Werner A. Hügel

Experimente zur Coulomb-Quantenkinetik in Halbleitern dargestellt am Beispiel von Galliumarsenid





Universität Karlsruhe (TH) Institut für Angewandte Physik

Experimente zur Coulomb-Quantenkinetik in Halbleitern dargestellt am Beispiel von Galliumarsenid

Zur Erlangung des akademischen Grades eines DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte

DISSERTATION

von

Diplom-Physiker Werner Anton Hügel aus Bad Mergentheim

Tag der mündlichen Prüfung07.02.2003Referent:Prof. Dr. Martin WegenerKorreferent:Prof. Dr. Ralph von Baltz

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <u>http://dnb.ddb.de</u> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2003 Zugl.: Karlsruhe, Univ., Diss., 2003 ISBN 3-89873-666-0

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2003 Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen Telefon: 0551-54724-0 Telefax: 0551-54724-21 www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen. 1. Auflage, 2003 Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-89873-666-0

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

2	2 Grundlagen					
	2.1	Halble	iter	7		
		2.1.1	Elektronische Eigenschaften	9		
		2.1.2	Lineare optische Eigenschaften	12		
	2.2 Quantenkinetik im Halbleiter					
		2.2.1	Gauß-Markov-Echo	20		
	2.2.2 Quantenkinetik der Ladungsträger-LO-Phonon-Wechselwirkur					
		2.2.3	Quantenkinetik der			
			Ladungsträger-Ladungsträger-Wechselwirkung	33		
2.3 Experimentelle Methoden				40		
		2.3.1	Echtzeitauflösende Methoden	44		
		2.3.2	Kohärente-Kontrolle	48		

3

3	Exp	erimenteller Aufbau			
	3.1	Der Titan:Saphir-Laser			
	3.2	Vierwellenmischaufbau			
		3.2.1 Dielektrische Spiegel			
		3.2.2 Hohlspiegeloptik			
	3.3	Phasenkopplung			
	3.4 Zeitauflösung durch Summenfrequenzerzeugung				
	3.5	Beschreibung der Halbleiterproben			

4	Experimente zur Ladungsträger-Ladungsträger-Wechselwirkung an GaAs				
	4.1 Volumen-GaAs	71			
	4.2 Kohärente-Kontrolle-Experimente	84			
	4.3 GaAs-vielfachquantenfilme	91			
5	Photonecho Experimente an CdTe	103			
	5.1 Photonecho-Experimente	104			
	5.2 Kohärente-Kontrolle-Experimente	111			
6	Zusammenfassung	119			
A	Materialparameter	123			
B	B Präparation der Proben und Spiegel				
С	Zur Zeitauflösung	127			
Li	teraturverzeichnis	129			

2

Kapitel 1

Einleitung

"Warum verwenden Sie solch kurze Laserimpulse für Ihre Experimente?"Dies ist eine typische Frage, die zu mindest einmal während jeder Laborführung gestellt wurde. Die Antwort auf diese Frage ist aus rein physikalischer Sicht einfach zu beantworten, bringt den Fragesteller jedoch oft nicht weiter. Eine sehr anschauliche Antwort aus klassischer Sicht bringt die Besucher der Thematik oft schnell näher. So wird der optische Tisch in einem Gedankenexperiment zu einem Billardsalon umgebaut. Dabei ist der Billardtisch der Halbleiterkristall, die Kugeln stellen die Elektronen dar, der Filzbezug ist eine Art "Bad" (z.B. Phononen) und der Queue, mit dem die Kugel angestoßen wird, kann als kurzer optischer Impuls betrachtet werden. Die oft verwendete Triangel entspricht der Präparation der Ausgangsbedingungen. Der Ablauf des Spiels ist nicht weiter von Belang, interessant ist für uns die Frage, was zwischen und während den Stößen passiert. Auf dem ersten Blick scheinen die Stöße zweier Kugeln unendlich kurz zu sein, sie sind nicht mit den menschlichen Sinnen aufzulösen. Das System ließe sich dann durch eine Stoßrate beschreiben, in der es nur eine charakteristische Zeit, die Zeit zwischen den Stößen, geben würde. Diese Beschreibung führt in einer physikalischen Beschreibung zur Boltzmannkinetik, in der es nur eine charakteristische Zeit, die Zeit zwischen zwei Stößen, gibt. Soll der Stoßprozess selbst untersucht werden, so bedarf es einiger technischer Hilfsmittel, beispielsweise einer Kamera mit einer sehr kurzen Belichtungszeit. Eine Abfolge von Momentaufnahmen würde uns den Eindruck vermitteln, dass der Stoß in der Tat nicht unendlich schnell abläuft, sondern eine gewisse Zeit benötigt. Es handelt sich somit um eine zweite Zeit, die Zeit die der Stoßprozess benötigt, um als abgeschlossen zu gelten. Diese Situation entspricht der Beschreibung der Streuprozesse im quantenkinetischen Regime. Die Untersuchung dieses Regimes am Halbleiter Galliumarsenid (GaAs) und Cadmiumtellurid (CdTe) ist Gegenstand dieser Arbeit. Die kurzen Laserimpulse haben zum einen den Zweck, die ultraschnellen Prozesse im quantenkinetischen Regime am System Halbleiter untersuchen zu können und zum anderen eine genügend hohe zeitliche Auflösung zu erreichen.

