

Phononen in II-VI-Halbleiter-Nanostrukturen

Optische Spektroskopie an einzelnen Nanokristallen und Nanopartikel-Ensembles





Phononen in II-VI-Halbleiter-Nanostrukturen

Optische Spektroskopie an einzelnen Nanokristallen und Nanopartikel-Ensembles

> Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades des Departments Physik der Universität Hamburg

> > vorgelegt von

Gerwin Chilla aus Hamburg

> Hamburg 2009

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

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

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2009 Zugl.: Hamburg, Univ., Diss., 2009

978-3-86955-140-1

Gutachter der Dissertation:	Prof. Dr. D. Heitmann Prof. Dr. A. Mews
Gutachter der Disputation:	Prof. Dr. D. Heitmann Prof. Dr. S. Förster
Datum der Disputation:	16. Oktober 2009
Vorsitzender des Prüfungsausschusses:	Dr. T. Kipp
Vorsitzender des Promotionsausschusses:	Prof. Dr. R. Klanner
Dekan der Fakultät für Mathematik, Informatik	

und Naturwissenschaften:

Prof. Dr. H. Graener

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2009 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, 2009 Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-86955-140-1

Inhaltsangabe

In dieser Arbeit werden Phononen in nasschemisch synthetisierten sphärischen Nanokristallen und Tetrapods aus II-VI-Verbindungshalbleitern mittels verschiedener optischer Messverfahren untersucht. Ziel ist es erstens, Photolumineszenz-Prozesse in einzelnen Core/Shell- und Core/Shell-Nanokristallen und zweitens, Raman-Streuprozesse in CdTe-Nanopartikeln zu detektieren.

Den Kern der Untersuchungen bilden optische und akustische Phononen, die sich auf Grund der hohen Stabilität der hier gezeigten einzelnen CdSe-Nanokristalle in den Photolumineszenz-Spektren nachweisen lassen. Einzelne Phononen können confined akustischen Moden zugeordnet werden. Die für die Nanokristalle typischen Effekte Blinking und spektrale Diffusion werden anhand von konsekutiv aufgenommenen Photolumineszenz-Spektren diskutiert. Die intensitätsstärkste Linie in den Spektren der einzelnen Nanokristalle bildet die Dark-State-Zero-Phonon-Line. Eine Nebenlinie kann auf Rekombinationen aus einem Bright-State zurückgeführt werden. Im Rahmen des Modells nach Lamb [Lam82] werden drei sphärische akustische Moden bestimmt. Sowohl das LA-Phonon als auch das LO-Phonon des CdSe-Cores lassen sich nachweisen. Zusätzlich können LO-Phononen der CdS- und der ZnS-Shell identifiziert werden.

Durch Polymerfilme wird eine definierte Umgebung für die CdSe-Nanokristalle auf dem Si-Substrat geschaffen. Es werden Photolumineszenz-Messungen an einzelnen Nanokristallen gezeigt, die jeweils bis zu ca. 4.5 Stunden (reine Beleuchtungszeit: ca. 2 Stunden) durchgeführt werden konnten. Die verhältnismäßig intensitätsschwachen Phonon-Signale der einzelnen Nanokristalle werden über aufsummierte Einzelspektren ausgewertet.

Den Untersuchungen an einzelnen Nanokristallen gehen Photolumineszenz-Messungen an InAs-Quantenpunkten, die in Heterostrukturen eingebettet sind, voran. In den Spektren konnten Signaturen einzelner InAs-Quantenpunkte nachgewiesen werden.

Die Raman-Spektren der CdTe-Tetrapods und der sphärischen CdTe-Nanokristalle zeigen ebenfalls optische Phononen. Diese Proben wurden im Ensemble gemessen. Neben dem CdTe-LO-Phonon und seiner ersten Oberschwingung werden bei beiden Probenarten SO-Phononen nachgewiesen. Ferner kann eine Anregung in den Tetrapods durch einen Vergleich mit Rechnungen zu Nanowires (vgl. [Mah03]) als TO_x -Phonon interpretiert werden. Die Analyse der Spektren von CdTe-Tetrapods und von sphärischen CdTe-Nanokristallen geben Aufschluss über elektronische Übergänge in den Nanopartikeln. Demzufolge wird geschlussfolgert, dass sich Raman-Spektren zur Differenzierung von Tetrapods mit gut ausgebildeter geometrischer Struktur und Tetrapods mit im Verhältnis zum Kern kurzen Armen eignen.

