3.4 Quantum Wells (Quantumtröge)

Wir betrachten ein Teilchen in einem einfachen Potentialtopf $V(r)$ der so aufgebaut ist, daß er "gebundene Zustände" erzeugt wenn die Schrödingergleichung gelöst wird. Dem gebundenen Zustand entspricht eine endliche Wellenfunktion $\Psi(r)$ die gegen 0 geht bei $r \to \infty$

Annahme: Potential hat die Form

$$V(r) = V(x) + V(y) + V(z)$$

damit wird die Wellenfunktion separabel und hat die Form

$$\Psi(r) = \psi(x) \cdot \psi(y)\, \psi(z)$$

Wir lösen jetzt das Problem des quadratischen eindimensionalen Quantum Wells.

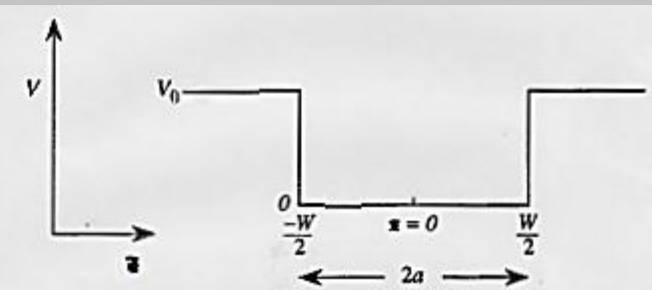


Figure 3.6: A quantum well of width 2a and infinite barrier height or barrier height V_0.

3.4 Quantum well

Die zu lösende Gleichung ist damit

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dz^2} = E\psi$$

Für den Fall unendlich hoher Potentialwände $V(z)=\infty$ für $|z| \geq a$ erhält man die allgemeine Lösung

$$\Psi(z) = B \cos\frac{n \cdot \pi \cdot z}{2a} \qquad n \text{ ungerade Zahl}$$

$$= A \cdot \sin\frac{n \cdot \pi \cdot z}{2a} \qquad n \text{ gerade Zahl}$$

Die Energieniveaus sind dann

$$\boxed{E = \frac{\pi^2 \hbar^2 \cdot n^2}{8 m^* a^2}} = \boxed{\frac{\pi^2 \cdot \hbar^2 \cdot n^2}{2 m^* W^2}}$$

die normierte Wellenfunktion des Teilchens ergibt sich damit zu

$$\Psi(z) = \sqrt{\frac{2}{W}} \cdot \cos\left(\frac{n \cdot \pi \cdot z}{W}\right) \qquad n \text{ ungerade}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{W}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot z}{W}\right) \qquad n \text{ gerade}$$

Dieses Problem mit unendlichen Potentialtöpfen ist gut geeignet für die Grundzustände der diskreten Energiezustände und ist oft ein guter Startwert für numerische Lösung der exakten Schrödingergleichung.

QW

⇒ Für einen QW mit endlicher Barrierenhöhe V_0 gilt:

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & |z| \leq a = \frac{w}{2} \\ 0 & |z| > a = \frac{w}{2} \end{cases}$$

Wir müssen jetzt die Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{d}{dz}\,\frac{1}{m}\cdot\frac{d}{dz} + V(z)\right]\Psi(z) = E\cdot\Psi(z)$$

Die allgemeine Lösung für gebundene Zustände (d.h. $E < V_0$)

hat nun folgende Form

$$\Psi(z) = \begin{cases} A\cdot e^{\beta z} & z < -\frac{w}{2} \\ B\cdot\cos(\alpha z) + C\cdot\sin(\alpha z) & -\frac{w}{2} \leq z \leq \frac{w}{2} \\ D\cdot e^{-\beta z} & z \geq \frac{w}{2} \end{cases}$$

wobei

$$\alpha = \sqrt{\frac{2 m_w E}{\hbar^2}}$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2\cdot m_b\cdot(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

QW

Unter den Randbedingungen, daß ψ stetig und $\frac{1}{m}\frac{\partial\psi}{\partial z}$ ebenfalls stetig ist (d.h. $\psi\left(\frac{w}{2}\right)^{+} = \psi\left(\frac{w^{-}}{2}\right)$

bzw. $\frac{1}{m_b}\cdot\frac{d}{dz}\psi\left(\frac{w^{+}}{2}\right) = \frac{1}{m_w}\cdot\frac{d}{dz}\left(\frac{w^{-}}{2}\right)$)

$$\left.\begin{aligned}
&(a)\quad B\cdot\cos\left(\frac{\alpha w}{2}\right) - C\sin\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = A\, e^{-\beta\frac{w}{2}}\\
&(b)\quad \frac{\alpha}{m_w}\cdot B\cdot\sin\left(\frac{\alpha w}{2}\right) + \frac{\alpha}{m_w}\cdot C\cos\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = \frac{\beta}{m_B}\cdot A\cdot e^{-\beta\frac{w}{2}}
\end{aligned}\right\}\ \text{Stelle } z = -\frac{w}{2}$$

$$\left.\begin{aligned}
&(c)\quad B\cdot\cos\left(\frac{\alpha w}{2}\right) + C\sin\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = D\cdot e^{-\beta\frac{w}{2}}\\
&(d)\quad -\frac{\alpha}{m_w}\cdot B\cdot\sin\left(\frac{\alpha w}{2}\right) + \frac{\alpha}{m_w} C\cos\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = -\frac{\beta}{m_B}\cdot D\cdot e^{-\beta\frac{w}{2}}
\end{aligned}\right\}\ \text{Stelle } z = \frac{w}{2}$$

QW

daraus ergibt sich

(a+c) $$2B\cos\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = (A+D)\, e^{-\beta\frac{w}{2}} \qquad (1)$$

