

4. Optische Prozesse in QWs

4.1 Absorption und Refraktion

Wellenausbreitung mit Refraktion und Absorption

$$k = \frac{\omega}{c} \cdot \left(\epsilon' + \frac{\sigma \mu_0}{\omega} i \right)^{1/2}$$

komplexer Brechungsindex

$$n_r = n_r' + i \cdot n_r''$$

$$\text{(vgl. } \tilde{\epsilon} = \epsilon' + i\epsilon'')$$

mit $\sigma = \sigma(\omega)$ dynamische Leitfähigkeit mit Halbleiter (benutzt zur Beschreibung der verschiedenen Absorptionsmechanismen, komplex)

Elektrische Feldamplitude

$$F = F_0 \cdot \exp \left\{ i\omega \left(\frac{n_r'}{c} z - t \right) \right\} \cdot \exp \left(-\frac{n_r'' \omega \cdot z}{c} \right)$$

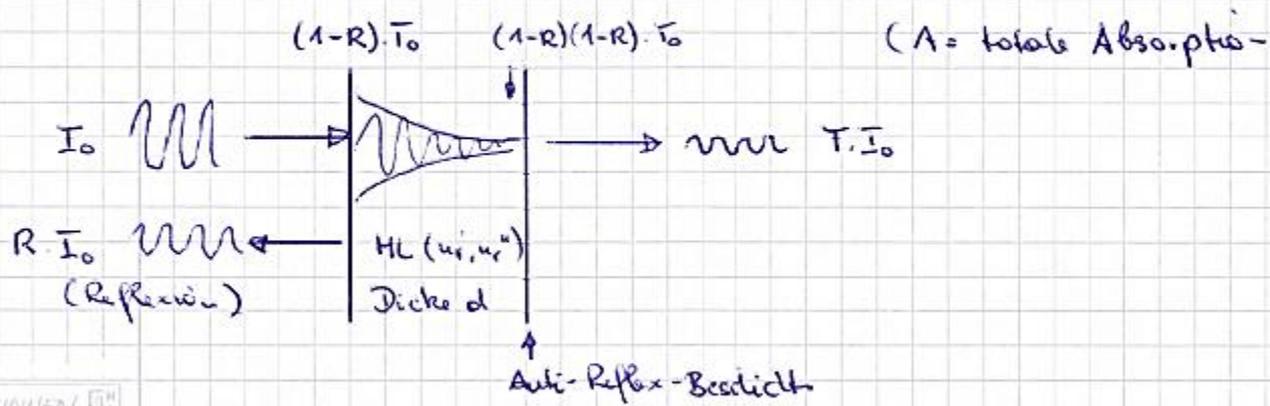
- Ausbreitungsgeschwindigkeit: $v = \frac{c}{n_r'}$
- Absorptionskoeffizienten: $\alpha = \frac{2n_r'' \omega}{c}$ (auf Intensität bezogen)

⇒ Bestimmung von $n_r''(\omega)$ durch Absorptionsmessung

Bestimmung von $n_r'(\omega)$ durch zusätzliche Reflexionsmessung

Reflexions- und Absorptionsmessung

$$R = \left| \frac{\overline{T}_{\text{aus}}}{\overline{T}_{\text{ein}}} \right|^2 = \left| \frac{1 - u_r}{1 + u_r} \right|^2 = \frac{(u_r' - 1)^2 + u_r''^2}{(u_r' + 1)^2 + u_r''^2} \quad (\text{für senkrechten Einfall})$$



Aus Energieerhaltung gilt: $R + A + T = 1$

Durch Kombination einer Reflexions- und Absorptionsmessung kann also der komplexe Brechungsindex (frequenzabhängig) ermittelt werden.

Kramers-Kronig Relation

Alternativ dazu die kann die Refraktion (Absorption) durch die Anwendung der **Kramers-Kronig-Relation** aus der Absorption (Refraktion) berechnet werden.