Nachdem ein Halbleiter mit einem kurzen Lichtimpuls aus dem Grundzustand angeregt wurde, durchläuft er verschiedene zeitliche Regime, bevor er in den Ausgangszustand zurückkehrt. Die zeitlichen Regime können in mehrere Bereiche unterteilt werden [1]. Zur

Trägerwellen Regime	Quantenkinetisches Regime	Nicht-thermalisiertes Regime	Regime heißer Ladungsträger	lsothermes Regime	
				Zeit t	
h/E _g	<200fs	<2ps	1-100ps	>100ps	

Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der verschiedenen zeitlichen Regime im Halbleiter. Die Zeitbereiche sind nicht scharf voneinander getrennt und sind auch vom Halbleitermaterial abhängig.

besseren Verständlichkeit sollen hier die verschiedenen zeitlichen Regime in umgekehrter zeitlicher Reihenfolge erläutert werden, siehe Abbildung 1.1. Es können fünf zeitliche Regime voneinander unterschieden werden. Lange Zeiten nach der optischen Anregung gelangt der Halbleiter wieder in den Grundzustand, indem er sein thermodynamisches Gleichgewicht erreicht. In diesem isothermen Regime rekombinieren die Ladungsträger im Halbleiter. Für Zeiten kleiner als etwa t = 100 ps befindet sich der Halbleiter im Regime heißer Ladungsträger, in dem die Energie und der Impuls der Ladungsträger im Wesentlichen durch die Wechselwirkung mit akustischen Phononen und anderen Ladungtsträger ausgetauscht wird. Die Verteilung der Ladungsträger kann mit einer Temperatur beschrieben werden. Für Zeiten kürzer als etwa t = 2 ps befindet sich der Halbleiter noch in einem nicht-thermalisierten Zustand, die Verteilung der Elektron-Loch Paare kann noch nicht durch eine Temperatur charakterisiert werden. In dieser Arbeit wird der optisch hochangeregte Halbleiter im kohärenten Regime untersucht, dies gilt für Zeiten, die kürzer sind als etwa t = 200 fs. Der Halbleiter befindet sich kurz nach der Anregung in einem extremen Nichtgleichgewichtszustand. Die angeregten Nichtgleichgewichtszustände besitzen in diesem Regime noch eine wohl definierte Phasenbeziehung zum anregenden Lichtfeld. Insbesondere Streumechanismen durch die Wechselwirkung von Ladungsträgern mit longitudinal optischen Phononen und die Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander zerstören die angeregte Kohärenz im Halbleiter. Für noch kürzere Zeiten, vergleichbar mit der inversen Bandlücke des Halbleiters, können Effekte der schnell oszillierenden Trägerwelle untersucht werden [2]. Jedes dieser Regime hat eines gemeinsam. Die Impulsdauer des Lasers muss zur Untersuchung der entsprechenden Effekte vergleichbar bzw. deutlich kürzer sein als die charakteristische Zeitdauer der vorherrschenden Mechanismen.

Den Zugang zu den beiden letztgenannten zeitlichen Regimen ermöglichte die Entwicklung leistungsstarker Festkörperlaser mit einer hohen Repetitionsrate von etwa 100 MHz und von Impulsdauern von circa 10 fs [3] sowie die sukzessive Weiterentwicklung, um Laserimpulse mit weniger als zwei optischen Zyklen bei circa 5 fs Impulsdauer zu erzeugen [4].

