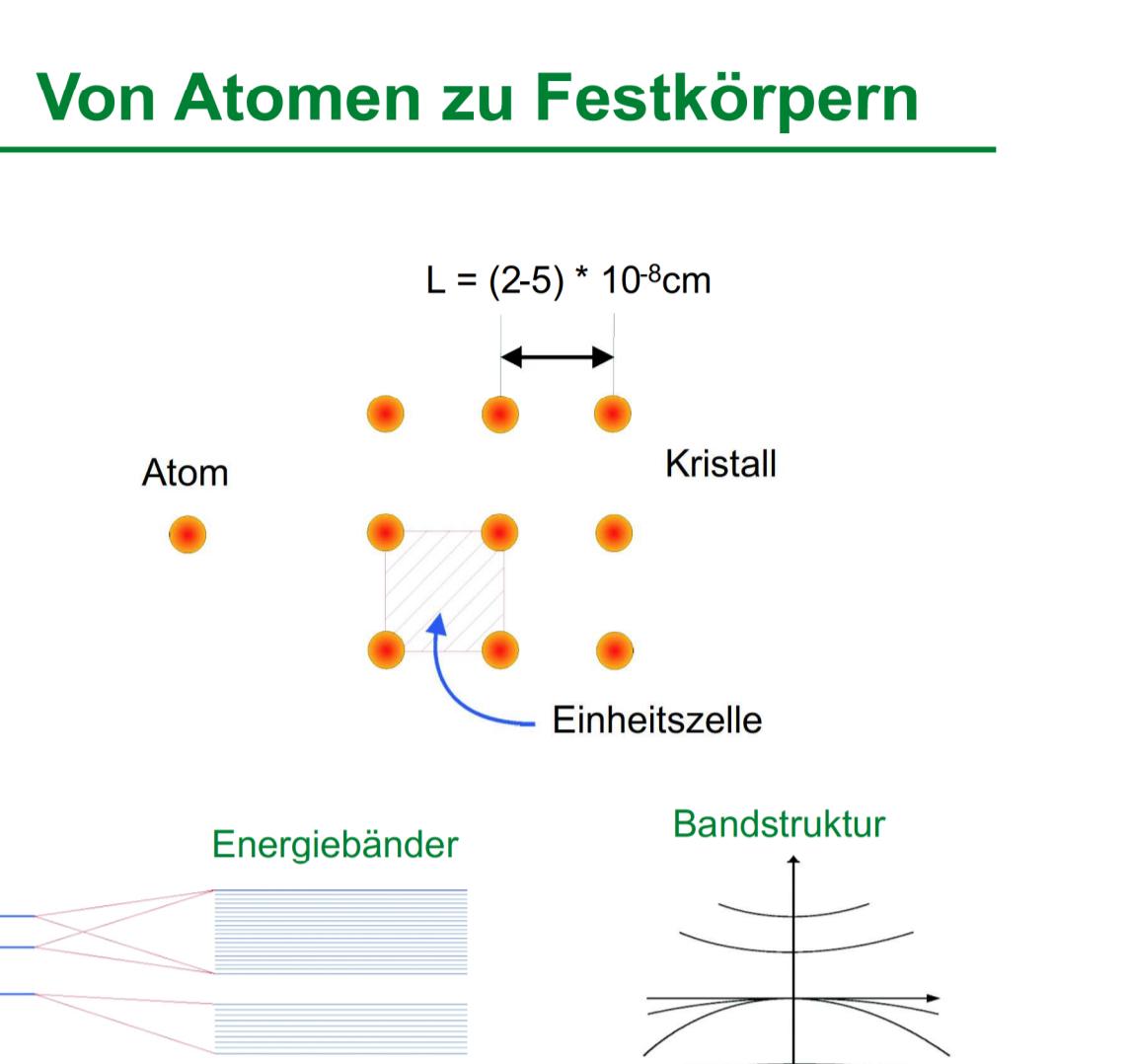


# Simulation neuer Materialien



### Von Atomen zu Festkörpern



$L = (2-5) \cdot 10^{-8} \text{ cm}$

Atom, Kristall, Einheitszelle, Bandstruktur, Energiebänder.

