Auch hier stimmt die qualitative Struktur der ersten Zustände mit der der Quantenpunkte B und C überein. Allerdings kommt es in diesem Fall bereits ab dem 6. Zustand und nicht erst nach dem 9. Zustand zu qualitativen Abweichungen.

Sowohl die Veränderung der Klassifikation mit zunehmender Deformation als auch die Zunahme der Anzahl an gebundenen Zuständen (vgl. Tabelle 4.1) ist bereits aufgrund des folgenden

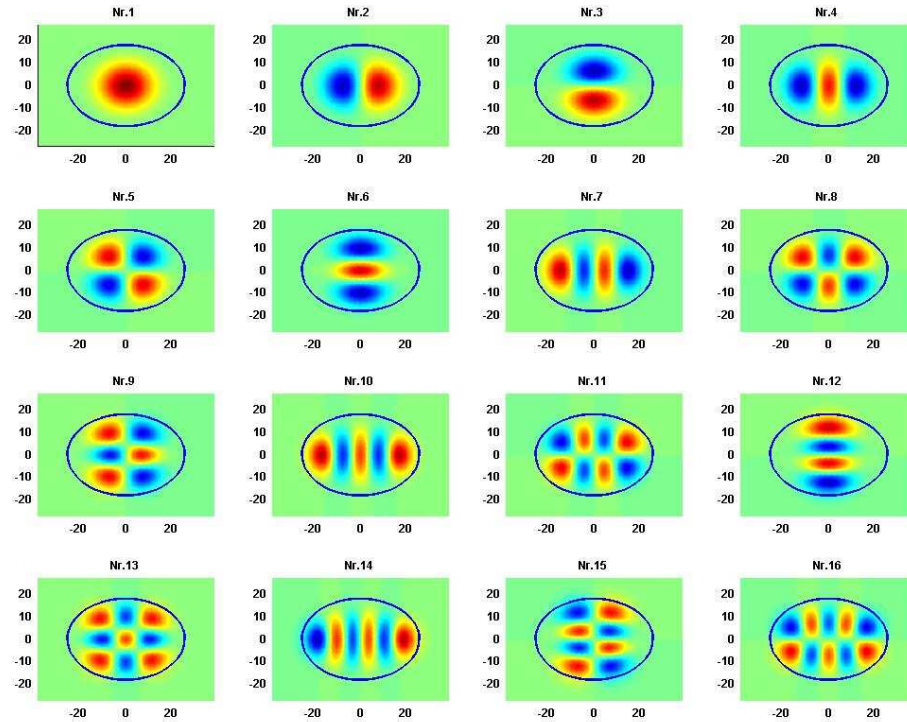


Abbildung 4.7: Die ersten 16 Eigenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ des Quantenpunktes C gegen x und y aufgetragen. Der Funktionswert ist durch die Farbe angedeutet. Zusätzlich zu den Wellenfunktionen ist der Grundriss des Quantenpunktes blau eingezeichnet.

qualitativen Arguments zu erwarten: Das effektive Potential $E_0(x, y)$ interpoliert stets zwischen $\tilde{E}_0(H + z_0)$, der Energie eines Teilchens im endlichen Potentialkasten der Breite $H + z_0$, und $\tilde{E}_0(z_0)$, der entsprechenden Energie bei einer Breite z_0 . Vergrößert man nun die Ausdehnung in einer Richtung, sagen wir in x -Richtung, so wird der Potentialverlauf in dieser Richtung flacher. Wenn man annimmt, dass man das Potential durch das eines anisotropen harmonischen Oszillators modellieren kann, so folgt daraus $\hbar\omega_x < \hbar\omega_y$. Wenn man weiterhin annimmt, dass sich die Energie $\hbar\omega_y$ durch die Deformation nicht oder nur wenig ändert, kann dies erklären, warum die Anzahl der gebundenen Zustände mit zunehmender Deformation des Quantenpunktes zunimmt. Auch die Änderung der Klassifikation ist in dem Modell einfach zu erklären. Durch Veränderung von $\hbar\omega_x$ bei festem $\hbar\omega_y$ werden die niedrigsten Energien von $E = n_x \hbar\omega_x + n_y \hbar\omega_y + E^*$ durch andere Paare von n_x und n_y erzeugt. Zu einer Abweichung in der Klassifikation der niedrigsten Eigenzustände zweier anisotroper harmonischer Oszillatoren kommt es dabei natürlich um so eher, je stärker die beiden Energien $\hbar\omega_x$ und $\hbar\omega'_x$ bzw. die beiden Deformationen der Quantenpunkte in x -Richtung voneinander abweichen.

Die Annahme eines anisotropen harmonischen Oszillators kann sowohl qualitativ die Änderungen der Anzahl an gebundenen Zuständen mit zunehmender Deformation als auch die Struktur der einzelnen Wellenfunktionen klären. Diese qualitative Übereinstimmung kann man allerdings auch unter Verwendung eines Kastenpotentials mit veränderlichen Kantenlängen erhalten. Da allerdings die Form des Potentials $E_0(x, y)$ eher dem eines Paraboloids als dem eines Kastens entspricht und da sich die Quantenpunktzustände bei verschwindender Deformation sehr gut durch die Wellenfunktionen eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators beschreiben lassen (vgl. Kapitel 3), liegt es nahe die Wellenfunktionen und das Energiespek-