Abstract

Phonons in wet-chemical synthesised spherical nanocrystals and tetrapods of II-VI compound semiconductors are investigated.

Using different optical measuring methods, it is firstly aimed at detecting photoluminescence processes in single core/shell and core/shell/shell nanocrystals. Secondly, Raman scattering processes in CdTe nanoparticles are documented.

The main focus of the investigations is optical and acoustical phonons. The phonons are detected in the photoluminescence spectra due to the high stability of the single CdSe nanocrystals. Single phonons are related to confined acoustical modes. Furthermore, nanocrystal-typical effects as blinking and spectral diffusion are discussed by means of consecutively recorded photoluminescence spectra. The Dark-State-Zero-Phonon-Line is the line of highest intensity in the spectra of single nanocrystals. A sideline can be accounted for by recombination from the Bright-State. Based on a model by Lamb [Lam82], three spherical acoustical modes are identified. Both the LA phonon and the LO phonon of the CdSe cores are observed. Moreover, the LO phonons of the CdSe and the ZnS shell are identified.

Polymer films offer a defined environment for CdSe nanocrystals on Si substrate. Spectra from measurements on single nanocrystals of approximately 4.5 hours period (exposure time approximately 2 hours) are presented. Phonon signals of single nanocrystals with a comparatively weak intensity are analyzed by summarized spectra.

Ahead, investigations of InAs quantum dots, embedded in heterostructures, are presented. In these spectra, signatures of single InAs quantum dots are detected.

Likewise, in the Raman spectra of CdTe tetrapods and of the spherical CdTe nanocrystals optical phonons appear. These spectra are taken in ensembles. The findings reveal not only the CdTe phonon and its first harmonic, but also SO phonons. Comparing the results to nanowire-calculations in [Mah03], one excitation is interpreted as TO_x phonon. A further analysis of the CdTe tetrapod and spherical CdTe nanocrystal spectra gives information about electronically transitions in nanoparticles. It is concluded that Raman spectra qualify for differentiating between tetrapods with a well-constructed structure and those with short arms in proportion to the core.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung		1
2	Opti	ische Sp	ektroskopie an Nanostrukturen	5
	2.1	Photol	umineszenz-Spektroskopie	5
	2.2	Raman	-Spektroskopie	7
	2.3	Experi	menteller Aufbau	9
	2.4	Präpara	ation der Proben	11
		2.4.1	Proben für Ensemble-Spektroskopie	11
		2.4.2	Proben für Spektroskopie an einzelnen CdSe-Nanokristallen	12
	2.5	Nassch	emische Synthese von Nanopartikeln	14
3	Hall	oleiter-N	Vanopartikel	17
	3.1	Sphäris	sche CdSe-Nanokristalle	18
		3.1.1	Spektrale Diffusion	19
		3.1.2	Blinking	21
		3.1.3	Ausbleichen	24
	3.2	CdTe-1	Nanopartikel	26
4 Phononen				29
	4.1	Optisc	he Phononen in Nanopartikeln	31
	4.2	Phonor	nen in sphärischen Nanokristallen	32
5	Phot	tolumin	eszenz-Spektroskopie an InAs-Quantenpunkten	35
-	5.1	Herstel	llung von Halbleiter-Quantenpunkten mittels MBE	35
	5.2	Photol	umineszenz-Spektroskopie an InAs-Quantenpunkten	37
		5.2.1	Vorgehensweise für die Untersuchungen an InAs-Quantenpunkten	37
		5.2.2	Ergebnisse der Untersuchungen an InAs-Quantenpunkten	39
6 Ergebnisse			45	
	6.1	Photol	umineszenz-Spektroskopie an einzelnen CdSe-Nanokristallen	45
		6.1.1	Einzelne CdSe-Nanokristalle im Überblick	46
		6.1.2	Spektrale Diffusion und Blinking	52
		6.1.3	Nebenlinien der Zero-Phonon-Line	61
	6.2	Raman	-Spektroskopie an CdTe-Nanopartikeln	77
		6.2.1	CdTe-Tetrapods und sphärische CdTe-Nanokristalle im Überblick	78
		6.2.2	Resonanzmessungen an CdTe-Tetrapods	80
		6.2.3	CdTe-Tetrapods und sphärische CdTe-Nanokristalle im Vergleich	88

7 Zusammenfassung und Ausblick	97
Literaturverzeichnis	101
Anhang	109
Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge	113