KKR (Beispiel: Absorption \rightarrow Refraktion)

$$(n'(\omega) - 1) = \frac{1}{\pi} \cdot \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\alpha(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

Cauchy'scher Hauptwert

(Voraussetzung: $\alpha(\omega)$ muss für $\omega = 0 \dots \infty$ bekannt sein)

Durch Bestimmung der optischen Eigenschaften und Vergleich mit einer mikroskopischen Theorie ist die Bestimmung der Bandstruktur möglich

4.2 Interband Absorption (allgem. Betrachtung)

Mikroskopische Beschreibung:

Elektronen im EM-Feld (charakterisiert durch Vektorpotential \vec{A} oder durch Photonenzahl \vec{n}_{ph} und Polarisation \vec{a})
 Zeitabhängige Schrödingergleichung liefert Übergangswahrscheinlichkeit W

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + H') \Psi$$

mit $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r)$

$$H' = \frac{e\hbar}{m_0} \vec{a} \cdot \nabla$$

Übergangswahrscheinlichkeit in 1. Ordnung zeitabhängig
 Störungstheorie (Fermi's goldene Regel)

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f | H' | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega)$$

+ ... Absorption
 - ... Emission

mit $\vec{A}^D \rightarrow \vec{n}_{ph}$ und \vec{a} sowie Vorfaktoren folgt

Absorption:

$$\dot{W}_{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{m_0^2} \cdot \left(\frac{\hbar \omega_{ph}}{2\omega \epsilon_0} \right) \cdot \sum_f \left| \int \psi_f^*(\vec{a}, \vec{p}) e^{i\vec{k}_{ph} \cdot \vec{r}} \psi_i d^3r \right|^2 \delta(E_i - E_f + \hbar\omega)$$

Emission: (induziert und spontane)
induziert spontane

$$\dot{W}_{\text{em}} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{m_0^2} \cdot \left(\frac{\hbar(\omega_{ph} + 1)}{d.w.\epsilon_0} \right) \cdot \sum_f \left| \int \psi_f^*(\vec{a}, \vec{p}) e^{i\vec{k}_{ph} \cdot \vec{r}} \psi_i d^3r \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit kann durch das Impuls-
matrixelement

$$\hat{p}_{if} = -i\hbar \int \langle f | \vec{\nabla} | i \rangle d^3r \quad \text{beschrieben werden}$$

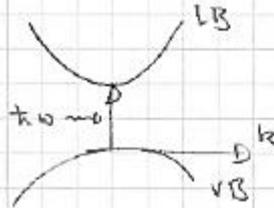
mit $|i\rangle = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_i, e}$
 $|f\rangle = e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_f, e'}$ (e, e' Bandindizes)

die Ausführung der Ableitung liefert:

$$\hat{p}_{if} = \hbar \vec{k}_i \underbrace{\int \langle f | i \rangle d^3r}_{=0} - i\hbar \int u_{\vec{k}_f, e'}^* (\vec{\nabla} u_{\vec{k}_i, e}) e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}} d^3r$$

mit orth. Blochfunktion

Der Photonenimpuls kann ferner gegenüber dem Kristallimpuls vernachlässigt werden: $k_i = k_f = k$ (Dipolnäherung)



"senkrechte" optische Übergänge

$$\hat{P}_{if} = \langle u_{c,k} | \hat{p}_a | u_{v,k} \rangle \quad \text{mit} \quad \hat{p}_a = \hat{a} \cdot \hat{p}$$

Polarisationsvektor
 \hat{a}

In der Literatur wird häufig E_p zur quantitativen Beschreibung der Absorption verwendet.

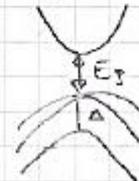
$$E_p = \frac{2}{\omega_0} \cdot |\langle p_x | \hat{p}_x | s \rangle|^2$$

p-förmige s-förmige

GaAs:	$E_p = 25.7 \text{ eV}$
InP:	$E_p = 20.9 \text{ eV}$
InAs:	$E_p = 22.2 \text{ eV}$

(k -unabhängiges Matrixelement, vgl. k - p Störungsrechnung)

$$E_p = \left(\frac{\omega_0}{\omega_c^*} - 1 \right) \frac{E_g (E_g + \Delta)}{E_g + \frac{2}{3} \Delta}$$



Nach Summation über alle Endzustände erhält man schließlich für 3D Halbleiter und unpolarisiertes Licht ($\alpha \rightarrow \frac{2}{3}$)