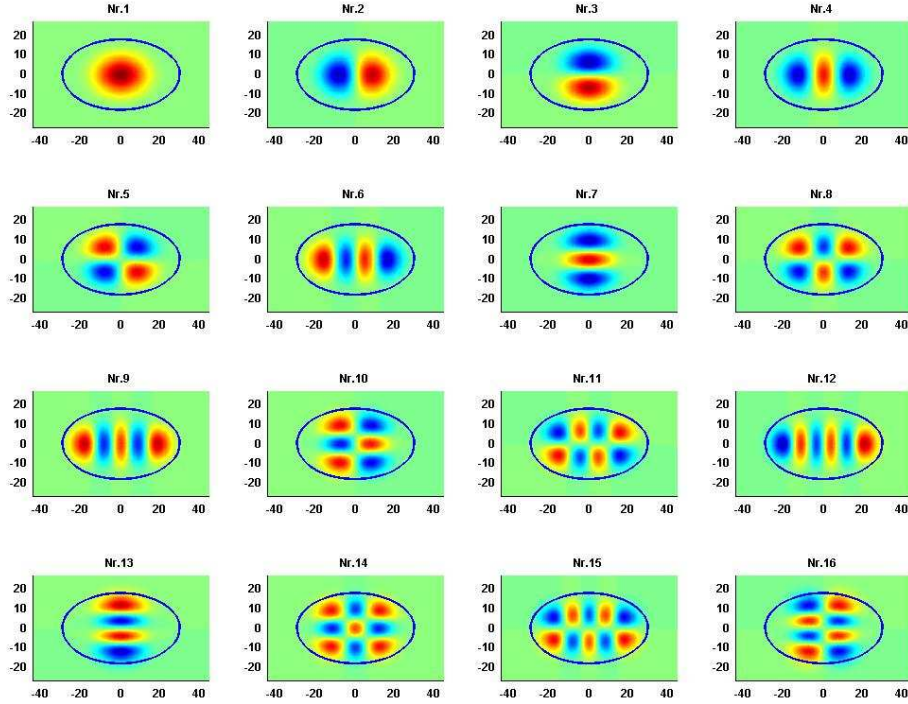


Abbildung 4.8: Die ersten 16 Eigenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ des Quantenpunktes D gegen x und y aufgetragen. Der Funktionswert ist durch die Farbe angedeutet.

trum mit denen eines harmonischen Oszillators zu vergleichen. Zu diesem Zweck wurden die Energien $\hbar\omega_x$ und $\hbar\omega_y$ durch anpassen des Quantenpunkt-Spektrums an

$$E_{n_x, n_y} = n_x \hbar\omega_x + n_y \hbar\omega_y + E^* \quad (4.17)$$

ermittelt. Die Werte n_x und n_y entsprechen dabei den Werten, die sich aus der Anzahl der Nullstellen in x - und y -Richtung ergeben. Auf diese Weise erhält man für die vier untersuchten Quantenpunkte die in Tabelle 4.1 zusammengestellten Energien $\hbar\omega_x$ und $\hbar\omega_y$. Genau genommen ist es für den zylindersymmetrischen Quantenpunkt A nicht möglich die einzelnen Eigenzustände nach n_x und n_y zu klassifizieren, so dass man hier auch die Energien $\hbar\omega_x$ und $\hbar\omega_y$ nicht unter Verwendung von Gleichung (4.17) ermitteln kann. In diesem Fall wurde die Entartung der beiden Oszillatorenergien vorausgesetzt und die Oszillatorenergie aus Abschnitt 3.4 übernommen.

In Abbildung 4.9 sind die Energien des Quantenpunktes C und die Energien eines angepassten anisotropen Oszillators dargestellt. Verglichen wurden dabei die Energien von Zuständen des Quantenpunktes mit denen des harmonischen Oszillators gleicher Klassifikation (n_x, n_y) . Man erkennt eine gute Übereinstimmung der beiden Spektren. (Die mittlere Abweichung liegt bei etwa 2 meV. Zur größten Abweichung kommt es mit ca. 7 meV beim Grundzustand.) An zwei Stellen weist ein Zustand des angepassten Oszillators eine niedrigere Energie als sein Vorgänger auf. An diesen beiden Stellen kommt es dann zu einer Abweichung der Klassifikation, wenn man die Wellenfunktionen der jeweils nach der Energie sortierten Eigenzustände des harmonischen Oszillators und des Quantenpunktes miteinander vergleicht.

Betrachtet man die Werte in Tabelle 4.1, so fällt auf, dass sich die Energien $\hbar\omega_x$ deutlich ändern, die Energien $\hbar\omega_y$ aber nahezu konstant bleiben. Die größte Abweichung in $\hbar\omega_y$ bildet der

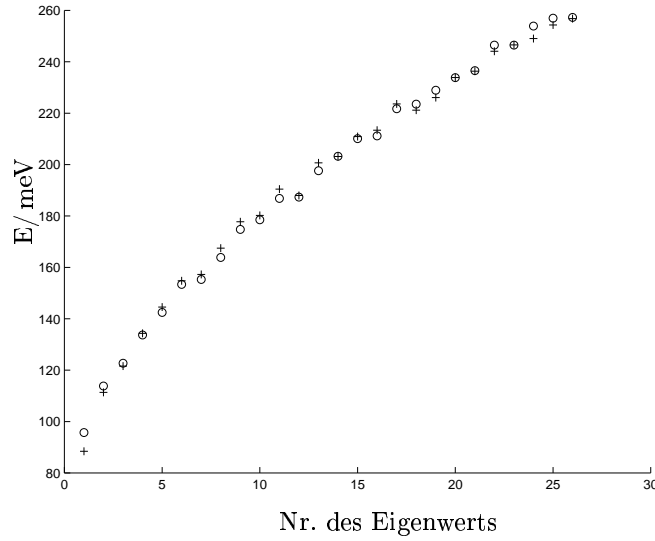


Abbildung 4.9: Energiespektrum des Quantenpunktes C (Kreise) aufgetragen über der Nummer des Eigenwerts und der entsprechende Energiewert eines angepassten harmonischen Oszillators (Kreuze).

Übergang von Quantenpunkt A zu Quantenpunkt B. Dies ist aber eher darauf zurückzuführen, dass man in diesen beiden Fällen die Oszillatorenergien auf verschiedenen Wegen bestimmen musste und nicht auf die Deformation des Quantenpunktes.