(b+d) $$\frac{2\alpha B}{m_w}\cdot\sin\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = \frac{\beta}{m_B}(A+D)\, e^{-\beta\frac{w}{2}} \qquad (2)$$

(2)/(1) $\cdot \frac{w}{2}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\alpha}{m_w}\frac{w}{2}\tan\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = \frac{\beta}{m_B}\cdot\frac{w}{2}}$$ ... Lösung für ungerade Parität

bzw.: $$\boxed{\left(\alpha\cdot\frac{w}{2}\right)\cdot\tan\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = \frac{m_w}{m_B}\cdot\beta\cdot\frac{w}{2}}$$

(a−c) $$2C\sin\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = (D-A)\cdot e^{-\beta\frac{w}{2}}$$

(b−d) $$2\alpha C\cos\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = -\beta\,(D-A)\, e^{-\beta\frac{w}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\alpha}{m_w}\frac{w}{2}\cdot\cot\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = -\frac{\beta}{m_B}\cdot\frac{w}{2}}$$ Lösung für gerade Parität

$$\boxed{\left(\alpha\cdot\frac{w}{2}\right)\cdot\cot\left(\frac{\alpha w}{2}\right) = -\frac{m_w}{m_B}\cdot\left(\beta\cdot\frac{w}{2}\right)}$$

Diese beiden Gleichungen sind analog wie früher bei den Moden eines Wellenleiters. Sie können wiederum entweder mit Hilfe numerischer Techniken gelöst werden, oder graphisch da

$$\boxed{\left(\alpha\frac{w}{2}\right)^2 + \frac{m_w}{m_B}\left(\beta\frac{w}{2}\right)^2 = \frac{2m_w V_0}{\hbar^2}\left(\frac{w}{2}\right)^2 := R(w)^2}$$

Zeichnen eines Kreises mit dem Radius $R = \sqrt{\frac{2m_w V_0}{\hbar^2}}\cdot\frac{w}{2}$

Der Schnittpunkt dieses Kreises mit den oberen Kurven gibt direkt die Lösung

QW – graphische Lösung

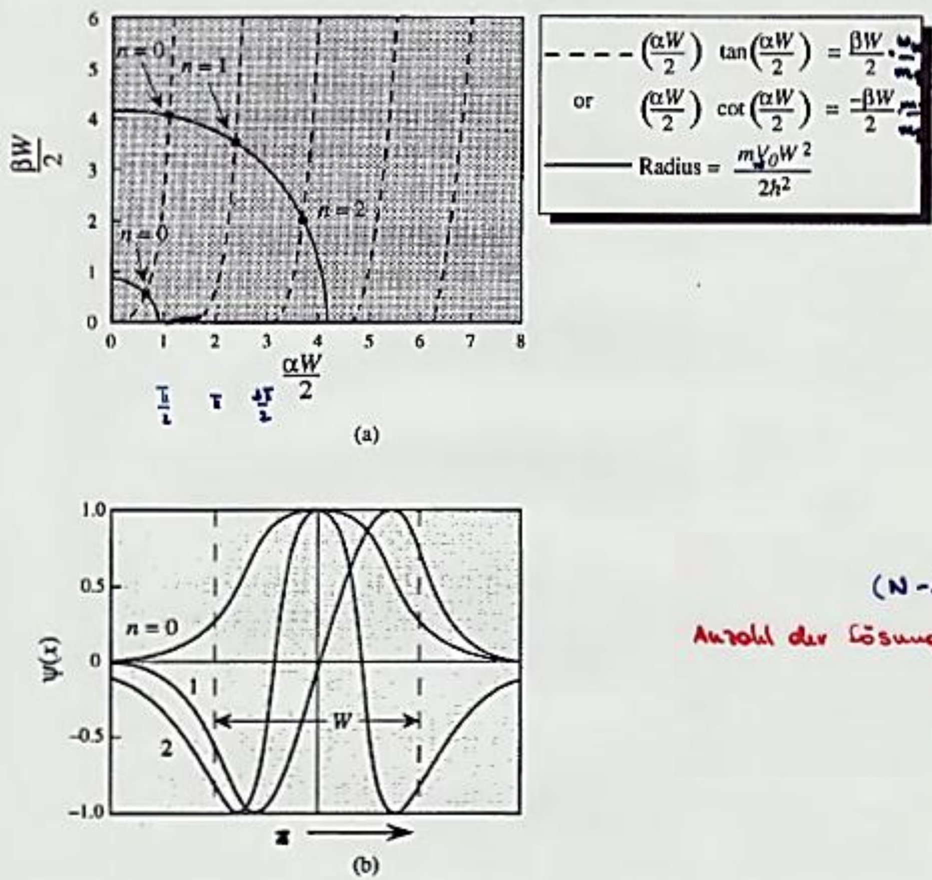


Figure 3.7: (a) The graphical approach to solving for the allowed modes in a finite quantum well. (b) Typical solutions for the particle wavefunctions.

$$(N-1)\cdot\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{2\cdot m_w\cdot V_0}{\hbar^2}}\cdot\left(\frac{W}{2}\right) < N\cdot\frac{\pi}{2}$$

Anzahl der Lösungen:

$$N = 1 + \mathrm{Int}\left(\frac{2}{\pi}\cdot\sqrt{\frac{2\cdot m_w\cdot V_0}{\hbar^2}}\cdot\frac{W}{2}\right)$$