Kapitel 1

Einleitung

In dieser Arbeit werden Nanostrukturen aus II-VI-Verbindungshalbleitern mittels optischer Spektroskopie untersucht, die durch nasschemische Synthese oder MBE (<u>M</u>olecular <u>b</u>eam <u>e</u>petaxy engl. für Molekularstrahlepitaxie) hergestellt wurden. Den Kern der vorliegenden Untersuchung bildet die Photolumineszenz-Spektroskopie an einzelnen sphärischen CdSe-Nanokristallen, wobei sowohl optische und als auch akustische Phononen in einzelnen sphärischen CdSe-Nanokristallen detektiert und analysiert werden. Diese Ergebnisse werden durch Messungen von Phononen in CdTe-Tetrapods und sphärischen CdTe-Nanokristallen mittels Raman-Spektroskopie an Ensembles ergänzt.

Die geringen Abmessungen von Halbleiter-Nanostrukturen führen sowohl bei Elektronen als auch bei Phononen zur Quantisierung der energetischen Zustände. Beide Effekte lassen sich mittels optischer Spektroskopie untersuchen. In der vorliegenden Arbeit werden Quantenpunkte untersucht, die mit verschiedenen Verfahren hergestellt wurden. Nasschemisch synthetisierte Quantenpunkte werden als *sphärische Nanokristalle* bezeichnet, wohingegen Quantenpunkte, die mittels Molekularstrahlepitaxie gewachsen wurden, auch *Quantenpunkte* genannt werden. Diese Unterscheidung entspricht der in der Literatur gebräuchlichen. Weiter werden nasschemisch synthetisierte Tetrapods und sphärische Nanokristalle mittels des Oberbegriffes *Nanopartikel* zusammengefasst.

Halbleiter-Nanopartikel bieten eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten, die sich von Markern für biologische Systeme über den Einsatz in Leuchtdioden (LEDs), bis hin zur Solarstrommodul-Herstellung erstrecken.

Im Vergleich zu Markern aus konventionellen Fluoreszenzfarbstoffen zeichnen sich Nanopartikel durch eine energetisch schmale Emission aus. Die Wellenlänge der Nanopatrikelmarker ist im gesamten sichtbaren Spektralbereich über die Größe der Partikel einstellbar. Das Absorptions-Spektrum eines Nanopartikels ist in Relation zu dem herkömmlicher Fluoreszenzfarbstoffe sehr breit, so dass man die Wellenlänge des anregenden Lichts über einen großen Bereich frei wählen kann. Dadurch kann man mit dem Licht einer Wellenlänge gleichzeitig verschieden große Nanopartikel anregen, die bei unterschiedlichen Wellenlängen emittieren. Aufgrund der energetisch schmalen Emission lassen sich verschieden große Partikel im selben biologischen System differenziert detektieren, so dass die Möglichkeit gegeben ist, simultan mit unterscheidbaren Partikeln zu markieren. Ferner sind die Nanopartikel bezüglich ihrer Emission stabiler als konventionelle Farbstoffe. Verglichen mit letzteren bestehen sie deutlich mehr Beleuchtungszyklen ohne stark zu verblassen [Bru98, Kla01].

Als eine weitere Anwendung werden mit Halbleiternanopartikeln organisch/anorganische Hybrid-LEDs realisiert. Durch Elektrolumineszenz emittiert eine einige Nanometer dünne Schicht aus Nanopartikeln das Licht der LEDs. Die Nanopartikelschicht befindet sich zwischen zwei Elektroden, die beim Anlegen einer Spannung freie Ladungsträger abgeben. Eine der Elektroden besteht üblicherweise aus Aluminium und setzt die Elektronen frei, die zweite ist aus ITO (Indium tin oxide, engl. für Indium-Zinn-Oxid) und stellt die Löcher zur Verfügung. Die freien Ladungsträger rekombinieren strahlend in den Nanopartikeln. Letztere werden von der ITO-Anode durch eine organische Schicht aus einem Polymer wie z.B. Poly(p-Phenylen-Vinylen) (PPV) oder Poly(3,4-Ethylendioxythiophen) (PEDOT) als HTL (Hole transport layer, engl. für Lochleiterschicht) getrennt. So wird das Ablaufen der Elektronen über die ITO-Anode unterdrückt. Das Abfließen der Elektronen würde die Intensität des emittierten Lichts, dessen Energie sich über die Größe der Nanopartikel einstellen lässt, verringern. Allerdings wird in der Literatur berichtet, dass ein Anteil der Ladungsträger auch in der HTL rekombinieren und zu einer Emission führen kann [Mat98, Mat99].