Möchte man eine Voraussage über das Verhältnis der beiden Oszillatorenergien als Funktion der Längen der beiden Halbachsen machen, so liegt folgendes qualitative Argument nahe: Da die Oszillatorlänge eines harmonischen Oszillators ein Maß für die Ausdehnung der Wellenfunktion darstellt und die gebundenen Zustände innerhalb des Quantenpunktes lokalisiert sind, ist es plausibel von $l_k^x \sim l_1$ und $l_k^y \sim l_2$ auszugehen. (l_k^x und l_k^y bezeichnen die Oszillatorlängen in x - bzw. y -Richtung.) Aus dieser Abschätzung ergibt sich dann für das Verhältnis der Oszil-

Quantenpunkt	l_1/nm	l_2/nm	l_2/l_1	$\hbar\omega_x/\text{meV}$	$\hbar\omega_y/\text{meV}$	ω_x/ω_y	geb. Zust.
A ²⁴	18	18	1.00	32.44	32.44	1.00	17
B	22	18	0.82	27.02	33.05	0.82	22
C	26	18	0.69	22.95	33.18	0.69	26
D	30	18	0.60	19.89	33.14	0.60	29

Tabelle 4.1: Parameter und Ergebnisse für 4 verschiedene Quantenpunkte: l_1 und l_2 sind die Halbachsen der Grundrissellipsen. $\hbar\omega_x$ und $\hbar\omega_y$ sind die angepassten Energien eines anisotropen harmonischen Oszillators. In der letzten Spalte ist die jeweilige Anzahl an gebundenen Zuständen aufgeführt. Die weiteren Quantenpunktparameter sind: $m_e = 0.067 m_0$, $H = 4.4\text{ nm}$, $z_0 = 1.6\text{ nm}$ und $\delta = 34.62\text{ nm}$. Alle Rechnungen wurden auf Gittern mit $\Delta x = \Delta y = 0.5\text{ nm}$, $x_{\max} = 2.5l_1$ und $y_{\max} = 2.5l_2$ durchgeführt.

²⁴Für den zylindersymmetrischen Quantenpunkt können die Energien $\hbar\omega_x$ und $\hbar\omega_y$ nicht durch Anpassen an Gleichung (4.17) gewonnen werden (vgl. Text).

latorenergien $\hbar\omega_x/\hbar\omega_y \sim (l_2/l_1)^2$. Vergleicht man dies mit den Ergebnissen aus Tabelle 4.1, so zeigt sich, dass diese Erwartung, die auch [25] verwendet, nicht bestätigt wird. Eine Erklärung dafür, dass die Gleichung $\hbar\omega_x/\hbar\omega_y = l_2/l_1$ für die hier betrachteten Quantenpunkte mit solch hoher Präzision (Abweichungen treten erst in der dritten Nachkommastelle auf) erfüllt sind, ist uns nicht bekannt.

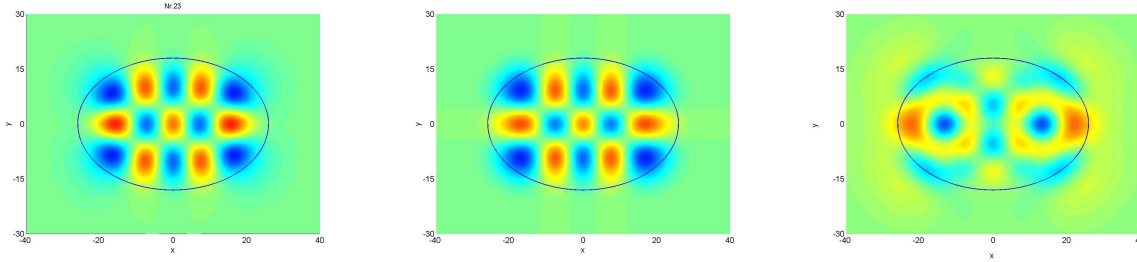


Abbildung 4.10: Wellenfunktion des 23. Eigenzustandes des Quantenpunktes C (links), Wellenfunktion eines zweidimensionalen Oszillators mit angepassten Frequenzen ω_x und ω_y (mitte) und dreifache Differenz der beiden Funktionen (rechts). In allen Bildern wurde zum besseren Vergleich dieselbe Farbskala verwendet.

In Abbildung 4.10 ist die Wellenfunktion des 23. Eigenzustandes des Quantenpunktes C zusammen mit der Wellenfunktion eines zweidimensionalen Oszillators eingetragen. Der Oszillatorzustand wurde so ausgewählt, dass die beiden Zustände in der Anzahl der Knoten in x - und y -Richtung übereinstimmen. Die angepassten Frequenzen ω_x und ω_y wurden Tabelle 4.1 entnommen. Im direkten Vergleich kann man kaum einen Unterschied der beiden Wellenfunktionen erkennen. Wenn man in allen drei Teilabbildungen dieselbe Farbskala verwendet, muss man die Differenz der beiden Wellenfunktionen mit einem Faktor 3 multiplizieren, um die Struktur der Abweichungen deutlich zu erkennen.

Als quantitatives Mass für die Abweichungen der beiden Wellenfunktionen dient die Norm der Differenz der Wellenfunktionen $||\tilde{\xi}_{\text{QP}}(x, y) - \tilde{\xi}_{\text{HO}}(x, y)||$. Der Wert dieser Norm liegt zwischen 0, für identische Wellenfunktionen, und $\sqrt{2}$, für Wellenfunktionen, die in gänzlich verschiedenen Bereichen lokalisiert sind. Für die in Abbildung 4.10 eingetragenen Wellenfunktionen ergibt sich ein Wert von 0.25, der zeigt dass die Abweichungen der Wellenfunktionen nicht allzu groß sind. Berechnet man die Norm der Differenz für einen Eigenzustand niedrigerer Energie, z.B. für den Zustand Nr. 6 des Quantenpunktes C, so erhält man einen Wert von nur 0.11. Dass die Abweichungen zwischen den Zuständen des harmonischen Oszillators und denen des Quantenpunktes zunehmen, wenn man höhere Eigenenergien betrachtet und damit dem maximalen Potentialwert V_{max} näher kommt, ist uns bereits von der Diskussion der radialen Wellenfunktionen aus Abschnitt 3.4 bekannt.

Zusammengefasst lässt sich feststellen, dass man auch im Falle eines elliptischen Quantenpunktes sowohl die Wellenfunktionen $\tilde{\xi}(x, y)$ als auch die Energiespektren gut durch die harmonischer Oszillatoren wiedergeben kann.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In Kapitel 1 wurden die theoretischen Grundlagen zur Berechnung der Energiespektren und optischen Spektren wechselwirkender Vielteilchensysteme zusammengestellt. Insbesondere wurde das Verfahren der exakten Diagonalisierung erläutert.