### Licht-Materie-Wechselwirkung

Wellengleichung:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{n^2(z)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] E = \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} P$$

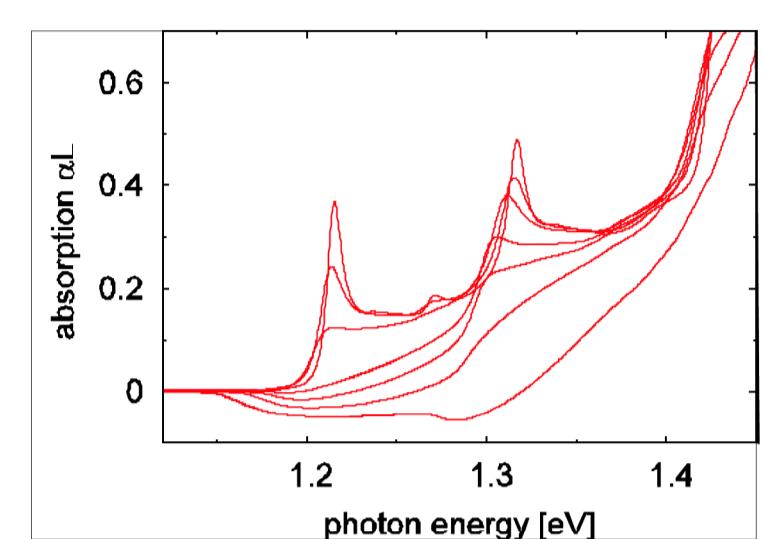
makroskopische optische Polarisation

Halbleiter: Blochbasis  $P = \sum_k d_{cv}^* P_k + c.c.$

Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger => Vielteilchenproblem

$V_{Coul}$

### Absorption und Gewinn

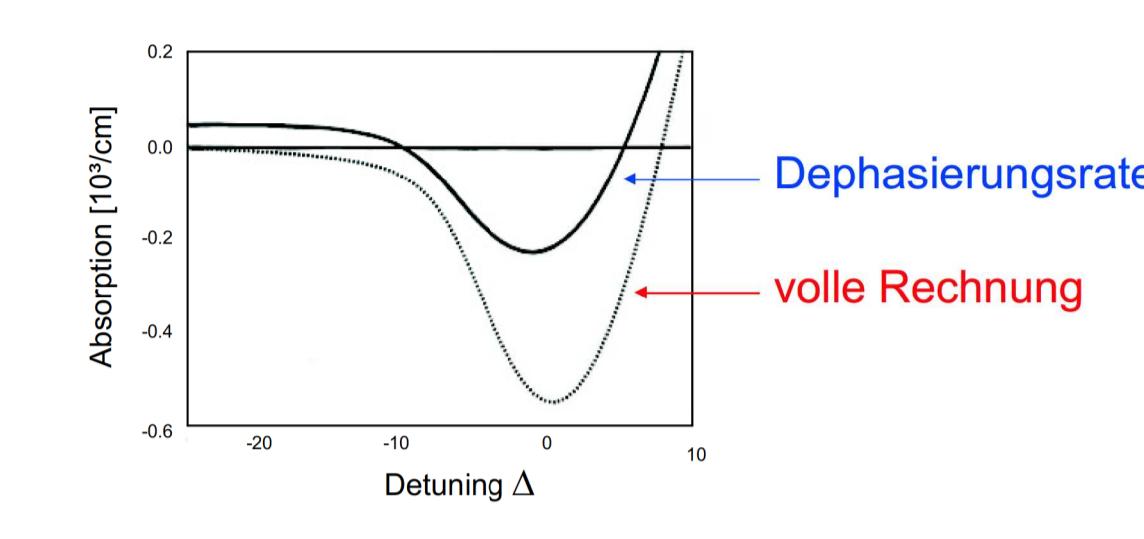


Sättigung der Absorption für hohe Dichten

Negative Absorption für sehr hohe Dichten (Inversion) → Gewinn

$g = -\alpha$

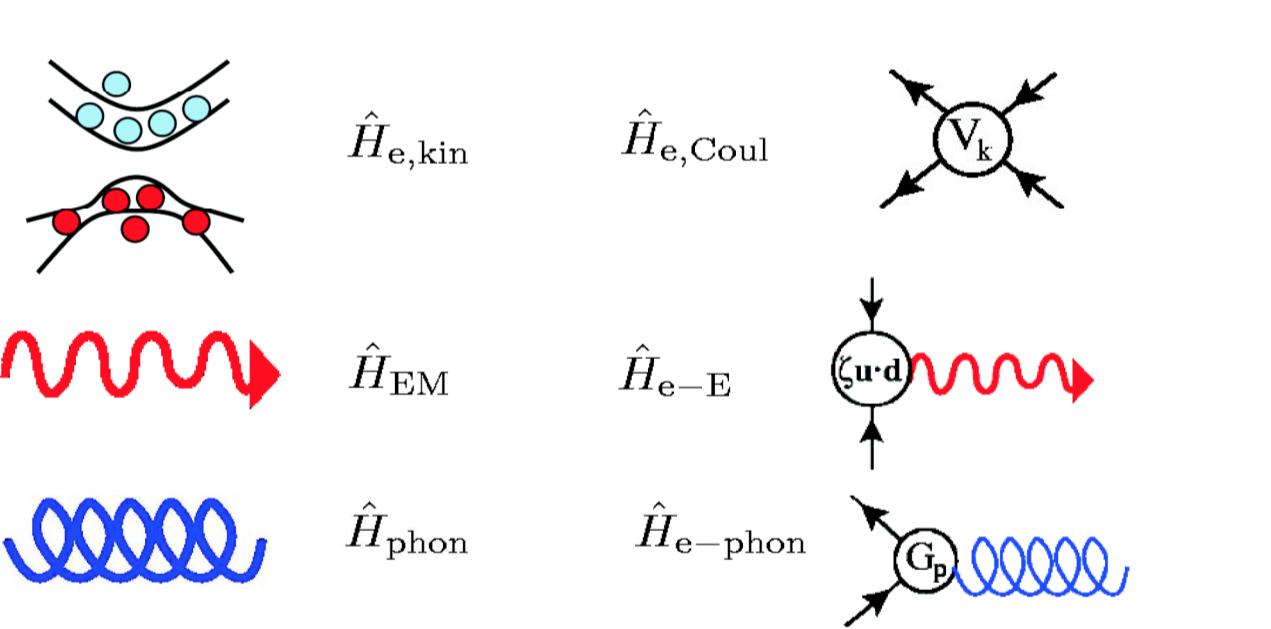
### Linienform des Gewinns



- $\Delta = (\hbar\omega - E_G)/E_B$
- Gewinn unter Berücksichtigung von 2 Bändern