In den vergangenen Jahren entstanden viele Arbeiten auf dem Gebiet der nichtlinearen Halbleiterspektroskopie. So wurden Untersuchungen zur Kohärenz der angeregten Ladungsträger und der Zerfall dieser Kohärenz untersucht. Dabei konnte die beobachtete Oszillation der Interbandpolarisation als Überlagerungszustände der elektronischen Zustände identifiziert werden [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]. Experimente im quantenkinetischen Regime ermöglichen es, die endliche Dauer der Wechselwirkungsprozesse zu untersuchen. Dabei treten die quantenmechanischen Effekte wie die Energie-Zeit Unschärfe und die Welleneigenschaften der Teilchen zu Tage. Die endliche Dauer der Streuprozesse äußert sich in einer kohärenten Oszillation beispielsweise einer kombinierten Elektron-LO-Phonon Kohärenz, indem die Anregung für eine kurze Zeitspanne, der Gedächtniszeit, zwischen System und Bad hin und her oszilliert. Entsprechende Experimente zur Elektron-LO-Phonon Qunatenkinetik am Halbleiter GaAs im Regime der schwachen Fröhlich-Kopplung [12] konnten die dem exponentiellen Zerfall überlagerte Oszillation im Vierwellenmischsignal eindeutig als einen quantenkinetischen Effekt identifizieren. Mittels Kohärente Kontrolle konnte außerdem gezeigt werden, dass gezielt Anfangsbedingungen im Halbleiter präpariert werden und bereits begonnene Streuprozesse rückgängig gemacht werden können [13, 12, 14].

Bisher gab es nur wenige Experimente an hochangeregten Halbleitern im quantenkinetischen Regime, in dem die Ladungsträger-Ladungsträger Wechselwirkung die Ladungsträger-LO-Phonon Wechselwirkung dominiert. Zum einen liegt das an den benötigten kurzen Laserimpulsen, zum anderen war es bis vor kurzem nicht möglich, dieses quantenkinetische Regime adäquat durch eine Theorie beschreiben zu können. Eine weitere Problematik bestand in der Differenzierung zwischen dem angeregten System und dem Bad. Dies ist im Fall der Ladungsträger-Ladungsträger-Wechselwirkung nicht sofort ersichtlich. Das aus der Trennung von System und Bad resultierende nicht-Markovsche Verhalten wurde in Verschiedenen Arbeiten untersucht [15, 16]. Diese und auch frühe Experimente am Volumenhalbleiter GaAs und GaAs-Vielfachquantenfilmstrukturen [17, 18] wurden unter der Annahme eines bereits abgeschirmten Coulomb-Potentials untersucht [19]. Es wurde die wichtige Bedeutung des Aufbaus der Abschirmung zwar erkannt, aber dennoch wurden die Ergebnisse durch ein nicht abgeschirmtes Coulomb-Potential erklärt [16]. Erst durch die sukzessive Weiterentwicklung der Coulomb-Quantenkinetik, unter Berücksichtigung der Ladungsträger-LO-Phonon Wechselwirkung und des Aufbaus der Abschirmung für Zeiten, die kürzer sind als die inverse Plasmafrequenz, war es möglich, die hier gezeigten Experimente auch aus theoretischer Sicht zu erklären.

Die Arbeit ist wie folgt in vier Kapitel gegliedert. Zunächst wird auf die Eigenschaften der Halbleiter und auf die grundlegende quantenkinetische Beschreibung eingegangen. Danach werden der experimentelle Aufbau und die Wesentlichen Komponenten erläutert. Anschließend werden die experimentellen Ergebnisse am Halbleiter GaAs vorgestellt und diskutiert. Dabei werden diese Ergebnisse teilweise mit Ergebnissen einer quantenkinetischen Theorie verglichen, die in der Arbeitsgruppe um Prof. Haug (Universität Frankfurt) entstand. Im abschließenden Kapitel werden zusätzliche Experimente am Halbleiter CdTe vorgestellt und diskutiert.

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Eigenschaften der untersuchten Halbleiterproben vorgestellt. Es soll sowohl der Einfluss der Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander, als auch der Ladungsträger mit den longitudinal optischen Phononen unter verschiedenen Anregungsbedingungen auf das Dephasieren einer mit ultrakurzen Laserimpulsen angeregten kohärenten Polarisation untersucht werden. Mit einem phänomenologischen Ansatz werden zunächst die zu beobachtenden Effekte motiviert. Eine quantenkinetische Beschreibung wird anschließend die Experimente und deren Interpretation zugänglich machen. Die grundlegenden im Experiment verwendeten Techniken und Methoden werden zunächst theoretisch beschrieben. Alle Angaben beziehen sich, falls nicht besonders hervorgehoben, auf Raumtemperatur.