Kapitel 2 befasste sich mit der Berechnung der Spektren von Quantenpunkten unter Annahme eines harmonischen Einschlusspotentials. Zur Vereinfachung wurden hier nur die drei niedrigsten Einteilchen-Zustände berücksichtigt. In einer anschließenden Arbeit könnte dies, nun da die Grundlagen gelegt sind, auf mehr als drei Zustände ausgedehnt werden. Durch die Einbeziehung zusätzlicher Zustände werden die Absorptions- und Emissionslinien der energetisch tieferliegenden Zustände zusätzlich renormiert werden und neue hochenergetische Linien hinzukommen. Zusätzlich sind auch qualitative Veränderungen wie das Aufspalten der p-Exzitonenlinie zu erwarten [17].

In Kapitel 3 wurden die Einteilchen-Zustände der Elektronen und Löcher im Rahmen der Effektivmassennäherung für einen zylindersymmetrischen Quantenpunkt auf zwei Arten berechnet. Zum einen in adiabatischer Näherung unter Verwendung einer Transfermatrixmethode, zum anderen durch Diagonalisierung auf einem Gitter. Die auf diese Weise ermittelten radialen Wellenfunktionen stimmen sehr gut mit denen eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators, wie er in Kapitel 2 verwendet wurde, überein. Als nächsten Schritt, der den Rahmen dieser Diplomarbeit gesprengt hätte, könnte man nun die Coulomb-Matrixelemente – z.B. mittels einer Fast-Fourier-Methode [29] – für die hier berechneten Wellenfunktionen ermitteln. Damit könnte man dann wieder die optischen Spektren berechnen und untersuchen, wie stark diese von denen des in Kapitel 2 vorgestellten Modell-Systems abweichen. Obgleich natürlich quantitative Abweichungen zu erwarten sind, da die Form der Wellenfunktion in z -Richtung in einer realistischen Quantenpunktstruktur sehr wohl auch von der radialen Koordinate abhängt und dies in Kapitel 2 vernachlässigt wurde, kann man dennoch hoffen, dass diese Abweichungen klein sind. Eine Arbeit, die die Vielteilchen-Spektren ausgehend von realistischen Wellenfunktionen, wie sie in Kapitel 3 ermittelt wurden, berechnet, ist uns nicht bekannt. Neben der oben angedeuteten Weiterführung der bereits entwickelten Methoden wäre ein Vergleich der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse mit den Resultaten eines Tight-Binding-Zugangs interessant.

Motiviert durch die gute Übereinstimmung der Ergebnisse der adiabatischen Näherung und der Diagonalisierung auf einem Gitter in Kapitel 3, wurden in Kapitel 4 die Eigenzustände für einen elliptischen Quantenpunkt durch Kombination der beiden Methoden untersucht und mit denen eines anisotropen harmonischen Oszillators verglichen. Bedingt durch die geringere Symmetrie der elliptischen Quantenpunkte wurde die Kombination der beiden Methoden notwendig, um den Rechenaufwand auf einem akzeptablen Niveau zu halten. Eine entsprechende Untersuchung des vorgestellten Systems ist uns aus der Literatur nicht bekannt. Insgesamt beschäftigen sich nur vergleichsweise wenige Artikel mit den Eigenschaften elliptischer Quantenpunkte, obwohl viele der experimentell untersuchten Quantenpunkte eine Abweichung von der Zylindersymmetrie nahe legen. In einer weiterführenden Arbeit könnte man nun mit den hier berechneten Einteilchen-Wellenfunktionen wiederum optische Spektren ermitteln. Hier wäre es besonders interessant zu studieren, wie sich die Spektren mit zunehmender Deformation verändern. Neben einer Verschiebung der von den zylindersymmetrischen Quantenpunkten bekannten Linien ist das Auftreten neuer Linien bedingt durch die verringerte Symmetrie zu erwarten: Zum einen gilt die in Kapitel 2.3 hergeleitete „Auswahlregel“ nicht mehr, so dass nun durch die Coulomb-Wechselwirkung eine Kopplung zwischen zuvor nicht gekoppelten Zuständen auf-

tritt, zum anderen werden weitere Dipol-Matrixelemente, die zuvor aufgrund der Symmetrie identisch Null waren, hinzukommen. Zur Ermittlung der benötigten Coulomb-Matrixelemente würde sich auch hier wieder die oben erwähnte Fast-Fourier-Methode anbieten.

Zusätzlich zu den bereits beschriebenen möglichen Fortführungen dieser Arbeit, könnte man versuchen die Streu- und Relaxationsprozesse unter Verwendung der in Kapitel 3 ermittelten Wellenfunktionen zu studieren. Diese Prozesse sind z.B. für das Verständnis der Einfangprozesse der Ladungsträger aus der Benetzungsschicht in den Quantenpunkt wichtig. Weiterhin wäre ein Vergleich von theoretisch ermittelten Spektren mit experimentellen Ergebnissen interessant.

Anhang

A Endlicher Potentialkasten

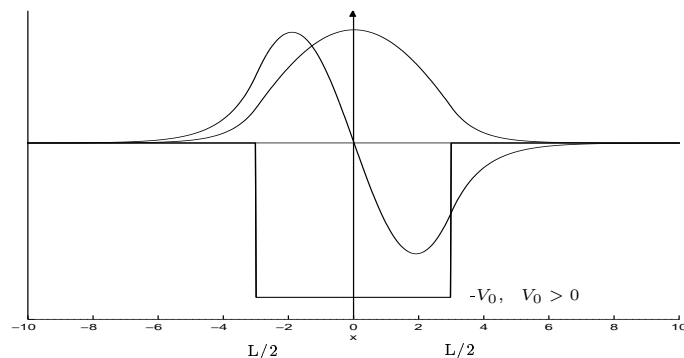


Abbildung A.1: Endlicher Potentialkasten mit den beiden gebundenen Zuständen niedrigster Energie.