- Dephasierungsrate → falsche Linienform und Amplitude, Absorption unterhalb der Bandkante

### Der Hamiltonoperator

beschreibt die Licht-Materie Wechselwirkung und die Dynamik der Teilchen des Halbleiters  
enthält: Elektronen, Licht, Gitterschwingungen



$\hat{H}_{e,\text{kin}}$ ,  $\hat{H}_{e,\text{Coul}}$ ,  $\hat{H}_{\text{EM}}$ ,  $\hat{H}_{e-E}$ ,  $\hat{H}_{\text{phon}}$ ,  $\hat{H}_{e-\text{phon}}$

### Halbleiterblochgleichungen

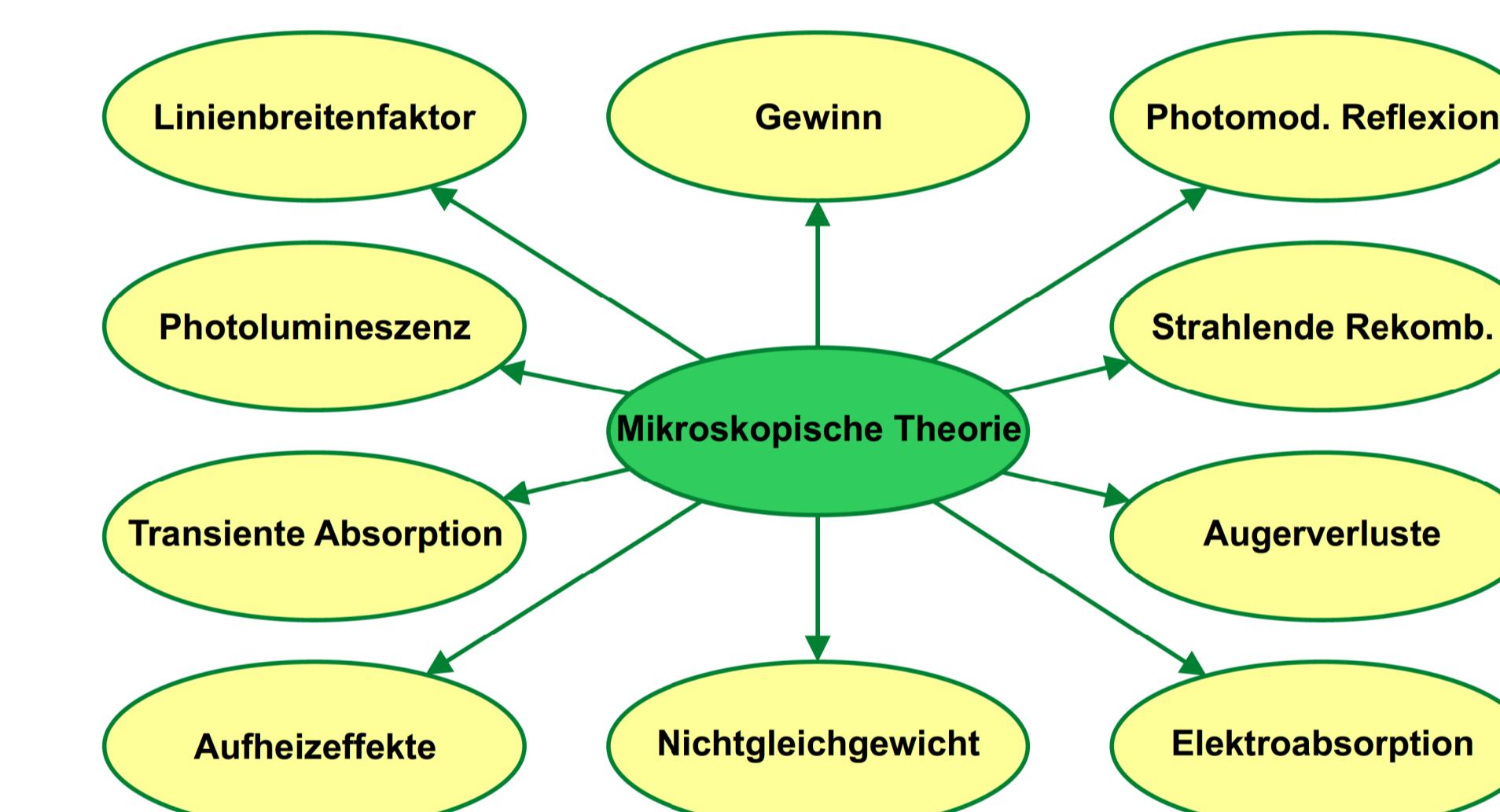
$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k^e - \epsilon_k^h \right] P_k = [1 - f_k^e - f_k^h] \Omega_k + \frac{\partial}{\partial t} P_k|_{corr}$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_k^a = -\Omega_k(t) P_k^* + \Omega_k^* P_k + \frac{\partial}{\partial t} f_k^a|_{corr}$