QW – Anzahl der Lösungen

Wie aus der Folie klar ersichtlich nimmt mit zunehmender Topfbreite W die Anzahl der Lösungen zu. Es gibt aber immer mindestens eine Lösung. Aus obigem Bild ist offensichtlich, daß wenn der Kreis im Bereich

$$(N-1)\cdot\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{2m_w\cdot V_0}{\hbar^2}}\cdot\left(\frac{W}{2}\right) < N\cdot\frac{\pi}{2}$$

ist, dann gibt es N Lösungen wobei

$$\boxed{N = 1 + \mathrm{int}\left[\frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{2m^* V_0}{\hbar^2}}\cdot\frac{W}{2}\right]}$$

Für Halbleiter ist V_0 jetzt dann entweder ΔE_C für Elektronen bzw. ΔE_V für Löcher. Wegen der unterschiedlichen Massen der schweren und leichten Löcher spalten deren Energieniveaus im QW auf

QW – AlAs/GaAs

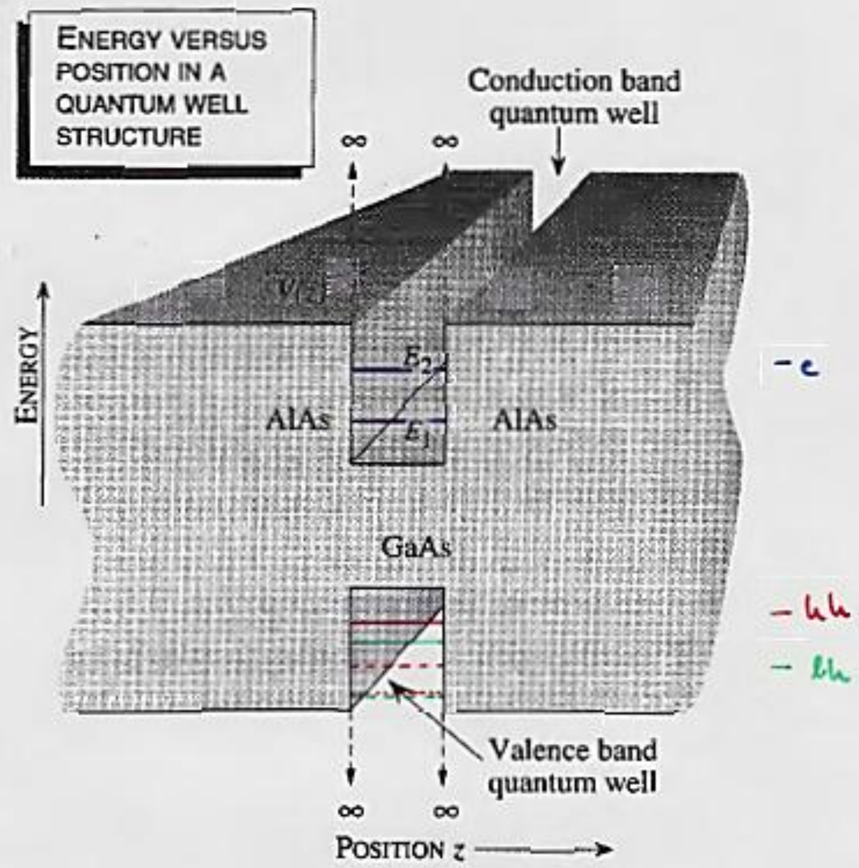


Figure 3.8: Schematic of a quantum well and the sub-band levels. Note that in a semiconductor quantum well, one has a quantum well for the conduction band and one for the valance band. Sub-bands are produced in the conduction band and the valence band. In the infinite barrier model, the barriers are chosen to have an infinite potential, as shown.

QW – Energie senkrecht zur z-Richtung

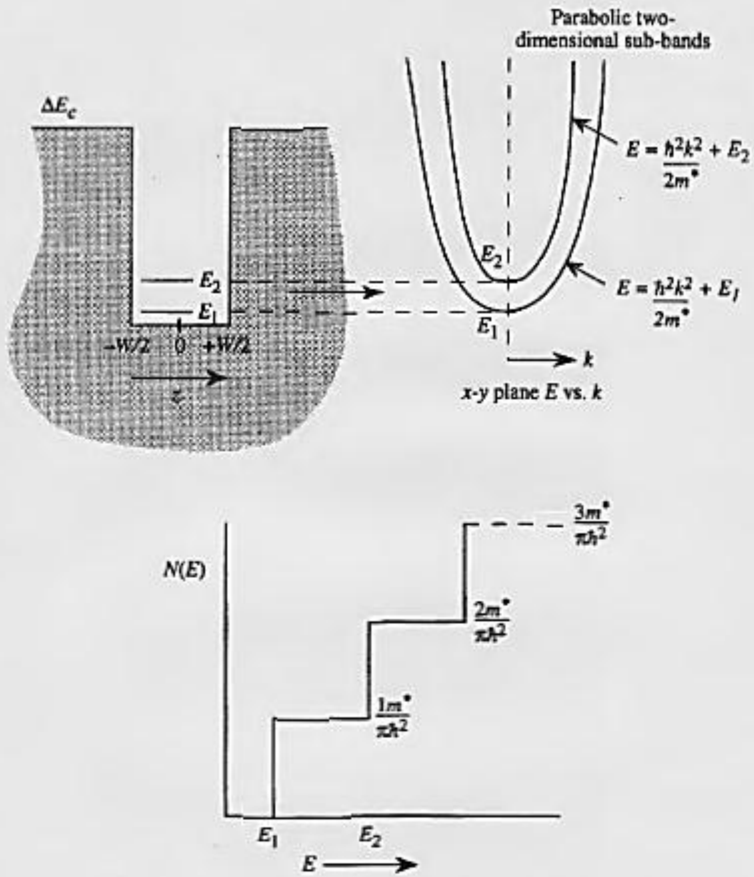


Figure 3.9: Schematic of a quantum well and the subband levels. In the x-y plane the subbands can be represented by parabolas. Note that in a semiconductor quantum well, one has a quantum well for the conduction band and one for the valance band. Subbands are produced in the conduction band and the valence band.