Für einen endlich hohen Potentialkasten wie er in Abbildung A.1 dargestellt ist, wird die eindimensionale Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

für die gebundenen Zustände, d.h. für $E < 0$, durch

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\kappa x} + B_1 e^{-\kappa x} & , x < -\frac{L}{2} \\ A_2 \sin(kx) + B_2 \cos(kx) & , x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}] \\ A_3 e^{\kappa x} + B_3 e^{-\kappa x} & , x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

gelöst. Dabei ist κ durch $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$ und k durch $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|V_0 + E|}$ gegeben.

Aus der Forderung der Normierbarkeit der Gesamtwellenfunktion folgt sofort: $B_1 = 0$ und $A_3 = 0$. Somit verbleiben also 5 Unbekannte, nämlich A_1, A_2, B_2, B_3 und E . Und es verbleiben 5 Bedingungen, nämlich die stetige Differenzierbarkeit der Gesamtwellenfunktion bei $\pm \frac{L}{2}$ (4 Bedingungen) und die Normierbarkeit. Da die Forderung nach der Normierbarkeit die Wellenfunktion nur bis auf eine komplexe Phase $e^{i\theta}$ festlegt, kann diese Phasenfreiheit dazu genutzt werden die Wellenfunktion reell zu wählen.

Aus der Symmetrie des Potentials:

$$V(-x) = V(x)$$

folgt, wenn P den Paritätsoperator bezeichnet, sofort

$$[\mathbf{H}, P] = 0 \quad .$$

Somit kann man gemeinsame Eigenfunktionen von \mathbf{H} und P wählen. Anders ausgedrückt kann man die Zustände nach ihrer Parität als gerade oder ungerade klassifizieren:

$$\psi_g(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & , x < -\frac{L}{2} \\ B \cos(kx) & , x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}] \\ Ae^{-\kappa x} & , x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \psi_u(x) = \begin{cases} -Ae^{\kappa x} & , x < -\frac{L}{2} \\ B \sin(kx) & , x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}] \\ Ae^{-\kappa x} & , x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad .$$

Unter Verwendung der Symmetrie des Potentials kann auf diese Weise die Zahl der Unbekannten von 5 auf 3 (A,B,E) reduziert werden. Man hat jetzt aber auch nur noch 3 Bedingungen, da die stetige Differenzierbarkeit an $\pm \frac{L}{2}$ für die Paritätseigenzustände dieselben Bedingungen liefert. Da wir nur an dem Grundzustand interessiert sind, können wir uns im Weiteren auf $\psi_g(x)$ beschränken, da der Grundzustand eines klapp-symmetrischen Potentials stets gerade ist.²⁵

Die Forderung nach stetiger Differenzierbarkeit bei $\frac{L}{2}$ liefert für $\psi_g(x)$:

$$\begin{aligned} Ae^{-\kappa \frac{L}{2}} &= B \cos\left(k \frac{L}{2}\right) \\ -A\kappa e^{-\kappa \frac{L}{2}} &= -Bk \sin\left(k \frac{L}{2}\right) \end{aligned}$$

und somit erhält man für die Energieeigenwerte die Bestimmungsgleichung

$$\cot(x) \stackrel{!}{=} \frac{x}{\sqrt{\frac{mV_0L^2}{2\hbar^2} - x^2}} \quad \text{und} \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2x}{L}\right)^2. \quad (\text{A.1})$$

D.h. das Eigenwertproblem ist auf eine Nullstellensuche abgebildet worden. Diese transzendente Gleichung muss nun numerisch gelöst werden. Abbildung A.2 dient zur Illustration der zu lösenden Gleichung.

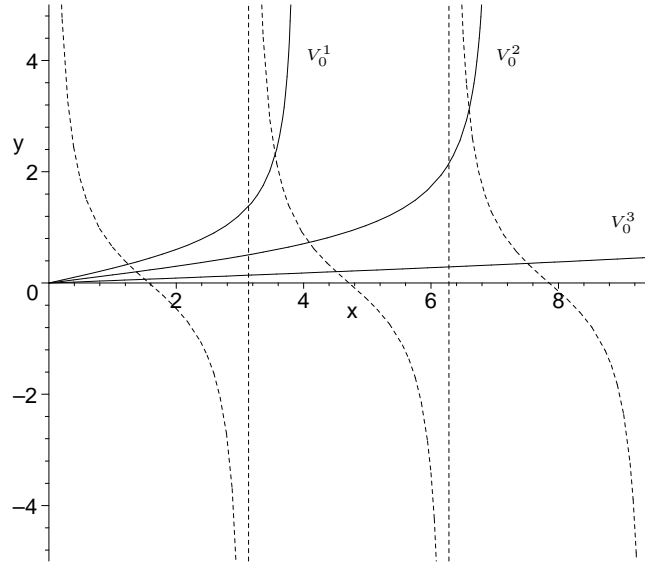


Abbildung A.2: Illustration der Gleichung (A.1). $V_0^1 < V_0^2 < V_0^3$.

Natürlich lässt sich das Problem des endlich hohen Potentialkastens auch mittels der Transfermatrixmethode lösen. Da das Potential in 3 Teilbereiche zerfällt ist es hierzu notwendig das Produkt von 3 Transfermatrizen zu bilden. Dann müssen die Nullstellen eines der Matrixelemente (in diesem Fall T_{11}) gefunden werden. Dies ist im vorliegenden Fall zwar noch analytisch möglich, ist aber ungleich aufwendiger als der oben vorgeführte Lösungsweg, der die

²⁵Dies folgt unmittelbar aus dem Knotensatz [7] in Kombination mit $[\mathbf{H}, P] = 0$.

Symmetrien des Problems geschickt ausnutzt. Für eine Kette von Potentialtöpfen, womöglich sogar mit verschiedenen Tiefen und Breiten, wie sie zum Beispiel in der Theorie ungeordneter Festkörper vorkommt, entfaltet die Transfermatrixmethode aber ihr Potential.

