

Pressemitteilung

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH

Dr. Antonia Rötger

03.06.2021

<http://idw-online.de/de/news770053>

Forschungsergebnisse
Physik / Astronomie
überregional



Wie Quantenpunkte miteinander „sprechen“ können

Wie sich die Kommunikation zwischen zwei Quantenpunkten mit Licht beeinflussen lässt, hat nun eine Gruppe am HZB theoretisch ausgearbeitet. Dabei zeigt das Team um Annika Bande auch Wege, um den Informations- bzw. Energieübertrag von einem Quantenpunkt zum anderen zu kontrollieren und zu speichern. Zu diesem Zweck berechneten die Forschenden die Elektronenstruktur von jeweils zwei so genannten Nanokristallen, die als Quantenpunkte fungieren. Mit den Ergebnissen lässt sich die Bewegung von Elektronen in Quantenpunkten in Echtzeit simulieren.

Sogenannte Quantenpunkte sind eine neue Materialklasse mit vielen Anwendungsmöglichkeiten. Um Quantenpunkte zu realisieren, nutzt man winzige Halbleiterkristalle mit Abmessungen im Nanometerbereich. Über die Größe dieser Kristalle lassen sich die optischen und elektrischen Eigenschaften kontrollieren. Als QLEDs sind sie bereits in den neuesten Generationen von Flachbildschirmen auf dem Markt, wo sie für eine besonders brillante und hochaufgelöste Farbwiedergabe sorgen. Doch nicht nur als „Farbstoffe“ werden Quantenpunkte genutzt, sondern sie auch in Solarzellen oder als Halbleiterbauelemente, bis hin zu Rechenbausteinen, den Qubits, in einem Quantencomputer.

Nun hat ein Team um Dr. Annika Bande am HZB mit einer theoretischen Arbeit das Verständnis der Wechselwirkung zwischen mehreren Quantenpunkten mit einer atomistischen Betrachtung erweitert.

Annika Bande leitet am HZB die Gruppe „Theorie der Elektronendynamik und Spektroskopie“ und interessiert sich besonders für die Ursprünge von quantenphysikalischen Phänomenen. Auch wenn es sich bei Quantenpunkten um extrem winzige Nanokristalle handelt, bestehen diese doch aus tausenden von Atomen mit wiederum einem Vielfachen von Elektronen. Selbst mit Supercomputern ließe sich die elektronische Struktur eines solchen Halbleiterkristalls kaum berechnen, betont die theoretische Chemikerin, die erst vor kurzem an der Freien Universität ihre Habilitation abgeschlossen hat. „Wir entwickeln aber Methoden, um das Problem näherungsweise zu beschreiben“, erklärt Bande. „In diesem Fall haben wir im Computer mit verkleinerten Quantenpunktversionen aus nur etwa hundert Atomen gearbeitet, die aber trotzdem die wesentlichen Eigenschaften realer Nanokristalle besitzen.“

Mit diesem Ansatz ist es uns nach anderthalb Jahren Entwicklung und in Zusammenarbeit mit Prof. Jean Christophe Tremblay von der CNRS-Universität de Lorraine in Metz gelungen, zwei Quantenpunkte aus jeweils hundert Atomen miteinander Energie austauschen zu lassen. Konkret haben wir untersucht, wie diese zwei Quantenpunkte kontrolliert die Energie des Lichts aufnehmen, austauschen und dauerhaft speichern können. Dabei dient ein erster Lichtpuls zur Anregung, während der zweite Lichtpuls die Abspeicherung bewirkt.

Insgesamt haben wir drei verschiedene Quantenpunktpaare untersucht, um den Effekt von Größe und Geometrie zu erfassen. Wir haben die Elektronenstruktur mit höchster Präzision berechnet und die Bewegungen der Elektronen in Echtzeit bei einer Auflösung von Femtosekunden (10⁻¹⁵ s) simuliert.

