

Untersuchungen von Halbleiter-Nanokristallen mit Hilfe von Photoelektronenspektroskopie

Holger Borchert

Die Dissertation befaßt sich mit der strukturellen Untersuchung kolloidal hergestellter Nanokristalle. Halbleiter-Nanokristalle weisen vielfältige, potentiell kontrollierbare physikalische und chemische Eigenschaften auf. Von besonderer Bedeutung ist dabei die Beschaffenheit der Oberfläche der Nanopartikel. Beispielsweise erfordert die Erzielung hoher Fluoreszenz-Quantenausbeuten eine effektive Passivierung der Teilchenoberfläche.

Eine effiziente Methode zur Oberflächenpassivierung ist das epitaktische Aufwachsen einer Schale aus einem Material größerer Bandlücke auf ein Kernmaterial. Man spricht von *Kern-Schale-Nanokristallen*. Die Beschichtung kann mit Hilfe von Photoelektronenspektroskopie unter Einsatz von Synchrotronstrahlung nachgewiesen und charakterisiert werden. Photoelektronen weisen in Materie eine mittlere freie Weglänge auf, welche von ihrer kinetischen Energie abhängt. Da die kinetische Energie wiederum von der Anregungsenergie abhängt, kann durch Variation der Energie der Synchrotronstrahlung die Abschwächung der Photoemissionspeaks gesteuert werden. Mit Hilfe von Simulationsrechnungen kann sodann aus der genauen Energieabhängigkeit der Intensitäten die mittlere Dicke der auf den Kern aufgewachsenen Hülle bestimmt werden.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit ist eine entsprechende Simulationsmethode entwickelt und erfolgreich auf verschiedene Kern-Schale-Nanokristalle angewendet worden. So sind InP/ZnS-, InAs/CdSe-, CdSe/ZnS- und CePO₄:Tb/ LaPO₄-Kern-Schale-Nanokristalle untersucht worden. In allen Fällen konnte erfolgreich nachgewiesen werden, daß eine Beschichtung stattgefunden hat, und es konnte die mittlere Schichtdicke des Schalenmaterials bestimmt werden.

Andere Fragestellungen ergeben sich bei dotierten Nanokristallen. Quantitative Photoelektronenspektroskopie hat in einer Studie Sb-dotierter SnO₂-Kolloide ermöglicht, erstmals die radiale Verteilung der Dotierungsatome im nanokristallinen Wirtsgitter zu ermitteln.

Photoelektronenspektroskopie unter Einsatz von Synchrotronstrahlung erlaubt auch hochauflösende Studien zur Aufklärung von Oberflächenstrukturen durchzuführen. Hier sind InAs-, InAs/CdSe-Kern-Schale-, CdSe-, CdSe/ZnS-Kern-Schale-, mit HF geätzte InP-, CdS/HgS-, „quantum dot quantum well“-, CdS/HgS-, „double quantum well“- und CdTe-Nanokristalle untersucht worden. In vielen dieser Systeme lassen sich aufgrund der *chemischen Verschiebung* einzelner Komponenten hochauflösender Spektren Atome im Inneren der Nanokristalle von solchen an der Oberfläche unterscheiden. Daraus können wichtige Rückschlüsse auf die Beschaffenheit der Partikel-Oberfläche gezogen werden.

Beispielsweise konnte im Falle der CdTe-Nanokristalle mit Hilfe hochauflösender Photoelektronenspektroskopie der komplexe Wachstumsprozeß von Halbleiter-Nanokristallen studiert werden. Es wurden Zusammenhänge zwischen der mit der Wachstumsdynamik verbundenen Oberflächenstruktur und den Lumineszenz-Eigenschaften festgestellt. Die Ergebnisse liefern einen fundierten Erklärungsansatz dafür, daß hohe Quantenausbeuten nur erreicht werden, wenn die Nanokristalle langsam im dynamischen Gleichgewicht aus Auflösung und Wachstum gebildet werden.

Abschließend läßt sich festhalten, daß die Photoelektronenspektroskopie sowohl bezüglich der quantitativen Methoden zur Schichtdickenbestimmung als auch durch hochauflösende Studien einen fundamentalen Beitrag zur Aufklärung der für Nanokristalle so wichtigen Oberflächenstrukturen leisten kann.