B Berechnung der Coulomb-Matrixelemente

In diesem Anhang wird die Berechnung der Coulomb-Matrixelemente $\tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'}$ behandelt. Das allgemeine Verfahren wird hier speziell an der Berechnung des Elementes $\tilde{V}_{31,13}^{\lambda\lambda'}$ erläutert. Zunächst sei noch einmal an die Definition der Coulomb-Matrixelemente aus Abschnitt 2.3 erinnert:

$$\tilde{V}_{ij,kl}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2q_{||}}{(2\pi)^2} \frac{F_{0000}(q_{||})}{q_{||}} \langle \varphi_i^\lambda | e^{-i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}} | \varphi_l^\lambda \rangle \langle \varphi_j^{\lambda'} | e^{i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}} | \varphi_k^{\lambda'} \rangle \quad (\text{B.1})$$

mit dem Formfaktor

$$F_{0000}(q_{||}) = \frac{32\pi^4 (-1 + (Lq_{||}) + e^{-(Lq_{||})}) + 20(Lq_{||})^3\pi^2 + 3(Lq_{||})^5}{(Lq_{||})^2 ((Lq_{||})^2 + 4\pi^2)^2} . \quad (\text{B.2})$$

Durch den Übergang zu kartesischen Koordinaten lassen sich – wie man anhand der beiden unten angeführten Beispiele leicht einsieht – die in Gleichung (B.1) auftretenden Terme der Form $\langle \varphi_i^\lambda | e^{-i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}} | \varphi_l^\lambda \rangle$, die eine Integration in Zylinderkoordinaten enthalten, auf eine Linearkombination von eindimensionalen Integralen der Form

$$\int dx e^{-ikx} x^n e^{-\alpha x^2} = \left(i \frac{\partial}{\partial k} \right)^n \int dx e^{-ikx} e^{-\alpha x^2} = \left(i \frac{\partial}{\partial k} \right)^n \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-k^2/4\alpha} \quad (\text{B.3})$$

zurückführen.²⁶ Explizit erhält man für $n = 0, 1, 2$:

$$\begin{aligned} \int dx e^{-ikx} e^{-\alpha x^2} &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-k^2/4\alpha} , \\ \int dx e^{-ikx} x e^{-\alpha x^2} &= \frac{ik}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-k^2/4\alpha} , \\ \int dx e^{-ikx} x^2 e^{-\alpha x^2} &= \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-k^2/4\alpha} \left(1 - \frac{k^2}{2\alpha} \right) . \end{aligned}$$

Wie oben bereits angekündigt wollen wir nun speziell

$$\tilde{V}_{31,13}^{\lambda\lambda'} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2q_{||}}{(2\pi)^2} \frac{F_{0000}(q_{||})}{q_{||}} \langle \varphi_3^\lambda | e^{-i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}} | \varphi_1^\lambda \rangle \langle \varphi_1^{\lambda'} | e^{i\mathbf{q}_{||}\mathbf{p}} | \varphi_3^{\lambda'} \rangle \quad (\text{B.4})$$

berechnen. Dazu gehen wir zu dimensionslosen Einheiten über und messen alle Längen in dem ersten Skalarprodukt in Einheiten von $l_k^\lambda = 1/\beta_\lambda$ und in dem zweiten Skalarprodukt in

²⁶Natürlich kann man die Matrixelemente auch direkt in Zylinderkoordinaten auswerten, man muss dann allerdings auf weniger elementare Integrale, die Besselfunktionen enthalten, zurückgreifen. Um sich von der Richtigkeit der in kartesischen Koordinaten ermittelten Matrixelemente zu überzeugen, wurde allerdings auch dieser Weg beschritten.

Einheiten von $l_k^{\lambda'} = 1/\beta_{\lambda'}$. Bedenkt man, dass die Wellenfunktionen $\varphi_i(\rho, \varphi)$ die Dimension $1/\text{Länge}$ haben, so ergibt sich für das erste Skalarprodukt

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_3^\lambda | e^{-i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{p}} | \varphi_3^\lambda \rangle \\
&= \int \varphi_3^\lambda(\mathbf{r})^* e^{-i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{p}} \varphi_3^\lambda(\mathbf{r}) \\
&= \int d^2\rho \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \rho e^{-\rho^2/2} e^{i\varphi} \right)^* e^{-i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{p}} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \rho e^{-\rho^2/2} e^{i\varphi} \right) \\
&= \frac{1}{\pi} \int d^2\rho \rho^2 e^{-\rho^2} e^{-i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{p}} \\
&= \frac{1}{\pi} \int dx e^{-iq_x x} \int dy e^{-iq_y y} (x^2 + y^2) e^{-(x^2+y^2)} \\
&= \frac{1}{\pi} \int dx e^{-iq_x x} x^2 e^{-x^2} \int dy e^{-iq_y y} e^{-y^2} + \frac{1}{\pi} \int dy e^{-iq_y y} y^2 e^{-y^2} \int dx e^{-iq_x x} e^{-x^2} \\
&= \frac{1}{\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^{-q_x^2/4} (1 - q_x^2/2) \sqrt{\pi} e^{-q_y^2/4} + \frac{1}{\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^{-q_y^2/4} (1 - q_y^2/2) \sqrt{\pi} e^{-q_x^2/4} \\
&= \frac{1}{4} e^{-q_\parallel^2/4} (4 - q_\parallel^2)
\end{aligned}$$

und für das zweite Skalarprodukt

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_1^{\lambda'} | e^{+i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{p}} | \varphi_1^{\lambda'} \rangle \\
&= \frac{1}{\pi} \int d^2\rho e^{-\rho^2} e^{+i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{p}} \\
&= \frac{1}{\pi} \int dx e^{-i(-q_x)x} \int dy e^{-i(-q_y)y} e^{-(x^2+y^2)} \\
&= \frac{1}{\pi} \sqrt{\pi} e^{-(-q_x)^2/4} \sqrt{\pi} e^{-(-q_y)^2/4} \\
&= e^{-q_\parallel^2/4} .
\end{aligned}$$