$$E(n, k_x, k_y) = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2 \cdot n^2}{2 \cdot m_w^* \cdot W} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2 \cdot m_w^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2 \cdot m_w^*}$$

QW - Energie

Die gesamte Energie eines Elektrons bzw. Loches (gemessen von der Bandkante des bulk Topfmaterials ist

$$\boxed{E(n, k_x, k_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 \cdot m^*_{w_\perp} \cdot W^2} + \frac{\hbar^2 \cdot k_x^2}{2 \cdot m^*_{w_\parallel}} + \frac{\hbar^2 \cdot k_y^2}{2 \cdot m^*_{w_\parallel}}}$$

Dies ergibt eine Serie von Subbändern für n=1,2,3,.. wie in Folie Fig 3.9 sichtbar

In jedem Subband verhalten sich die Elektronen bzw. Löcher als ob eine 2-dim. Welt existiert und ihre Zustandsdichte hat deshalb das 2-dim. stufenförmige Verhalten.

Mit Hilfe von Wachstumstechnischen und Verarbeitungstechnischen Schritten kann die Dimension noch weiter verringert werden und

Energie – Qantum Wire and Qauntum Dot

Mit Hilfe von Wachstumstechnischen und Verarbeitungstechnischen Schritten kann die Dimension noch weiter verringert werden und

⇒ Quantum wire (Quantendraht) (x und z - Richtung)

$$\boxed{E(n,l,k_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m^* W_z^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 l^2}{2 m^* W_x^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2 m^*}}$$

bzw.

⇒ Quantum dot (Quantenpunkt) (x, y, z - Richtung quantisiert)

$$\boxed{E(n,l,p) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m^* W_z^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 l^2}{2 m^* W_x^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 p^2}{2 m^* W_y^2}}$$

die entsprechenden Zustandsdichten siehe nächste Folie

Density of State (DOS)

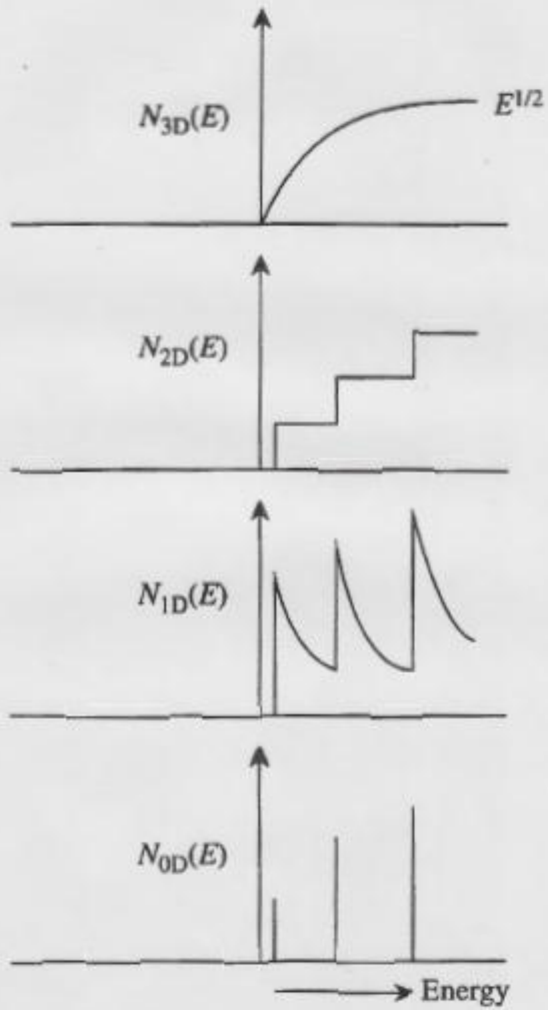


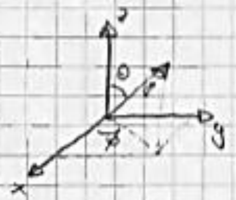
Figure 3.10: A schematic of the density of states in a 3D, quasi-2D, quasi-1D, and quasi-0D system.

Sphärischer QD

3.5 Sphärische Quantenwells (3-dimensional)

Betrachten wir jetzt ein sphärisch symmetrisches Potentialproblem

Das Potential ist gegeben durch



$$V(r) = -V_0 \qquad r < a$$
$$= 0 \qquad r > a$$

Das Potential ist damit endlich. Die Lösung des sphärisch symmetrischen Problems ist im (Θ, ϕ) Raum bekannt und durch Kugelfunktionen (spherical harmonics) beschreibbar.

Die zeitunabhängige Wellengleichung kann in Kugelkoordinaten als

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left[\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\Theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]u+V(r)u=Eu$$

mit u der Wellenfunktion und E der Energie des Teilchens

Durch Separation des radialen und winkelabhängigen Teils

$$u(r,\Theta,\varphi) = R(r)\cdot Y(\Theta,\phi)$$

Sphärischer QD

erhält man

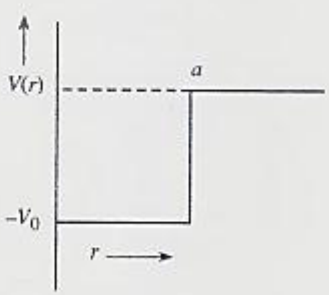
$$\underbrace{\frac{1}{R}\frac{1}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\cdot(E-V(r))}_{\text{nur von } r \text{ abhängig}} = \underbrace{-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\cdot\left(\sin\Theta\frac{\partial Y}{\partial\phi}\right)+\frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]}_{\text{nur von } \Theta,\phi \text{ abhängig}}$$