Feldrenormierung  $\Omega_k(t) = d_{cv} E^{QW}(t) + \sum_{k'} V_{k-k'} P_{k'}(t)$

Energierenormierung  $\epsilon_k^a(t) = \epsilon_k^a - \sum_{k'} V_{k-k'} f_{k'}^a(t)$

Nichtlinearitäten: Phasenraumeffekte, Bandlückenrenormierung  
Korrelationen: Streuung, Dephasierung, Abschirmung  
Bandstruktur: 8-Band-k.p-Theorie



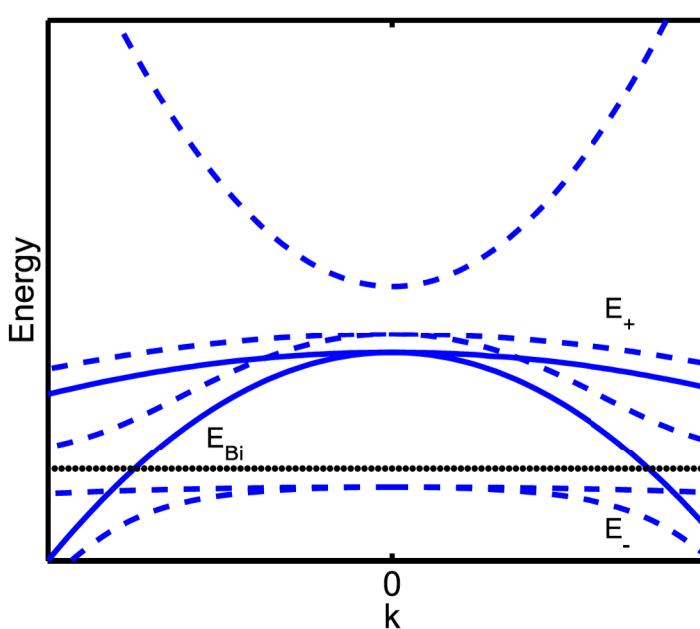
Mikroskopische Theorie

- Linienbreitenfaktor
- Gewinn
- Photomod. Reflexion
- Photolumineszenz
- Strahlende Rekomb.
- Transiente Absorption
- Augerverluste
- Aufheizeffekte
- Nichtgleichgewicht
- Elektroabsorption