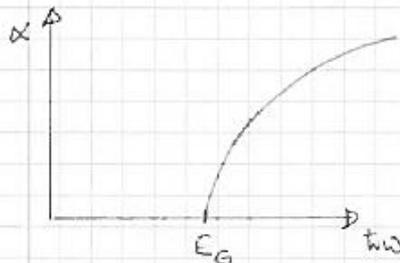
$$W_{\text{abs}} = \frac{\bar{n} \cdot e^2 \cdot \hbar \cdot \omega_{ph}}{2 \cdot \epsilon_0 \cdot \omega_0 \cdot \hbar \omega} \cdot E_p \cdot \frac{2}{3} \cdot N_{CV}(\hbar\omega)$$

mit $N_{CV}(\hbar\omega) = \sqrt{2} \cdot \frac{m_e^*{}^{3/2} \cdot (\hbar\omega - E_g)^{3/2}}{\pi \hbar^3}$ reduzierte Zustandsdichte (joint density of state)

und $\hbar\omega - E_g = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \cdot \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \cdot \frac{1}{m_r^*}$

Verlauf der optischen Absorption in der Nähe des Bandlücken:

$$\alpha = \frac{W_{\text{abs}}}{\underbrace{\frac{c}{m_r^*} \cdot \omega_{ph}}_{\text{photon}}} \Rightarrow \alpha \sim \sqrt{\hbar\omega - E_g}$$



Verhalten von N_{CV} dominiert. Der Faktor $\frac{1}{\hbar\omega}$ in W_{abs} kann in der Umgebung von E_g als konstant betrachtet werden.

Auswahlregeln für linear polarisiertes Licht

From symmetry we see that *only* the matrix elements of the form

$$\langle p_x | p_x | s \rangle = \langle p_y | p_y | s \rangle = \langle p_z | p_z | s \rangle = p_{cv}$$

are nonzero. Thus, for band-to-band transition, the only allowed transitions have the following matrix elements

$$\langle \text{HH} | p_x | s \rangle = \langle \text{HH} | p_y | s \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle p_x | p_x | s \rangle$$

$$\langle \text{LH} | p_x | s \rangle = \langle \text{LH} | p_y | s \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \langle p_x | p_x | s \rangle$$

$$\langle \text{LH} | p_z | s \rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \langle p_x | p_x | s \rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} p_{cv}$$

It is important to note that $\langle \text{HH} | p_z | s \rangle = 0$

It is very useful to examine the matrix element square for light polarized along various orientations. This polarization dependence is accentuated in quantum wells because the HH and LH states are no longer degenerate in that case.

x-polarized light: HH \rightarrow c-band: No coupling

$$\text{LH} \rightarrow \text{c-band: } |p_{if}|^2 = \frac{2}{3} |\langle p_x | p_x | s \rangle|^2$$

x-polarized light: HH \rightarrow c-band: $|p_{if}|^2 = \frac{1}{3} |\langle p_x | p_x | s \rangle|^2$

$$\text{LH} \rightarrow \text{c-band: } |p_{if}|^2 = \frac{1}{6} |\langle p_x | p_x | s \rangle|^2$$

y-polarized light: HH \rightarrow c-band: $|p_{if}|^2 = \frac{1}{3} |\langle p_x | p_x | s \rangle|^2$