2.1 Halbleiter

In diesem Abschnitt wird auf die Eigenschaften der in dieser Arbeit verwendeten Halbleiter GaAs und CdTe eingegangen. Die Experimente wurden an intrinsischen Halbleitern durchgeführt. Halbleiter können als Festkörper in verschiedene Kategorien eingeteilt werden. Durch die große Dichte von Atomen im Festkörper, in der Größenordnung von 10^{23} cm⁻³ ergeben sich nahe beieinander liegende Energiezustände, die Bänder ausbilden. Bei T = 0 K wird das oberste vollständig gefüllte Band Valenzband und das unterste nicht gefüllte Band Leitungsband genannt. Diese sind durch eine Lücke, die Bandlücke, voneinander getrennt. Eine mögliche Klassifizierung der Halbleiter ist, neben einer Klassifizierung über den spezifischen Widerstand, über die Bandlücke möglich. Materialien mit einer Bandlücke größer als 4 eV werden als Isolatoren bezeichnet. Die Abgrenzung ist jedoch nicht scharf und so wird auch Diamant mit einer indirekten Bandlücke von 5.4 eV, gelegentlich als Halbleiter klassifiziert. Innerhalb der Halbleiter ist es sinnvoll, weitere Unterklassifizierungen einzuführen. Man kann die Halbleiter in indirekte und direkte Halbleiter unterteilen. Bei den direkten Halbleitern liegt das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes bei dem selben Wellenvektor k, der mit dem Γ -Punkt übereinstimmt. Er ist ein Punkt mit einer besonders hohen Symmetrie. Bei den indirekten Halbleitern liegen das Minimum des



Abbildung 2.1: Bandstruktur des III-V Halbleiters GaAs und des II-VI Halbleiters CdTe [21].

Leitungsbandes und das Maximum des Valenzbandes bei verschiedenen Wellenvektoren k und k'. Optische Übergänge werden nur dann möglich, wenn der benötigte Impulsübertrag beispielsweise durch ein Phonon aufgenommen werden kann. Sowohl GaAs als auch CdTe sind direkte Halbleiter. Die Kristallstruktur der untersuchten Halbleiter ist die Diamantstruktur. Das Kristallgitter besteht aus zwei unterschiedlichen Atomsorten, die um einen viertel Gittervektor entlang der Raumdiagonalen verschoben sind. Diese Struktur wird dann auch Zinkblendestruktur genannt. Bei Raumtemperatur beträgt die Gitterkonstante für GaAs 0.56533 nm und für CdTe 0.6481 nm. Die aus Bandstrukturrechnungen [20] erhaltene Bandstrukturen von GaAs und CdTe sind in der Abbildung 2.1 dargestellt. Die Bandstruktur von GaAs und CdTe sind im Γ -Punkt entartet. Die Kristallstruktur für die Zinkblendestruktur ist am Beispiel von GaAs in Abbildung 2.2 gezeigt.





2.1.1 Elektronische Eigenschaften

Die Halbleiter GaAs und CdTe kristallisieren in der Zinkblendestruktur mit der Punktgruppe T_d in der Schönfliesnotation. GaAs und CdTe besitzen somit kein Inversionszentrum. Hieraus ergibt sich auch für den Bindungsmechanismus der Kristallatome eine vergleichbare Struktur, in der die einen Tetraeder bildenden Atome durch vier σ -Bindungen gebunden sind. Die Bindung entsteht durch Überlapp der tetraedrisch ausgerichteten sp³ Hybridorbitale. Die Elektronenkonfiguration der beteiligten Elemente ist für Ga [Ar]4s²3d¹⁰4p¹. Ga hat somit drei Valenzelektronen von den s- und p-Schalen. Die Konfiguration von As ist [Ar]4s²3d¹⁰4p³, somit hat As fünf Valenzelektronen. Die Elektronenkonfiguration von Cd und Te ist [Kr]4d¹⁰5s² bzw. [Kr]4d¹⁰5s²5p⁴. Demnach besitzt Cd zwei Valenzelektronen und Te sechs Valenzelektronen. Anders als bei GaAs haben auch die weiter außen liegenden d-Orbitale und die daraus resultierende p-d Hybridisierung einen Einfluss auf die Bandstruktur von CdTe. Das d-Band liegt bei GaAs energetisch etwa 18.86 eV unterhalb des Valenzbandmaximums, während es bei CdTe etwa 10.49 eV sind. Die Beiträge des d-Bands haben somit einen deutlichen Einfluss und dürfen bei der Berechnung der elektronischen Bandstruktur nicht mehr vernachlässigt werden [23].