Da beide Seiten gleich sind und jede abhängig von unabhängigen Koordinaten, so muß jede Seite gleich einer Konstanten sein (λ)

$$\boxed{\begin{aligned} &\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\Theta\frac{\partial Y}{\partial\phi}\right)+\frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y = 0 \\ &\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{\lambda}{r^2}\right\}R = 0 \end{aligned}}$$

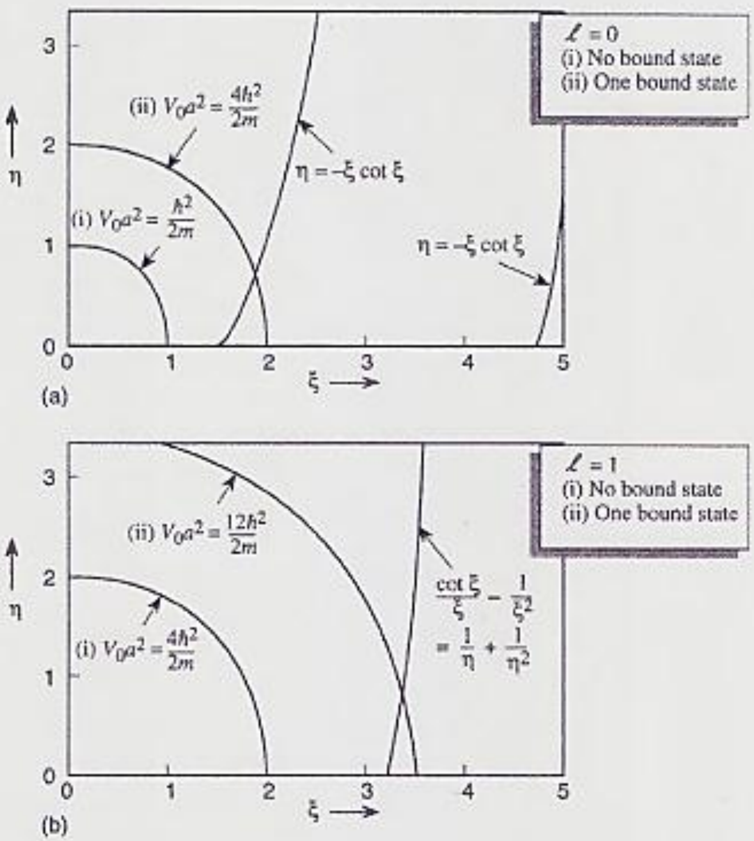
Sphärischer QD – graphische Lösung

3-dim. sphärischer Potentialtopf



Graphische Lösung des sphärischen Potentialtopfs

a) Lösungen gebundener Zustände für den l = 0 Zustand und
b) Lösungen gebundener Zustände für den l = 1 Zustand



Sphärischer QD

Der radiale Teil kann nur erhalten werden wenn $V(r)$ spezifiziert ist. Der winkelabhängige Teil kann weiter separiert werden in Θ und ϕ durch Substitution

$$Y(\Theta,\phi) = F(\Theta)\,G(\phi)$$

$$\frac{1}{\sin\Theta}\frac{d}{d\Theta}\left(\sin\Theta\frac{dF}{d\Theta}\right) + \left(\lambda - \frac{\nu}{\sin^2\Theta}\right)F = 0 \quad \Rightarrow \lambda = \ell\cdot(\ell+1)$$

$$\frac{d^2G}{d\phi^2} + \nu G = 0 \quad \Rightarrow \nu = m^2$$

mit ℓ: Drehimpulsquantenzahl $\quad \ell$ entweder Null oder positiv

m: Spinquantenzahl $\quad |m| \leq \ell$

Aus dieser Winkelabhängigkeit wissen wir, daß $\lambda = \ell\cdot(\ell+1)$

durch Substitution von

$\ell=0$	s
$\ell=1$	p
$\ell=2$	d
$\ell=3$	f

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

kann der Radialteil jetzt folgender weise

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi = E\cdot\chi}$$

Sphärischer QD

Diese Gleichung sieht wie diejenige eines Teilchens in einem ein-dimensionalen Potential aus, wenn

$$V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}$$

wir haben dabei ein zusätzliches Potential das mit dem Drehimpuls des Teilchens verbunden ist.

Mit $L = mr^2\omega$ wissen wir daß die Zentrifugalkraft

$$F = m\omega^2 r = \frac{L^2}{mr^3}$$

$$\Rightarrow V_{Zentrifugal} = \frac{L^2}{2mr^2} \Rightarrow \quad L^2 = \hbar^2 (\ell \cdot (\ell+1))$$

Die Lösung des sphärisch symmetrischen Problems:

Überlegungen für den Fall $\ell=0$, d.h. Drehimpuls 0 (s-Zustände)

Für diesen Fall können wir substituieren

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

und erhalten:

$$\boxed{\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\chi}{dr^2} - V_0\chi = E\chi & r<a \\[2ex] -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\chi}{dr^2} = E\chi & r>a \end{cases}}$$

Sphärischer QD

Dieses Problem ist mit dem eines Teilchens in einem Quantenpunkt identisch. Die einzigen Unterschiede sind darin:

a) Der Wertbereich geht jetzt von $r=0$ bis ∞ anstatt von $-\infty$ bis $+\infty$

b) Die Randbedingung bei $r=0$ ist das $\chi(r=0)=0$ (ansonst würde R divergieren)

Damit ergibt sich folgender Lösungsansatz:

$$\chi(r) = A\cdot\sin(\alpha r) + B\cdot\cos(\alpha r) \qquad r<a$$
$$= C\, e^{-\beta r} \qquad r>a$$

wobei

$$\alpha = \left[\frac{2m\,(V_0-|E|)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

$$\beta = \left[\frac{2m\,|E|}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

Die Randbedingung erfordert, daß $\chi(r)$ bei $r\to 0$ gegen 0 geht.