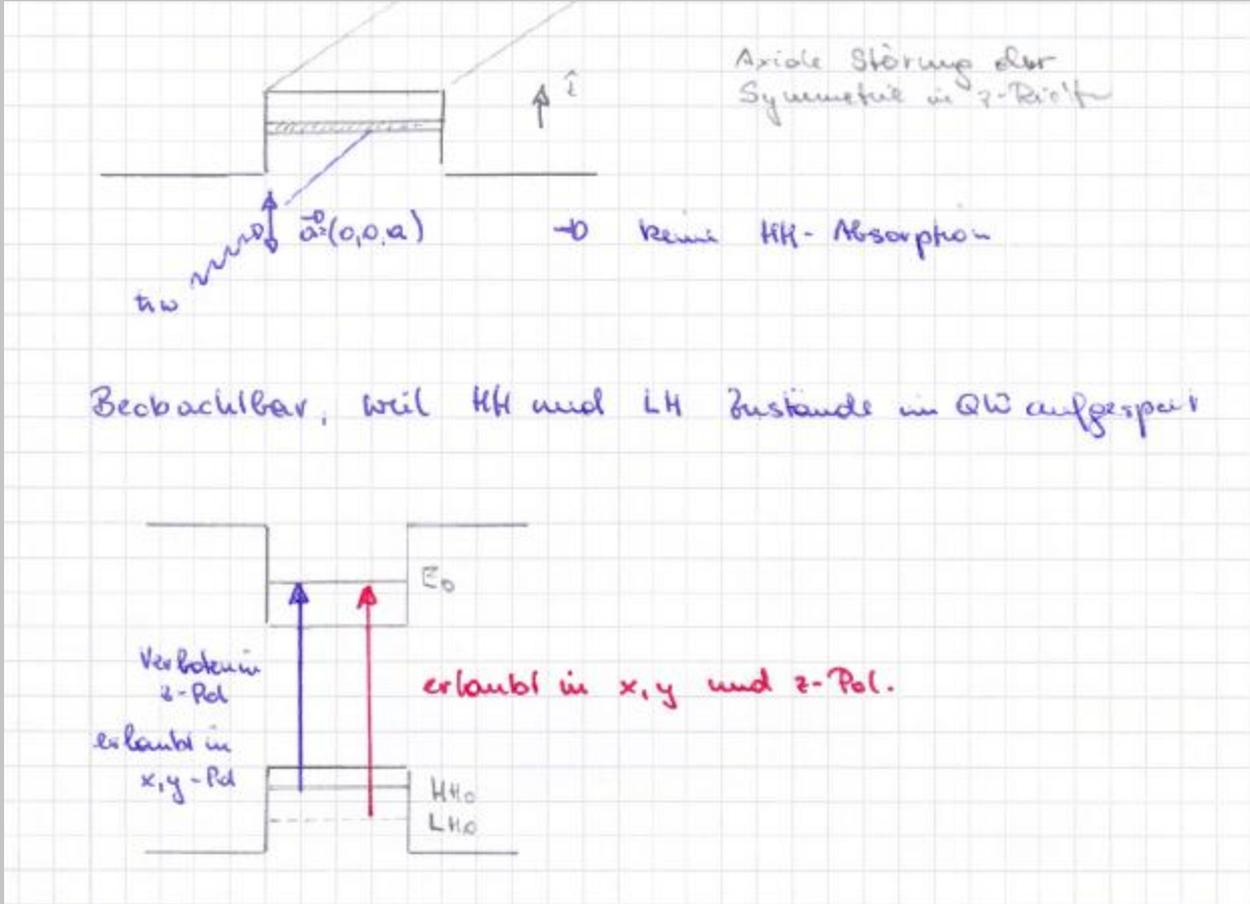
$$\text{LH} \rightarrow \text{c-band: } |p_{if}|^2 = \frac{1}{6} |\langle p_x | p_x | s \rangle|^2$$

Auswahlregeln

Die unterschiedliche Kopplung von linear polarisiertem Licht an die verschiedenen Übergänge zwischen den HH und LH Zuständen im Valenzband und dem Leitungsband kann in isotropen Volumenhalbleitern nicht geklärt beobachtet werden.

Die Auswahlregeln für linear polarisierte Strahlung treten aber in axial gestörten Strukturen in Erscheinung (z.B. QW-Strukturen, gespannten Strukturen,)

Auswahlregeln



Axiale Störung der Symmetrie in z-Richtung
 $\vec{a} = (0,0,a)$ → keine HH-Absorption

Beobachtbar, weil HH und LH Zustände in QD aufgespalten

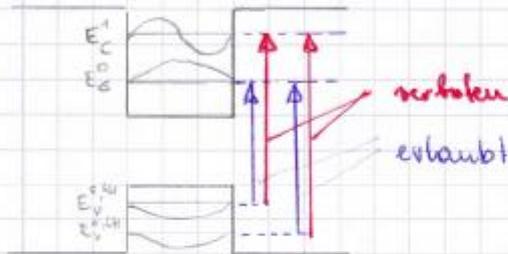
Verboten in z-Pol
 erlaubt in x,y-Pol

erlaubt in x,y und z-Pol.

E_0
 HH_0
 LH_0

4.3 Interbandübergänge in QWs

Die Quantisierung in z-Richtung führt zur Ausbildung elektronischer Subbänder im Leitungs- und Valenzband.



Zusätzlich zu den aus der Symmetrie der Bloch Funktionen herrührenden Auswahlregeln ergibt sich nun eine neue Paritäts-Auswahlregel.