Die Ergebnisse sind auch für die experimentelle Forschung und Entwicklung in vielen Anwendungsfeldern sehr nützlich, zum Beispiel für die Entwicklung von Qubits oder als Baustein für die so genannte Photokatalyse, bei der mit

Sonnenlicht grüner Wasserstoff erzeugt wird. „Wir arbeiten stetig daran, unsere Modelle hin zu noch realistischeren Beschreibungen von Quantenpunkten zu erweitern,“ sagt Bande, „zum Beispiel, um den Einfluss von Temperatur und Umgebung zu erfassen.“

Autor: Pascal Krause /Erstautor der geschilderten Arbeit

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Dr. Pascal Krause; pascal.krause@helmholtz-berlin.de

Dr. habil. Annika Bande; annika.bande@helmholtz-berlin.de

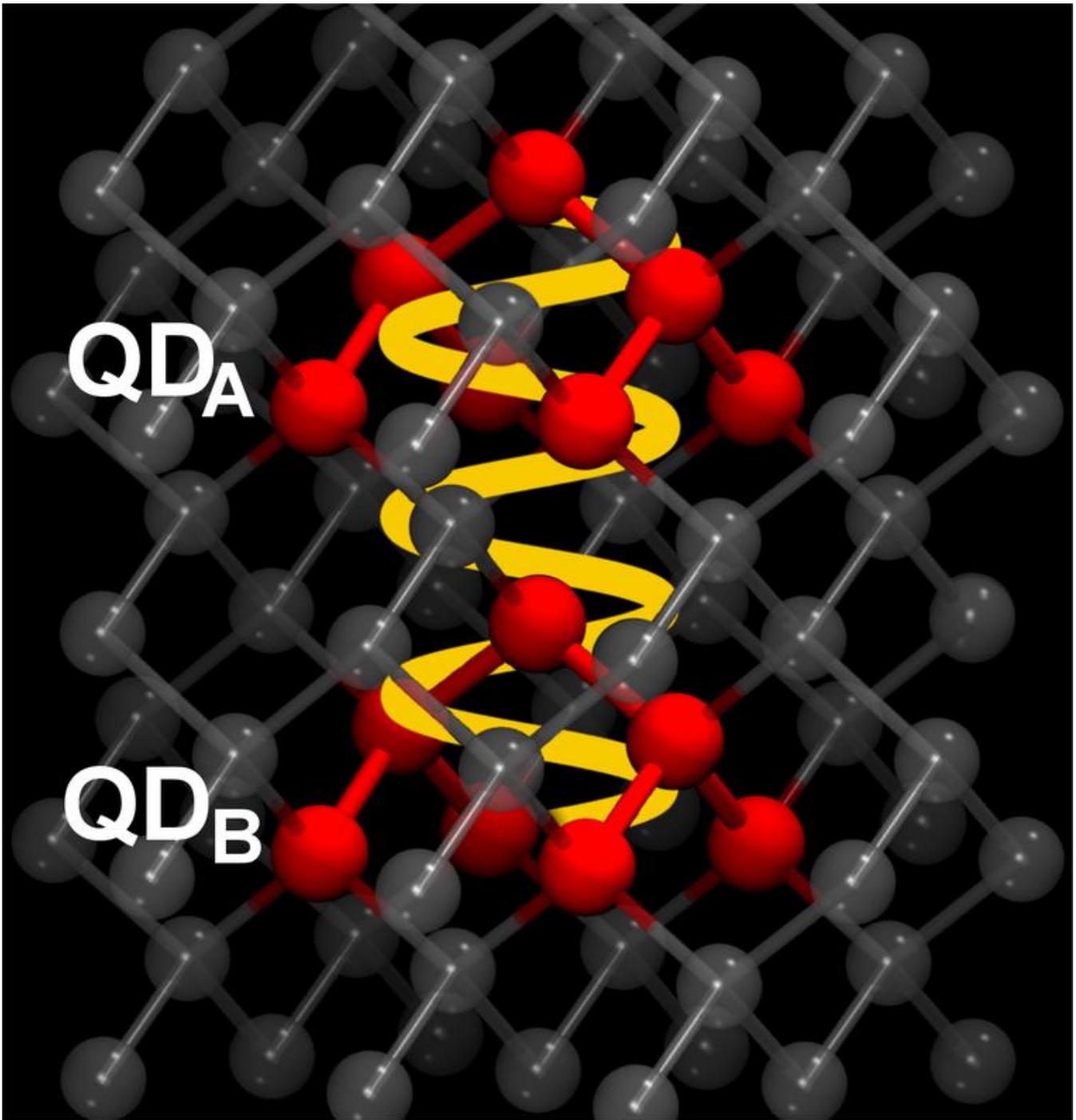
Originalpublikation:

J. Phys. Chem. A (2021)

Atomistic Simulations of Laser-controlled Exciton Transfer and Stabilization in Symmetric Double Quantum Dots

Pascal Krause, Jean Christophe Tremblay, and Annika Bande

DOI: [10.1021/acs.jpca.1c02501](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c02501)



Die Illustration zeigt zwei Quantenpunkte, die über Lichtpulse miteinander kommunizieren.
HZB