$\Rightarrow$ daß $B=0$ ist.

Die Stetigkeit der 1. Ableitung $\left.\frac{1}{m_W}\frac{1}{\chi}\frac{d\chi}{dr}\right|_{a^-} = \left.\frac{1}{m_B}\frac{1}{\chi}\frac{d\chi}{dr}\right|_{a^+}$

Sphärischer QD

$$\frac{\alpha}{m_w}\cot(\alpha a) = -\frac{\beta}{m_b}$$

$$\boxed{\alpha \cot(\alpha a) = -\frac{m_w}{m_b}\,\beta}$$

oder mit $\xi = \alpha \cdot a$, $\eta = \beta a$

$$\boxed{\xi \cot \xi = -\frac{m_w}{m_b}\,\eta}$$

mit

$$\boxed{\xi^2 + \frac{m_w}{m_b}\,\eta^2 = \frac{2\, m_w V_0\, a^2}{\hbar^2}} = R(a)^2$$

$$R = \sqrt{\frac{2 m_w V_0}{\hbar^2}} \cdot a$$

Dieses Problem hat jedoch keinen gebundenen Zustand wenn nicht folgende Bedingung erfüllt ist (tan-Gleichung fällt weg)

$$\boxed{V_0 \cdot a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}} \qquad \frac{\pi^2}{8} = 1{,}2337$$

Und es existiert nur eine Lösung solange

$$\boxed{\frac{\pi^2\hbar^2}{8m} < V_0 a^2 < \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}} \qquad \frac{9\pi^2}{8} = 11{,}103$$

Dies ist zum Unterschied von früher (1-Dim square well potential) wo immer mindestens 1 gebundener Zustand existiert, unabhängig wie klein $V_0 a^2$ ist.

Sphärischer QD

Das sphärische Potentialtopfproblem ist noch etwas komplizierter, wenn die Drehimpulsquantenzahl $\ell \neq 0$ ist.

Damit wird unsere Gleichung mit $\rho = \alpha r$ zu

$$\boxed{\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] R = 0}$$

Die Lösung dieser Gleichung sind sphärische Besselfunktionen $j_\ell(\rho)$ innerhalb und sphärische Neumannfunktionen $n_\ell(\rho)$ außerhalb von a. Die allgemeine Lösung setzt sich dann aus den sphärischen Hankelfunktionen (komplexe Funktion)

$$h_\ell^1(\rho) = j_\ell(\rho) + i \cdot n_\ell(\rho)$$

Zusammen

Sphärischer QD

Die Energieniveaus werden nun erhalten unter der Randbedingung, daß $\frac{1}{R}\cdot\frac{dR}{dr}$ bei $r=a$ stetig ist.

→ damit ergeben sich folgende Lösungen:

a) für $l=0$; ($\xi=\alpha\cdot a$, $\eta=\beta\cdot a$) erhalten wir wie früher

$$\boxed{\xi\cot\xi=-\eta}$$

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0\cdot a^2}{\hbar^2}$$

b) für $l=1$; (p-orbitale)

$$\boxed{\frac{\cot\xi}{\xi}-\frac{1}{\xi^2}=\frac{1}{\eta}+\frac{1}{\eta^2}}$$

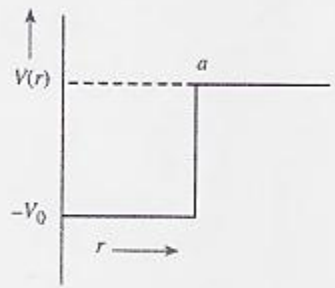
$$\xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0\,a^2}{\hbar^2}$$

→ für $l=1$ ein gebundener Zustand existiert nur für $\boxed{V_0a^2>\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}}$

$\frac{\pi^2}{2}=4{,}93$

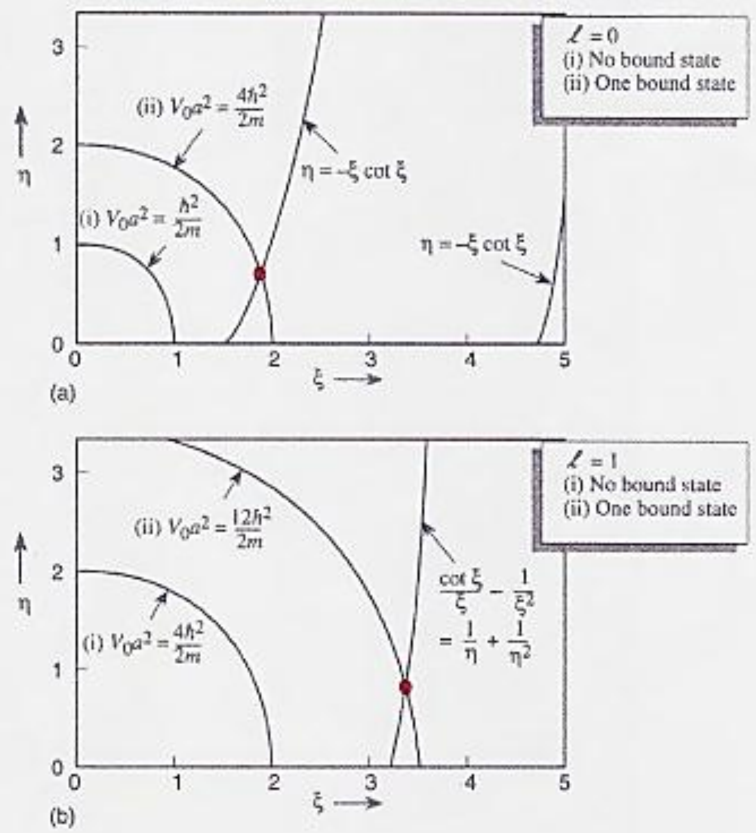
Sphärischer QD

3-dim. sphärischer Potentialtopf



Graphische Lösung des sphärischen Potentialtopfs

a) Lösungen gebundener Zustände für den l = 0 Zustand und
b) Lösungen gebundener Zustände für den l = 1 Zustand