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0 c \epsilon_r \epsilon_0 \hbar \omega} |a \cdot p|^2 \cdot \frac{N_{2D}(\hbar\omega)}{L_z} \sum_{p, u, v} \langle g_{v, u} | g_c \rangle \cdot \theta(E_c^i - E_v^{ex} - \hbar\omega)$$

↑ Envelopenfunkt.
↑ Heavy-Side-Funkt.

mit $N_{2D} = \frac{m_r^*}{\pi \hbar^2}$
(restwertige 2D-Zustandsdichte)

und e : Subbandindex = 0, 1, ... (Lücke)
 u : Lückenband = HH, LH, SO
 v : Subbandindex Elektronen = 0, 1

- Erlaubte Übergänge ergeben sich nur, wenn die Parität der beteiligten Enveloppen-Wellenfunktionen gleich ist (das heißt gerade oder ungerade)
- Pro erlaubtem Übergang werden in zerbrechter Transmission typisch bis zu 1% der Photonen absorbiert.

Elektrooptische Eigenschaften von QWs

Der Quantum Confined Stark-Effekt (QCSE):

- Modifizierung der optischen Interbandabsorption bei Anlegen elektrischer Felder senkrecht zur QW-Ebene

(vgl. Franz-Keldysh Effekt in 3D-Halbleitern)

Betrachtung für den s -h Grundzustand im QW (E_0, H_0)

$$E_{ext} = E_g + E_{Conf}^c + E_{Conf}^v - E_B^{pk}$$

Abhängig vom senkrechten elektr. Feld F

$$\Delta E_{Conf}^{c,v} \sim -m^* F^2 L^4$$

numerische Lösung erforderlich
 $(E_g^{pk}(F \neq 0) < E_g^{pk}(F = 0))$

(aus 2. Ordnung Störungsrechnung)

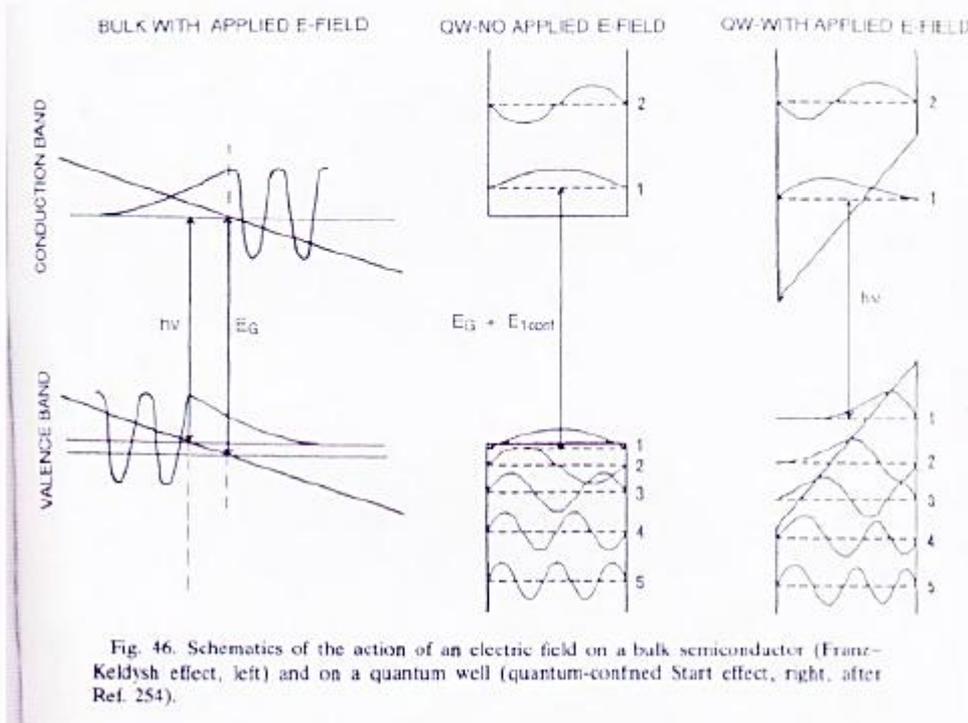
$$H = H_0 + e \cdot F \cdot z$$

- Der e-h Zustand wird im E-Feld polarisiert
- \approx quadratische Abnahme von E_{exz}
- Reduktion des e-h Überlapps
 - ⇒ Reduktion der Übergangswahrscheinlichkeit
- Die existenzialen Eigenschaften (stecken in E_g^{eh}) bleiben im wesentlichen erhalten