Des Weiteren beginnt die Photovoltaik-Branche, Nanopartikel einzusetzen. So hat zum Beispiel die Firma Nanosolar ein Verfahren zur Herstellung von Solarzellen entwickelt, bei dem Nanopartikel als Ausgangsmaterial für den Absorber verwendet werden. Als Absorber wird die Schicht bezeichnet, in der die freien Ladungsträger erzeugt werden, die letztendlich die elektrische Leistung einer Solarzelle ermöglichen. Bei dem Verfahren der Firma Nanosolar werden Nanopartikel in Lösung wie Tinte auf einen Träger gedruckt. Als Substratmaterial wird zur Zeit Glas verwendet. Mittels eines Heizprozesses entsteht aus den Nanopartikeln die Halbleiter-Schicht Cu(InGa)Se₂, auch CIGSe genannt. Das CIGSe fungiert als photoaktive Schicht der Dünnschicht-Solarzellen und stellt eine Alternative zum konventionell verwendeten kristallinen Si sowie dem ebenfalls für Dünnschicht-Solarzellen verwendeten amorphen Si dar [Lie08, Ber07]. CIGSe-Dünnschicht-Solarmodule zeichnen sich durch einen höheren Wirkungsgrad als die Dünnschicht-Solarmodule, die auf amorphen Si basieren, aus. Des Weiteren stellt die Herstellungsmethode der Firma Nanosolar ein sehr kostengünstiges Verfahren dar, so dass sie ein neues konkurenzfähiges Produkt auf den Markt bringen könnte.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, Photolumineszenz-Spektren einzelner sphärischer Nanokristalle zu detektieren. Seit Mitte der 1990er Jahre werden einzelne, nasschemisch synthetisierte Nanokristalle optisch spektroskopiert [Bla96, Emp96, Har96, Nir96, Tit97]. Für die Experimente der vorliegenden Arbeit wurden zwei unterschiedliche Typen von Nanokristallen genutzt, die sich in ihrem Aufbau unterscheiden. Der eine Typ besteht aus einem Core, der mit zwei Shells ummantelt ist, der andere ist durch das Fehlen der zweiten Shell gekennzeichnet. Die Verwendung beider Typen ermöglicht es, Prozesse, die bei einem der Typen auftreten, anhand des anderen Typs zu überprüfen. So wird kontrolliert, ob die Phänomene für einen konkreten Typ spezifisch sind und es besteht die Möglichkeit zu überprüfen, welche Vorgänge in den Nanokristallen eines Typs auf Nanokristalle anderer Typen übertragbar sind. Anhand der Photolumineszenz-Spektren werden für nasschemisch synthetisierte Nanokristalle typische Effekte wie spektrale Diffusion und Blinking diskutiert. In den Photolumineszenz-Spektren zeigen sich Phononmoden als Satelliten der Photolumineszenz-Linie. Neben LO- und LA-Phononen werden Spektren vorgestellt, die confined (engl. für eingeschlossen) akustische Phononmoden zeigen.

In Kapitel 2 werden zunächst die verwendeten Messverfahren vorgestellt. Nach einer theo-

retischen Fundierung der vorliegenden Arbeit in Kapitel 3, bei der ein besonderer Schwerpunkt auf den für sphärischen Nanokristallen charakteristischen Effekten liegt, werden in Kapitel 4 Phononen in Halbleitern und Halbleiter-Nanopartikeln betrachtet. Vor der Photolumineszenz-Spektroskopie an einzelnen CdSe-Nanokristallen werden mit InAs-Quantenpunkten III-V-Halbleitersysteme untersucht (Kapitel 5). Ziel dieser Messungen ist es, die Möglichkeiten für die optische Spektroskopie einzelner Quantenpunkte und Nanokristalle mit dem vorhandenen Versuchsaufbau einzuschätzen. Da die Photolumineszenz-Spektroskopie an InAs-Quantenpunkten nicht den Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit bildet, wurden die Untersuchungen weniger detailliert durchgeführt, so dass eine Auswahl von Ergebnissen präsentiert wird. Die InAs-Quantenpunkt-Proben wurden in der Forschungsgruppe von Herrn Prof. Dr. Hansen am Institut für Angewandte Physik der Universität Hamburg hergestellt.