Aufgrund der sehr großen Anzahl von Kristallatomen kommt es zu einer gegenseitigen Beeinflussung der energetischen Zustände im Kristall und es bilden sich Bänder aus. Weiterhin führt die Hybridisierung der s- und p-Orbitale zu einer Aufspaltung der einzelnen Energieniveaus in gebundene und ungebundene Zustände. Der energetisch höhere ungebundene Energiezustand bildet das Leitungsband (LB), das s-artig ist, der energetisch tiefere gebundene Energiezustand das Valenzband (VB), das p-artig ist. Aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung wird die Entartung des Valenzbandes am Γ -Punkt reduziert, indem eines der drei Valenzbänder um den Energiebetrag Δ_{SO}^{1} zu kleineren Energien verschoben wird, das sogenannte SO-Band, welches zweifach entartet ist und die Symmetrie Γ_7 besitzt. Die beiden anderen Valenzbänder sind dann im Γ -Punkt vierfach entartet und besitzen die Symmetrie Γ_8 . Im Weiteren ist hierdurch der Eigendrehimpuls bzw. der Bahndrehimpuls keine gute Quantenzahl mehr, vielmehr ist diese jetzt der Gesamtdrehimpuls. Somit kann das schwere Loch mit $(J = 3/2; m_{\rm J} = -3/2, 3/2)$, das leichte Loch mit $(J = 3/2; m_{\rm J} = -1/2, 1/2)$ und das SO-Band mit ($J = 1/2; m_J = -1/2, 1/2$) charakterisiert werden. Die Spin-Bahn Aufspaltung beträgt für GaAs $\Delta_{SO} = 0.341 \text{ eV}$ und für CdTe $\Delta_{SO} = 0.9 \text{ eV}$. Die Entartung des Valenzbandes ist für $\mathbf{k} \neq 0$ aufgehoben. Das Leitungsband besitzt die Symmetrie Γ_6 und ist ebenfalls zweifach entartet. Die Form der Bänder kann in der Nähe des Γ -Punktes in guter Näherung als parabelförmig angenommen werden. Eine genauere Betrachtung zeigt jedoch, dass die Bänder eine Asymmetrie aufzeigen. Die Krümmung der Bänder ist im Allgemeinen unterschiedlich und kann stark variieren, auch zwischen verschiedenen Halbleitern. Das Valenzband mit der kleineren Krümmung wird als schweres Loch Band und das mit der größeren Krümmung als leichtes Loch Band bezeichnet. Die aus der Krümmung resultierende effektive Masse der Ladungsträger in den entsprechenden Bändern sind wegen einer

¹SO: engl. Splitt Off Band (Spin-Bahn abgespaltene Band)



Abbildung 2.3: Schematischer Aufbau der Typ I und Typ II Vielfachquantenfilmstrukturen.

besseren Übersichtlichkeit im Anhang detailliert aufgeführt. Eine ausführliche Diskussion der Eigenschaften von GaAs ist in dem Artikel von Blakemore [24] zu finden.

Neben den oben beschriebenen Eigenschaften der Volumen-Halbleiter wurden auch Messungen an zweidimensionalen Halbleiterheterostrukturen durchgeführt, die auf der Basis von Al_xGa_{1-x}As und GaAs epitaktisch gewachsen wurden. Mit dieser Materialwahl werden Vielfachquantenfilme vom Typ I gewachsen. Einen Überblick zu den verschiedenen Quantenfilmtypen gibt die Abbildung 2.3. Al_xGa_{1-x}As wird oberhalb von einem Aluminiumgehalt von 45 % (x = 0.45) zu einem indirekten Halbleiter. Die Gitterkonstante von Al_xGa_{1-x}As ist durch