FK und QCSE

Franz-Keldysh effect

Quantum confined Stark effect



$$E_u = E_u^{(0)} + C_u \cdot \frac{m_u^* \cdot e^2}{\hbar^2} \cdot F^2 \cdot L^4$$

$$E_{hh} = E_{hh}^{(0)} + C_u \cdot \frac{m_{hh}^* \cdot e^2}{\hbar^2} \cdot F^2 \cdot L^4$$

$$E_{hh}^c = E_{hh}^c(F=0) + C_u \cdot (m_c^* + m_{hh}^*) \cdot \frac{e^2}{\hbar^2} \cdot F^2 \cdot L^4$$

$$\text{mit } C_u = \frac{u^2 \cdot \hbar^2 - 15}{24 u^4 \cdot \hbar^4}$$

Exziton Energie vs. elektr. Feld

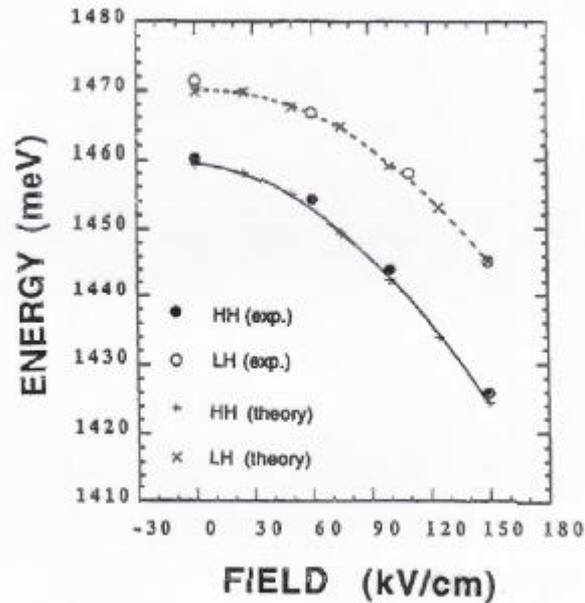


Figure 13.9. Comparison of experimental and theoretically calculated exciton energies vs. the electric field. (After Ref. 43.)