Die in den folgenden Ausführungen (Kapitel 6.1) vorgestellten CdSe-Nanokristall-Proben und die dazugehörigen Untersuchungsergebnisse sind im Rahmen einer Kooperation zwischen den Forschungsgruppen von Herrn Prof. Dr. Weller und Herrn Prof. Dr. Förster am Institut für physikalische Chemie und Herrn Prof. Dr. Heitmann am Institut für Angewandte Physik an der Universität Hamburg entstanden. Die Kooperation fand innerhalb des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Sonderforschungsbereichs (SFB) 508 "Quantenmaterialien - laterale Strukturen, hybride Systeme und Cluster" zwischen den Teilprojekten A5 "Raman- und Photolumineszenz-Spektroskopie an Quantenpunkten" (Leitung: Herr Dr. Kipp und Herr Prof. Dr. Heitmann), C1 "Synthese und Spektroskopie von III-V-Halbleiter-Nanoclustern" (Leitung: Herr Prof. Dr. Weller) und C6 "Einbettung von Halbleiterclustern in strukturierte Polymere" (Leitung: Herr Prof. Dr. Förster) statt. Verschiedene Aspekte der vorliegenden Arbeit wurden in [Chi08] veröffentlicht. Mein besonderer Dank gilt Frau Dr. Nikolić für die Synthetisierung der sphärischen CdSe-Nanokristalle und Herrn Dr. Frömsdorf für das Einbetten der CdSe-Nanokristalle in Polymerfilme.

Im Zentrum der vorliegenden Untersuchung wird gezeigt, dass sich auf Grund der hohen Stabilität der Nanokristalle nicht nur optische Phononen, sondern auch akustische Phononen in den Spektren einzelner CdSe-Nanokristalle nachweisen lassen. Durch Rechnungen werden die Phononen confined akustischen Moden zugeordnet. Neben der Dark-State-Zero-Phonon-Linie werden Rekombinationen aus dem energetisch nächst höheren Bright State identifiziert.

Die Photolumineszenz-Messungen an einzelnen sphärischen CdSe-Nanokristallen werden durch Raman-Spektroskopie an CdTe-Nanopartikeln im Ensemble erweitert (Kapitel 6.2). Im Rahmen einer Kooperation mit Herrn Dr. Krahne und der NanoChemistry Division (Leitung: Herr Manna, PhD) des National Nanotechnology Laboratory (Director: Herr Prof. Cingolani, PhD) der Universität Lecce (Italien) finden Untersuchungen an CdTe-Tetrapods und sphärischen CdTe-Nanokristallen statt (vgl. auch [Kra06a, Kra06b]). Als Tetrapods bezeichnet man Strukturen aus vier Armen, die sich in einem gemeinsamen Zentrum treffen. Die Tetrapodarme laufen dabei mit dem gleichen Winkel (109.5°) zueinander im Zentrum zusammen. Die Raman-Spektroskopie an Nanopartikel-Ensembles ist eine Methode, die die vorliegenden Untersuchungen an einzelnen Nanokristallen ergänzt, da auch Raman-Spektren Phonon-Signaturen zeigen können. Für die Interpretation der Raman-Messungen werden Absorptions- und Photolumineszenz-Messungen und Berechnungen des Huang-Rhys-Parameters hinzugezogen, die dieser Kooperation entstammen. Die Raman-Spektren der Tetrapods sollen Auskunft über Streuprozesse innerhalb der Strukturen

geben und Unterschiede zu sphärischen Nanokristallen aufzeigen. Des Weiteren sollen für die Nanopartikel charakteristische Phononen untersucht werden.

Die Arbeit schließt mit einem Ausblick, in dem Perspektiven für künftige Untersuchungen aufgezeigt werden.

Kapitel 2

Optische Spektroskopie an Nanostrukturen

In dieser Arbeit werden Photolumineszenz- und Raman-Spektroskopie zur Untersuchung von Halbleiter-Nanostrukturen eingesetzt. Diese Methoden bieten gegenüber der Absorptions- und der Transmissionsspektroskopie den Vorteil, dass das Messsignal in der gleichen Richtung detektiert werden kann wie das anregende Licht eingekoppelt wird. Für die Absorptions- und die Transmissionsspektroskopie hingegen muss das Licht die Probe passieren. Dies erfordert beispielsweise bei mittels MBE hergestellten Proben wie den in dieser Arbeit untersuchten InAs-Quantenpunkten häufig ein Dünnen der Proben, damit nicht zu viel Licht vom Substratmaterial absorbiert wird.