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}[\text{nm}] = 0.56533 + 0.00078 \,x \tag{2.1}$$

gegeben [25]. Für Al_{0.3}Ga_{0.7}As erhält man somit 0.56556 nm, was im Vergleich zu GaAs um 0.0413 % größer ist. Es liegt somit ein pseudomorphes Wachstum der Vielfachquantenfilme vor und es können Verspannungen vernachlässigt werden. Durch die Quantisierung im zweidimensionalen Quantentrog ist im Γ -Punkt die vierfache Entartung von schwerem Loch und leichtem Loch aufgehoben. Bei Vielfachquantenfilmen muss das Barrierenmaterial so dick sein, dass die Wellenfunktionen der Ladungsträger benachbarter Quantenfilme nicht überlappen, da es sonst zur Ausbildung von Bändern kommen würde. Diese Bänder werden auch als Minibänder bezeichnet. Beim Wachstum der Halbleiterproben treten bei der Verwendung von verschiedenen Halbleitermaterialien Effekte auf, auf die hier eingegangen werden soll. Die Halbleiterproben werden üblicherweise auf ein kristallines Material gewachsen, das eine wohl definierte Orientierung aufzeigt. Die Volumen- und Quantenfilmproben aus GaAs wurden auf ein GaAs-Substrat gewachsen. Ziel bei dem Wachstum der Probe ist es, eine möglichst hohe Qualität der Probe zu erreichen. Die Eigenschaften der Probe sind sehr abhängig von der Homogenität des Substrates, den mechanischen Größen wie der Gitterkonstante und der Wachstumsrichtung. Die Wachstumsrichtung kann durch die Orientierung des Substrates beeinflusst werden. Alle Proben sind in der [001]-Orientierung gewachsen. Die Gitterkonstante wird durch die verwendeten Materialen und deren Zusammensetzung beeinflusst. Die Halbleitersysteme AlAs und GaAs zeigen gerade bezüglich der Mischbarkeit und der Abhängigkeit der Gitterkonstante vom Mischungsverhältnis hervorragende Eigenschaften. Ein sehr wichtiger Punkt ist hierbei, dass die Gitterkonstanten der beiden Materialien auch für verschiedene Mischungsverhältnisse sehr ähnlich sind. Verspannungen im Material durch unterschiedliche Gitterkonstanten können somit praktisch vernachlässigt werden. Ein weiterer Punkt ist, dass die Bandlücke von AlAs größer ist als die von GaAs und durch das



Abbildung 2.4: Übersicht ausgewählter III-V und II-VI Halbleiter aus [26, 27, 28].

Mischungsverhältnis nahezu beliebig eingestellt werden kann [25]:

$$E_{\rm g}({\rm Al}_x {\rm Ga}_{x-1} {\rm As})[{\rm eV}] = 1.424 + 1.247 \, {\rm x}; (0 \le {\rm x} \le 0.45) \,.$$
 (2.2)

Das bedeuted, dass solche Strukturen Experimente in Transmission zulassen, da Al_{0.3}Ga_{0.7}As mit 1.786 eV eine größere Bandlücke als GaAs mit 1.420 eV aufzeigt und daher transparent für die Photonenenergien von 1.5 eV ist. Für die Experimente an CdTe ist die Situation deutlich ungünstiger. Die Abbildung 2.4 zeigt für einige III-V und II-VI Halbleiter die Bandlücken und Gitterkonstanten bei Raumtemperatur. Hier steht kein Material mit einer vergleichbaren Gitterkonstante und einer größeren Bandlücke zur Verfügung, auf das die CdTe-Probe gewachsen werden könnte. Die CdTe-Halbleiterprobe wurde aus diesem Grund auf ein Substrat aus einem ZnTe Einkristall aufgewachsen, das ebenfalls die [001]-Orientierung aufzeigt. ZnTe besitzt die gleiche Kristallstruktur wie CdTe, was dem Wachstum zugute kommt. Zudem wird CdTe bereits routinemäßig auf ZnTe bzw. CdZnTe aufgewachsen [29, 30, 31]. Leider besitzt ZnTe mit $a_{\text{ZnTe}} = 0.61037 \,\text{nm}$ eine deutlich kleinere Gitterkonstante als CdTe mit $a_{CdTe} = 0.6481 \, \text{nm}$. Dies hat für das Wachstum entscheidende Folgen. Durch die Gitterfehlanpassung von $\Delta a/a = 6.8\%$ in CdTe und ZnTe kommt es zunächst in CdTe zur biaxialen Kompression des Gitters. In den Arbeiten von Cibert und Riesz [32, 30, 33] wird an CdTe/ZnTe- sowie ZnTe/CdTe-Heterostrukturen die kritische Schichtdicke für eine vollständige Relaxation über einen weiten Bereich und für verschiedene Kristallorientierungen untersucht. Es wird gezeigt, dass die kritische Schichtdicke für das System CdTe/ZnTe unterhalb von fünf Monolagen liegt. In der Arbeit von Riesz wird die kritische Schichtdicke für die $[01\overline{1}]$ -Orientierung kleiner als eine Monolage bestimmt. Für typische Probendicken bei Volumen-Halbleitern von 1000 Monolagen kann daher von einem vollkommen relaxierten Wachstum ausgegangen werden.