Absorptionsspektren von GaAs/AlGaAs QWs

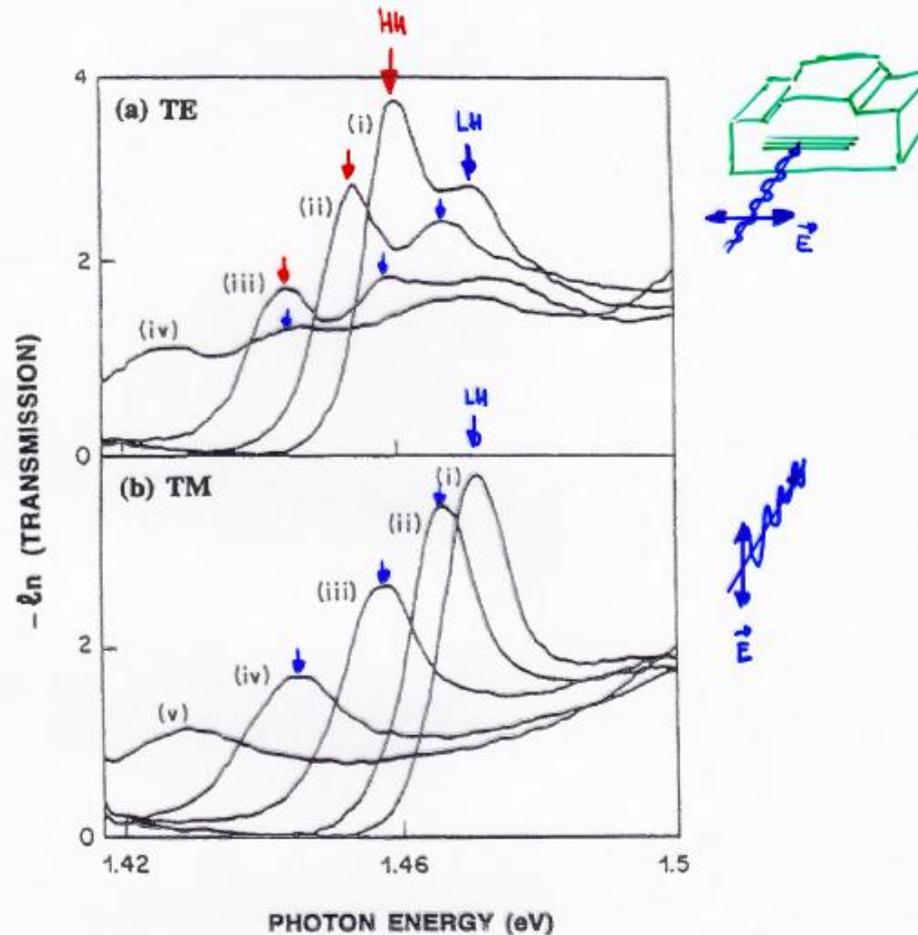
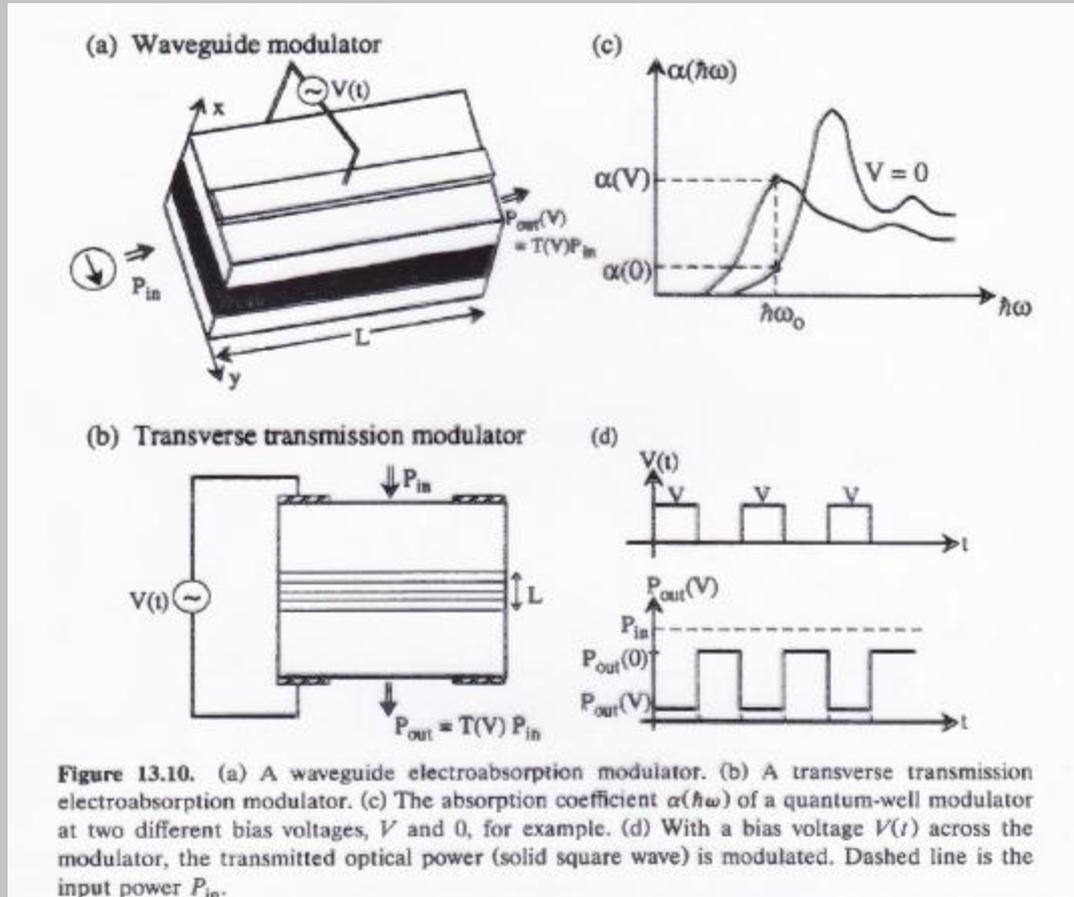


Figure 13.7. Experimental absorption spectra of a GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As quantum-well waveguide modulator as a function of field: (a) TE polarization for (i) 0 kV/cm, (ii) 60 kV/cm, (iii) 100 kV/cm, (iv) 150 kV/cm. (b) TM polarization for (i) 0 kV/cm, (ii) 60 kV/cm, (iii) 110 kV/cm, (iv) 150 kV/cm, and (v) 200 kV/cm. (After Ref. 48.) [13, 17].

Anwendung des QCSE:

Optische Modulatoren auf Wellenleiterbasis



SEED (Self-Electrooptical-Effect Device)

(Miller et al., APL 45, p. 13 (1984))