QWs – verspannte Strukturen

z.B.: GaN

GaAs

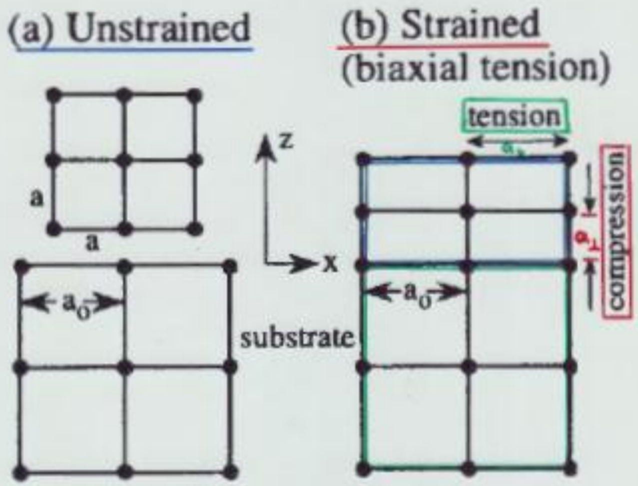


Figure 4.7. A layer material with a lattice constant a to be grown on a substrate with a lattice constant a_0: (a) unstrained; (b) strained.

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a} = \frac{a_{substrat} - a_{layer}}{a_{layer}}$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\varepsilon_{xx}$$

ε ... strain

C_{ij} ... force constants

Table 4.1. Material Parameters

Parameters	GaAs	InAs	InP
a_0 (Å) ... lattice const.	5.6533	6.0584	5.8688
E_g (eV) energy gap	1.424	0.36	1.344
γ_1 Kohn-Luttinger parameters	6.85	20.4	4.95
γ_2	2.1	8.3	1.65
γ_3	2.9	9.1	2.35
C_{11} (10^{11}dyn/cm^2)	11.879	8.329	10.11
C_{12}(10^{11}dyn/cm^2)	5.376	4.526	5.61
$a = a_c - a_v$ (eV)	−9.77	−6.0	−8.6
b (eV)	−1.7	−1.8	−2.0
m_e^*/m_0	0.067	0.025	0.077

a, b – Deformation potentials < hydrostatic

QWs – verspannte Strukturen

Verspannte QW-laser-strukturen

a) verspannte Schichten

Folie 113, 116, 117

Spannung: $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \dfrac{a_{substrat} - a_{schicht}}{a_{schicht}} =: \varepsilon$

kann > 0 ... tension
oder < 0 ... compress
sein !

$\varepsilon_{zz} = -\dfrac{2c_{12}}{c_{11}} \cdot \varepsilon_{xx}$

Elastizitätstheorie

c_{ij} ... Kraftkomponenten (-konstanten)

Die Verspannung kann die Bandstruktur modifizieren. Diese Verspannung wird bei der Herstellung der Epitaktischen Schichten durch Verwendung eines Halbleiters mit unterschiedlicher Gitterkonstante zum Substrat eingebaut. Der "strain" hat aber einen dramatischen Einfluß auf die optischen Eigenschaften des Systems

QWs – verspannte Strukturen

1.) Durchstimmen der Bandlücke

Der eingebaute strain ermöglicht es die Bandlücke eines HL genau einzustellen. Verspannung verursacht eine Abspaltung der schweren und leichten Löcher und die Bandlücken ergeben sich zu

C-band → HH

$$E_g = E_{g0} + 2a\left(\frac{C_{11}-C_{12}}{C_{11}}\right)\cdot\varepsilon + b\cdot\left(\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}}\right)\cdot\varepsilon$$

C-band → LH

$$E_g = E_{g0} + 2a\cdot\left(\frac{C_{11}-C_{12}}{C_{11}}\right)\cdot\varepsilon - b\cdot\left(\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}}\right)\cdot\varepsilon$$