In diesem Kapitel zunächst Photolumineszenz- und die Raman-Spektroskopie allgemein erläutert. Ferner werden die für die optische Spektroskopie wichtige Präparation der Proben und der Versuchsaufbau beschrieben. Bei den untersuchten Halbleiter-Nanostrukturen handelt es sich um nasschemisch synthetisierte Partikel, die zunächst in Lösung vorliegen.

Ziel der vorliegenden Untersuchung ist die Spektroskopie einzelner Nanokristalle. Für die Messungen werden die Nanokristalle in verdünnter Lösung auf ein Substrat aufgebracht und die Probe in einem Kryostaten montiert. Die Nanokristalle sollten auf der Substratoberfläche einen hinreichend großen Abstand zueinander haben, damit sie einzeln spektroskopiert werden können. Da Nanokristalle leicht Agglomerate bilden, ist der dazugehörige Präparationsschritt anspruchsvoll. Die im Vergleich zu Ensemble-Linien kleinen Signal-Intensitäten stellen hohe Anforderungen an die verwendeten Versuchsapparaturen.

2.1 Photolumineszenz-Spektroskopie

Die Photolumineszenz-Spektroskopie ermöglicht es, elektronische Zustände in Halbleitern zu untersuchen. Hierzu wird das Halbleitermaterial mit Laserlicht bestrahlt, dessen Energie größer als die Bandlücke des Halbleiters ist. Das von dem Halbleiter emittierte Licht wird spektral zerlegt detektiert. In diesem Abschnitt wird veranschaulicht, wie die Photolumineszenz-Spektroskopie auf Quantenpunkte angewandt wird. Da die Ausführungen auch für die sphärischen Nanokristalle gelten, wird hier nicht zwischen Quantenpunkten und Nanokristallen differenziert.

Halbleiter-Quantenpunkte zeichnen sich durch einen Potenzialeinschluss in allen drei Raumrichtungen aus. Durch diesen Potenzialtopf bilden sich diskrete Energie-Zustände aus. Abbildung 2.1 zeigt die Übergänge von Elektron und Loch zwischen den Energieniveaus eines Quantenpunktes, wie sie bei der Photolumineszenz-Spektroskopie stattfinden.



Abbildung 2.1: Der Photolumineszenz-Prozess im Einteilchenbild am Beispiel eines Quantenpunktes. Die drei Schritte zeigen die Absorption eines Photons (1.), die Relaxation von Elektron und Loch zur Bandkante (2.) und die Rekombination des Elektron-Loch-Paares (3.).

Der Photolumineszenz-Prozess ist dreistufig. Im ersten Schritt entsteht ein Elektron-Loch-Paar, indem ein Elektron durch das anregende Laserlicht vom Valenzband-Niveau auf ein Leitungsband-Niveau gehoben wird. Das angeregte Elektron und das auf einem Valenzband-Niveau entstandene Loch relaxieren anschließend zu den Niveaus der Bandkanten. Dabei geben sie die entsprechenden Energien an Phononen ab. Anschließend rekombiniert das Elektron-Loch-Paar unter Aussendung eines Photons. Die Energie des Photons entspricht dem Abstand der Energieniveaus von Elektron und Loch. Dieser Abstand addiert sich in erster Näherung aus der Bandlücke und der Quantisierungesenergie des Elektrons und der des Lochs. Ein typischer Wert für die Quantisierungesenergie ist 50 meV.

Um den Photolumineszenz-Prozess genauer als in diesem einfachen Modell zu beschreiben, ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch einzubeziehen. Die beiden sich gegenseitig anziehenden Ladungen bilden gemeinsam ein Exziton. Die folgende Tabelle zeigt die Exzitonbindungsenergie in einigen II-VI-Verbindungshalbleitern. Die Werte stammen aus experimentellen Daten, die von Hattori in [Hat76] zusammengestellt wurden. Ist die Bindungsenergie dieses Quasiteilchens klein gegenüber der Quantisierungesenergie, reicht das vereinfachte Einteilchenbild in Abbildung 2.1 für die Darstellung des Photolumineszenz-Prozesses im Quantenpunkt aus. Andernfalls betrachtet man exzitonische Zustände anstatt das Einteilchenbild anzuwenden.