2.1.2 Lineare optische Eigenschaften

Die Wechselwirkung von Licht mit Materie wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben. In dielektrischen Materialien wie beispielsweise die untersuchten intrinsischen Halbleiter CdTe und GaAs, die nicht magnetisch sind, können die Maxwell-Gleichungen vereinfacht werden und führen zur bekannten Wellengleichung:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \ddot{\mathbf{E}} = \mu_0 \ddot{\mathbf{P}} \,. \tag{2.3}$$

Gleichung (2.3) besagt, dass jeder Dipol p und jede Polarisation P mit einer nicht verschwindenden zweiten Ableitung in der Zeit eine elektromagnetische Welle abstrahlt. Die Kopplung von elektrischem Feld und makroskopischer Polarisation wird durch $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ beschrieben. Die makroskopische Polarisation \mathbf{P} kann im perturbativen Regime nach Potenzen des elektrischen Feldes \mathbf{E} entwickelt werden und lässt sich wie folgt darstellen:

$$\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{P}(\omega) = \chi^{(1)}(\omega) \mathbf{E} + \chi^{(2)}(\omega) \mathbf{E}^2 + \chi^{(3)}(\omega) \mathbf{E}^3 + \chi^{(4)}(\omega) \mathbf{E}^4 + \chi^{(5)}(\omega) \mathbf{E}^5 + \dots$$
(2.4)

Wird diese Entwicklung bereits nach dem ersten Glied abgebrochen, so besteht ein linearer Zusammenhang zwischen elektrischem Feld und makroskopischer Polarisation. Diese Näherung ist dann zulässig, wenn das elektrische Feld nicht zu stark ist. Die Größe $\chi^{(1)}(\omega)$ wird als lineare dielektrische Suszeptibilität bezeichnet. Sie ist im Allgemeinen ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe, der für kubische Kristalle, wie sie hier vorliegen, zu einem Skalar entartet ist. Wie bereits beschrieben, kommt es im Halbleiter zur Ausbildung von Bändern. Wird ein Elektron in das Leitungsband angeregt, so verspürt es das Potential der periodisch angeordneten Kristallatome. Gleichzeitig verbleibt im Valenzband ein Loch. Die Eigenfunktion $\phi_n(\mathbf{r})$ des Elektron-Loch Systems kann durch die Schrödingergleichung beschrieben werden:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m_{\mathbf{r}}} + V(\mathbf{r})\right] \phi_n(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}).$$
(2.5)

Diese Gleichung beschreibt die relative Bewegung des angeregten Elektron-Loch-Paars, das nur mit sich selbst wechselwirkt, ohne äußere Wechselwirkung. Das Elektron-Loch-Paar wird auch als Exziton bezeichnet, welches formal die gleiche Beschreibung hat wie das Wasserstoffatom bzw. das Positronium. In diesem Zusammenhang wird die Gleichung (2.5) auch als Wannier-Mott-Gleichung bezeichnet [22]. Das Zwei-Teilchen-Problem ist hierbei durch die Verwendung relativer Koordinaten $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{\rm e} - \mathbf{r}_{\rm h}$ auf ein Ein-Teilchen-Problem reduziert worden. Hierbei wird die reduzierte Masse $\frac{1}{m_{\rm r}} = \frac{1}{m_{\rm e}} + \frac{1}{m_{\rm h}}$ mit den effektiven Massen der Ladungsträger im Valenzband $m_{\rm h}$ und Leitungsband $m_{\rm e}$ eingeführt. Das Wechselwirkungspotential $V(\mathbf{r})$ ist durch die Coulomb-Wechselwirkung gegeben. Die Wellenlänge des anregenden Lichtes ist wesentlich größer als die Gitterkonstante des Halbleiters, was gleichbedeutend ist mit der Aussage, dass der Impulsübertrag durch das Photon näherungsweise