hydrostatische Schubkomponente

u. Pikus-Bir

QWs – verspannte Strukturen

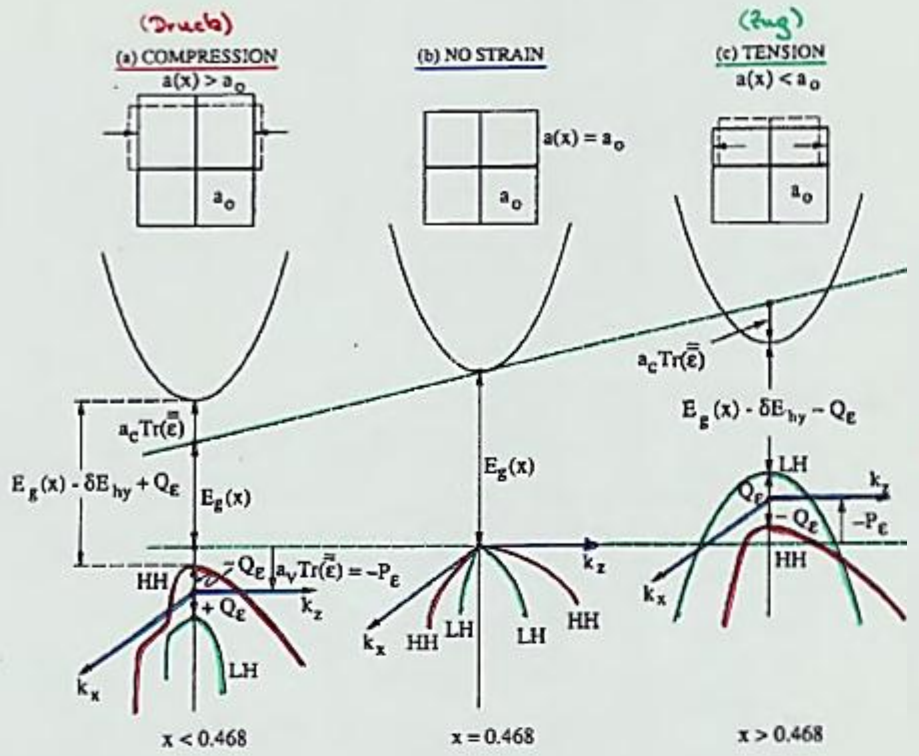


Figure 4.8. The energy-band structure in the momentum space for a bulk $Ga_xIn_{1-x}As$ material under (a) biaxial compression, (b) lattice-matched condition, and (c) biaxial tension for different Ga mole fractions x. The heavy-hole band is above the light-hole band and its effective mass in the transverse plane (the k_x or k_y direction) is lighter than that of the light-hole band in the compressive strain case in (a). The light-hole band shifts above the heavy-hole band in the case of tension in (c). (After Ref. 37.)

hydrostatisch | Scherenkomponente

C-band → HH:

$$\boxed{E_g = E_{g0} + 2 \cdot a \cdot \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11}}\right) \cdot \varepsilon + b \cdot \left(\frac{c_{11} + 2 \cdot c_{12}}{c_{11}}\right) \cdot \varepsilon}$$

C-band → LH:

$$\boxed{E_g = E_{g0} + 2a \cdot \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11}}\right) \cdot \varepsilon - b \cdot \left(\frac{c_{11} + 2 \cdot c_{12}}{c_{11}}\right) \cdot \varepsilon}$$

wobei $\varepsilon = \dfrac{a_{substrate} - a_{layer}}{a_{layer}}$

QWs – verspannte Strukturen

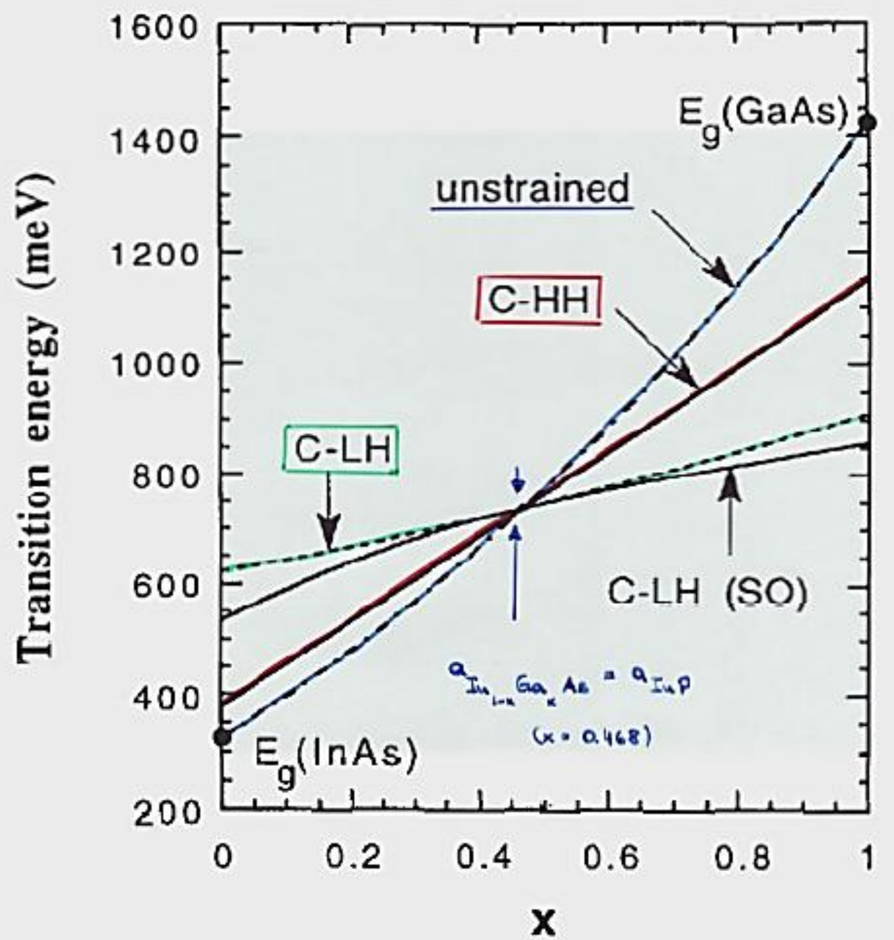


Figure 4.9. The energy band gap of a bulk $In_{1-x}Ga_xAs$ vs. the Ga mole fraction x: ···, unstrained $In_{1-x}Ga_xAs$; —, transition energies from the conduction band (C) to the heavy-hole (HH) and light-hole (LH) bands for a bulk $In_{1-x}Ga_xAs$ pseudomorphically grown on InP; ---, the conduction to light-hole transition energy calculated without the spin–orbit (SO) split-off band coupling. (After Ref. 38.)

Titel