Die Form der beiden berechneten Skalarprodukte ist genau von der auf Seite 31 beschriebenen allgemeinen Form. Die Winkelanteile sind nicht vorhanden, da $m_i = m_l$ und $m_j = m_k$ ist. Setzt man nun diese Ausdrücke für die Skalarprodukte in Gleichung (B.4) ein und geht wieder zu dimensionsbehafteten Größen über, so erhält man

$$\begin{aligned}
\tilde{V}_{31,13}^{\lambda\lambda'} &= \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \int \frac{d^2q_\parallel}{(2\pi)^2} \frac{F_{0000}(q_\parallel)}{q_\parallel} e^{-q_\parallel^2/4\beta_{\lambda'}^2} \frac{1}{4} e^{-q_\parallel^2/4\beta_\lambda^2} \left(4 - \frac{q_\parallel^2}{\beta_\lambda^2} \right) \\
&= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r l_k^\lambda} \int d\tilde{q} F_{0000}(\beta_\lambda \tilde{q}) e^{-\frac{1}{4}\tilde{q}^2(1+(\beta_\lambda/\beta_{\lambda'})^2)} \left(1 - \frac{\tilde{q}^2}{4} \right) .
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, dass der Integrand nur vom Betrag q_\parallel abhängt und man folglich die Winkelintegration sofort durchführen kann. Weiterhin wurde die Substitution $q_\parallel/\beta_\lambda = \tilde{q}$ vorgenommen.

Man beachte, dass in dem verbleibenden Integral (im Gegensatz zu dem Integral aus (B.1)) die von der Coulomb-Wechselwirkung stammende Singularität bei $q_\parallel = 0$ nicht mehr vorhanden ist und somit die Integration unproblematisch ist. Wegen der Struktur von F_{0000} muss diese für $L \neq 0$ allerdings numerisch erfolgen.²⁷ Da der Integrand für große \tilde{q} stets wie $\tilde{q}^n e^{-\tilde{q}^2/4(1+(\beta/\beta')^2)}$

²⁷Für $L = 0$ lassen sich die Matricelemente wegen $F_{0000}(L = 0) = 1$ auch analytisch angeben.

(i, j, k, l)	$\tilde{V}_{ij,kl}/E_c$
(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 B.1: Alle von Null verschiedenen Matrixelemente $\tilde{V}_{ij,kl}$ speziell für eine Quantenfilmdicke $L = 4$ nm und Oszillatorlänge $l_k^e = l_k^h = 5.4$ nm ($E_c = 19.478$ meV) unter Berücksichtigung der ersten 3 Oszillatorzustände für die Elektronen und Löcher. Der Index 1 bezeichnet die Wellenfunktion $\varphi_{0,0}(\rho, \varphi)$, 2 die Funktion $\varphi_{0,-1}(\rho, \varphi)$ und der Index 3 die Oszillatorfunktion $\varphi_{0,+1}(\rho, \varphi)$.

abfällt, ist es allerdings möglich das Integrationsintervall $[0, \infty]$ schon sehr früh abzuschneiden ohne einen nennenswerten Fehler zu produzieren.

Die anderen Matrixelemente kann man nun ganz analog berechnen. Aufgrund der Symmetrie der Matrixelemente (s. Gleichung (1.12) auf Seite 8) ist klar, dass man nicht alle Matrixelemente explizit berechnen muss. Weiterhin vereinfacht sich der Rechenaufwand erheblich, wenn man zunächst nur die Elemente $\langle \varphi_i | e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}} \mathbf{p} | \varphi_j \rangle$ mit $i > j$ berechnet und die übrigen Matrixelemente mittels der Substitution $q_{\parallel} \rightarrow -q_{\parallel}$ und/oder komplexer Konjugation bestimmt, d.h. $\langle \varphi_j | e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}} \mathbf{p} | \varphi_i \rangle = (\langle \varphi_i | e^{-i(-\mathbf{q}_{\parallel})} \mathbf{p} | \varphi_j \rangle)^*$ ausnutzt.

Alle von Null verschiedenen Matrixelemente sind in Tabelle B.1 zusammengestellt. In dieser Tabelle wurden nur die ersten drei Oszillatorzustände für die Elektronen und Löcher berücksichtigt und angenommen, dass die Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher identisch sind, so dass $\tilde{V}_{ij,kl}^{ee} = \tilde{V}_{ij,kl}^{eh} = \tilde{V}_{ij,kl}^{hh} = \tilde{V}_{ij,kl}$ gilt. Die Gleichheit der Elemente einer Zeile aus Tabelle B.1 ergibt sich unter Verwendung der Symmetrie (1.12) und der Tatsache, dass alle hier berechneten Matrixelemente reell sind. Man erkennt, dass nur 19 der $3^4 = 81$ Matrixelemente ungleich Null sind, und dass es insgesamt nur 5 verschiedene Werte gibt. Dass bei den 10 Zeilen nur 5 verschiedene Matrixelemente vorkommen, ist auf die zusätzliche Symmetrie $\psi_{m,N_r}(\mathbf{r}) = \psi_{-m,N_r}(\mathbf{r})$ der Wellenfunktionen für zylindersymmetrische Potentiale zurückzuführen.

P. Hawrylak hat einige Matrixelemente für den Fall $L = 0$ in [16] angegeben. Diese stimmen mit unseren Berechnungen im Grenzfall $L \rightarrow 0$ genau überein.