### Neues Materialsystem: Ga(AsBi)

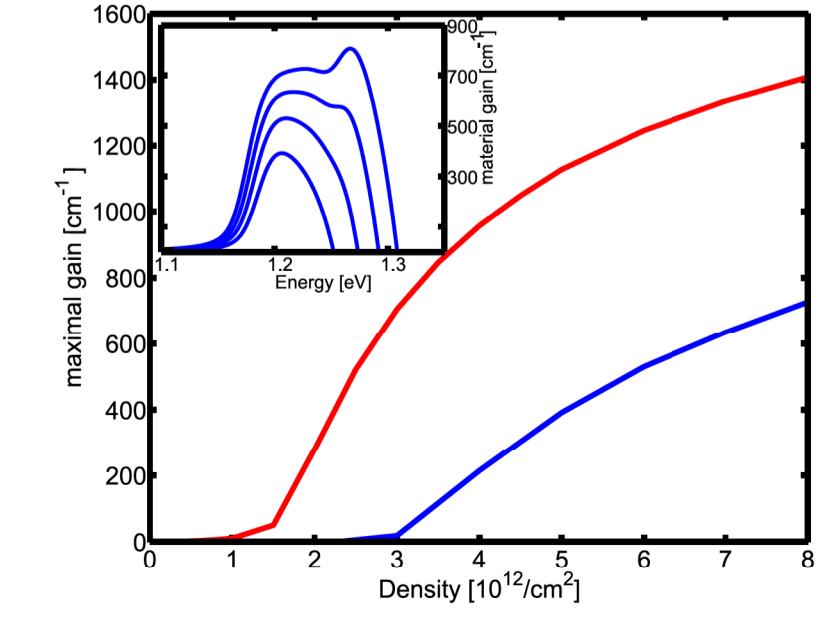
Bandstruktur:

- Anticrossing-Verhalten im Valenzband
- Geringe Bi-Konzentrationen führen zu einer starken Verringerung der Bandlücke
- Valenzband lässt sich unabhängig vom Leitungsband verändern



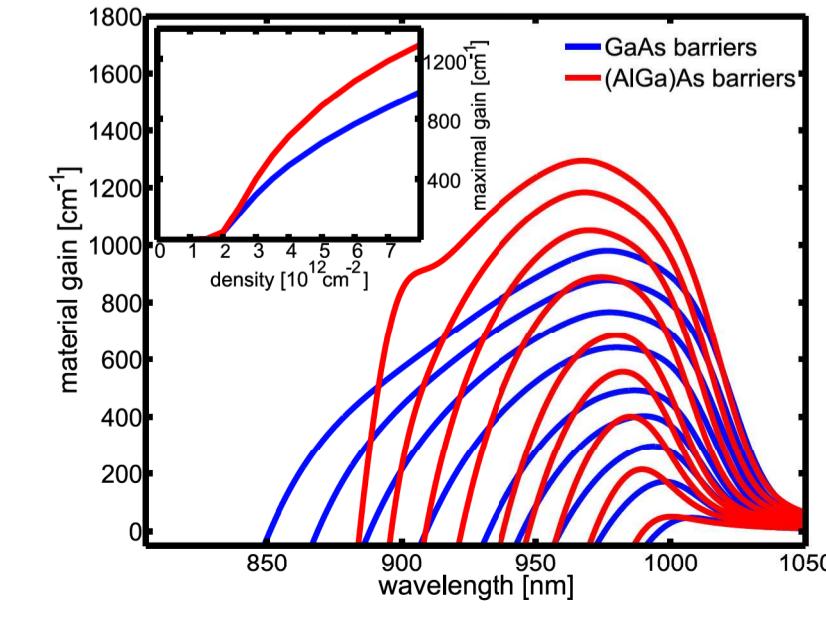
Optische Eigenschaften: Vergleich mit Standardmaterial:

- Max. Gewinn von Ga(AsBi)/GaAs (blau)
- Max. Gewinn von (GaIn)As/GaAs (rot)
- In-haltiger QW zeigt wesentlich mehr Gewinn
- Kein größerer Gewinn möglich, da höhere Übergänge dominant werden (Inset)



Verbesserung des Gewinns:

- Gewinn von Ga(AsBi)/GaAs (blau)
- Gewinn von Ga(AsBi)(AlGa)As (rot)
- Durch stärkeres Confinement steigt der Gewinn



### AG Simulation neuer Materialien



Prof. Dr. Angela Thränhardt  
Leiterin der Professur  
NPhG P307, Tel. 37636  
angela.thrähardt@physik

M.Sc. Thomas Tonert  
wissenschaftlicher Mitarbeiter  
NPhG P306, Tel. 36738  
thomas.tonert@physik

Dorothee Misselwitz  
Sekretärin  
NPhG P308, Tel. 37743  
dorothee.misselwitz@physik

Dipl.Phys. Sebastian Imhof  
wissenschaftlicher Mitarbeiter  
NPhG P306, Tel. 37721  
sebastian.imhof@physik