Literatur

- [1] A. Barenco and M. A. Dupertuis. Quantum many-body states of excitons in a small quantum dot. *Phys. Rev. B*, 52(4):2766–2778, 1995.
- [2] D. Bertram and Horst Weller. Zwischen Molekül und Festkörper. *Physik Journal*, 1(2):47–52, 2002.
- [3] G. W. Bryant. Excitons in quantum boxes. *Surface Science*, 196:596–599, 1988.
- [4] G. W. Bryant. Excitons in quantum boxes: Correlation effects and quantum confinement. *Phys. Rev. B*, 37(15):8763–8772, May 1988.
- [5] S. L. Chuang. *Physics of optoelectronic devices*. John Wiley, New York, 1995.
- [6] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum Mechanics, Volume I*. John Wiley, New York, 1992.
- [7] R. Courant and D. Hilbert. *Methoden der mathematischen Physik I*. Springer, Heidelberg, 1968.
- [8] G. Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik*. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 2000.
- [9] E. Dekel et al. Carrier-carrier correlations in an optically excited single semiconductor quantum dot. *Phys. Rev. B*, 61(16):11009–11020, 2000.
- [10] H. Haug et al. Semiconductor quantum structures. In W. Martienssen, editor, *Landolt-Börnstein, New Series III, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Volume 34C1*. Springer, Heidelberg, 2001.
- [11] S. Fafard et al. Manipulating the energy levels of semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, 59(23):15368–15373, 1999.
- [12] S. Fafard, D. Leonard, J.L. Merz, and P.M. Petroff. Selective excitation of the photoluminescence and the energy levels of ultrasmall InGaAs/GaAs quantum dots. *Appl. Phys. Lett.*, 65(11):1388–1390, 1994.
- [13] J.L. Gondar and F. Comas. Optical transitions in self-assembled quantum dots. *Physica B*, 322:413–418, 2002.
- [14] H. Haken and H. C. Wolf. *Atom- und Quantenphysik*. Springer, Heidelberg, 1993.
- [15] H. Haug and S. W. Koch. *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scientific, Singapore, 1993.
- [16] P. Hawrylak. Excitonic artificial atoms: Engineering optical properties of quantum dots. *Phys. Rev. B*, 60(8):5597–5608, 1999.
- [17] P. Hawrylak, G. A. Narvaez, M. Bayer, and A. Forchel. Excitonic absorption in a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 85(2):389–392, 2000.
- [18] H.C.Schneider, W.W.Chow, and S.W.Koch. Many-body effects in the gain spectra of highly excited quantum-dot lasers. *Phys. Rev. B*, 64:115315, 2001.

-
- [19] Y. Z. Hu, M. Lindberg, and S. W. Koch. Theory of optically excited intrinsic semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, 42(3):1713–1723, 1990.
- [20] L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs. *Quantum dots*. Springer, Heidelberg, 1998.
- [21] A. Kuther, M. Bayer, A. Forchel, A. Gorbunov, V. B. Timofeev, F. Schäfer, and J. P. Reithmaier. Zeeman splitting of excitons and biexcitons in single InGaAs/GaAs self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 58(12):R7509, 1998.
- [22] Ph. Lelong and G. Bastard. Binding energies of excitons and charged excitons in GaAs/Ga(In)As quantum dots. *Solid State Commun.*, 98(9):819–823, 1996.
- [23] John P. Loehr. *Physics of Strained Quantum Well Lasers*. Kluwer Academic Publisher, Boston, 1998.
- [24] T. Lundstrom, W. Schoenfeld, H. Lee, and P. M. Petroff. Exciton storage in semiconductor self-assembled quantum dots. *Science*, 286:2312–2314, 1999.
- [25] P. Pereyra and S. E. Ulloa. Magnetic-field and quantum confinement asymmetry effects on excitons. *Phys. Rev. B*, 61:2128–2137, 2000.
- [26] N. H. Quang, S. Ohnuma, and A. Natori. Charged magnetoexcitons in parabolic quantum dots. *Phys. Rev. B*, 62(19):12955–12962, 2000.
- [27] W. Que. Excitons in quantum dots with parabolic confinement. *Phys. Rev. B*, 45(15):11036–11041, May 1992.
- [28] A. H. Rodriguez, C. Trallero-Giner, S.E. Ulloa, and J. Marin-Antuna. Electronic states in a quantum lens. *Phys. Rev. B*, 63:125319, 2001.
- [29] I. Schnell, G. Czycholl, and R. C. Albers. Hubbard-U calculations for Cu from first-principle wannier functions. *Phys. Rev. B*, 65:075103, 2002.
- [30] F. Schwabl. *Quantenmechanik*. Springer, Heidelberg, 1998.
- [31] M. Spanner. Private Mitteilung, 2002.
- [32] 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, 1999.
- [33] Th. Wimbauer and K. Oettinger et al. Zeeman splitting of excitonic recombination in InGaAs/GaAs single quantum wells. *Phys. Rev. B*, 50(12):8889–8892, 1994.
- [34] A. Wojs and P. Hawrylak. Exciton-exciton interactions in highly excited quantum dots in a magnetic field. *Solid State Commun.*, 100(7):487–491, 1996.
- [35] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard, and L. Jacak. Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 54(8):5604–5608, 1996.
- [36] P. S. Zory. *Quantum Well Lasers*. Academic Press, Boston, 1993.
- [37] A. Zrenner. A close look on single quantum dots. *Journal of Chemical Physics*, 112(18):7790–7798, May 2000.
- [38] A. Zrenner and E. Beham et al. Coherent properties of a two-level system based on a quantum-dot photodiode. *Nature*, 418:612–614, 2002.

Danksagung

Als erstes möchte ich Herrn Prof. Dr. Frank Jahnke für die gute Betreuung und Unterstützung beim Erstellen dieser Arbeit und den damit verbundenen Diskussionen danken.

Weiterhin möchte ich der gesamten Arbeitsgruppe *Theoretische Halbleiterphysik* für manch freundliche Unterstützung und unterhaltsames Mittagessen danken. Insbesondere geht mein Dank an Paul Gartner, der stets Zeit für eine Diskussion fand und viele fruchtbare Ideen einbrachte, sowie an Torben Nielsen für die Durchsicht meines Manuskripts.

Auch soll hier der eine oder andere Tip aus der Arbeitsgruppe *Theoretische Festkörperphysik* nicht ohne Dank bleiben. Explizit sei hier nur Stefan Schumacher gedankt, der sich die Mühe machte die vorletzte Fassung dieser Arbeit kritisch zu kommentieren.

Ebenso möchte ich Monika Orthwein für das Auffinden des einen oder anderen Fehlers danken.

Meiner Freundin Ivona möchte ich an dieser Stelle nicht nur für die Unterstützung und den Ausgleich während meines gesamten Studiums danken, sondern auch für die vielen gemeinsamen Jahre.

Zu guter Letzt danke ich meinen Eltern, ohne die diese Diplomarbeit offensichtlich nie geschrieben worden wäre und die mich während meines ganzen Studiums unterstützt haben.
