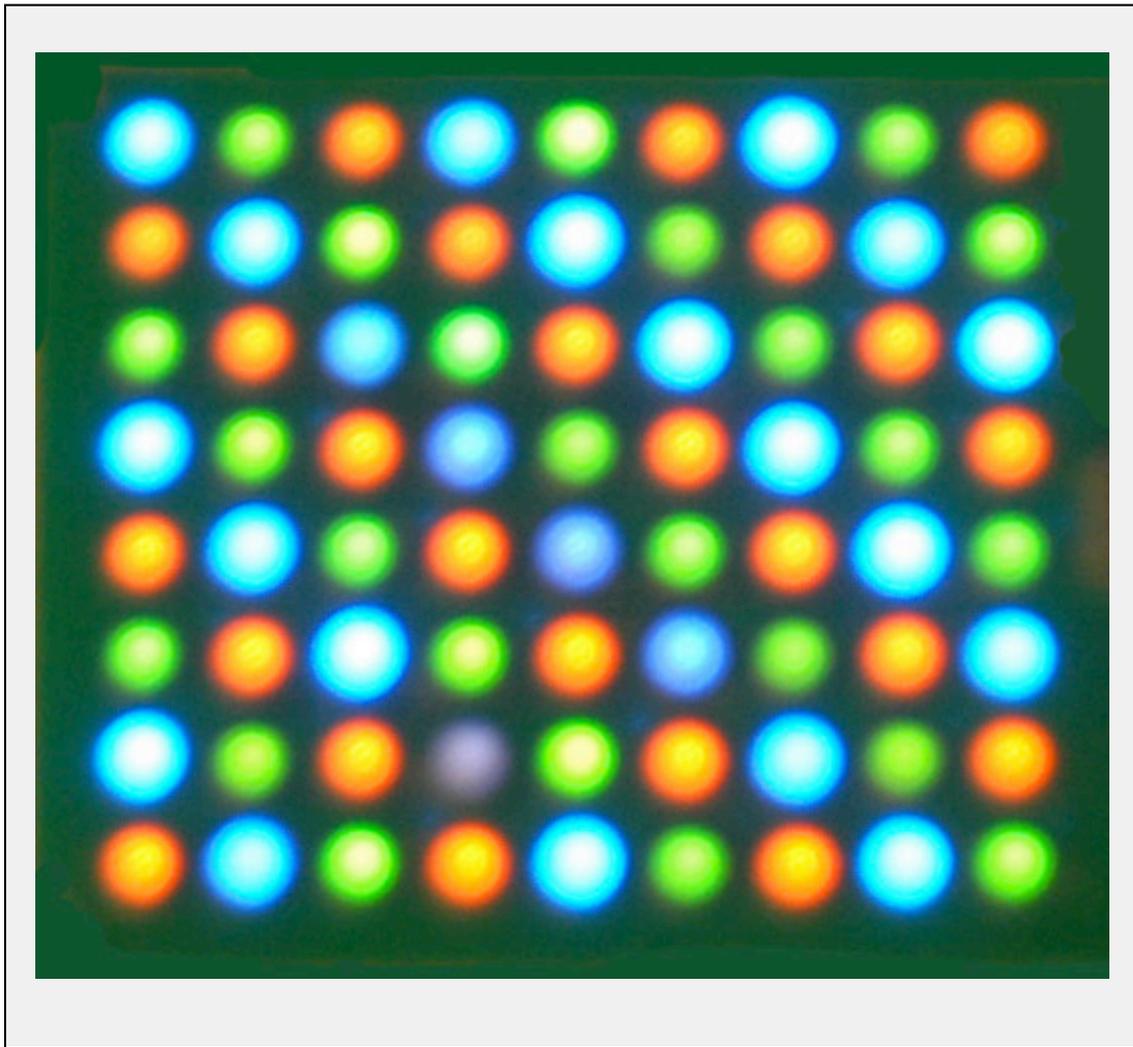

MSc Elektro- und Informationstechnik

Optoelektronik II: Bauelemente



KE 1: Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

Autoren:

Prof. Dr. E. F. Schubert (Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, USA)

Prof. Dr. J. Jahns

Inhaltsverzeichnis

1	Strahlende und nichtstrahlende Rekombination	5
1.1	Strahlende Elektron-Loch-Rekombination	5
1.1.1	Strahlende Rekombination im Niederanregungsfall	6
1.1.2	Strahlende Rekombination im Hochanregungsfall	9
1.1.3	Lumineszenzmessung der Rekombinationszeit	9
1.2	Nichtstrahlende Rekombination	10
1.2.1	Nichtstrahlende Rekombination im Volumenmaterial	10
1.2.2	Nichtstrahlende Rekombination an Oberflächen	15
1.2.3	Wettbewerb zwischen strahlender und nichtstrahlender Rekombination	18
1.2.4	Interner Quantenwirkungsgrad	19
1.3	Theorie der strahlenden Rekombination	21
1.3.1	Van Roosbroeck-Shockley-Modell	21
1.3.2	Einstein-Modell	23
1.4	Fragen	24

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

Elektronen und Löcher in Halbleitern rekombinieren entweder strahlend, d.h. begleitet durch die Emission eines Photons, oder nicht-strahlend. In lichtemittierenden Bauelementen ist der erstgenannte Prozeß natürlich der bevorzugte. Allerdings kann die nicht-strahlende Rekombination unter praktischen Umständen nie ganz unterdrückt werden. Daher gibt es einen Wettbewerb zwischen beiden Prozessen. Die Maximierung der strahlenden Rekombination und Minimierung der nicht-strahlenden erfordert ein gründliches Verständnis der zugrundeliegenden Vorgänge. Darum geht es in diesem Kapitel in einer etwas detaillierteren Darstellung als im Kurs Optoelektronik I.

1.1 Strahlende Elektron-Loch-Rekombination

In jedem undotierten oder dotierten Halbleiter gibt es zwei Arten von Ladungsträgern (engl.: *carrier*): freie Elektronen und freie Löcher. Im Gleichgewichtszustand, d.h., ohne externe Anregung durch Licht oder elektrischen Strom, ist das Produkt aus Elektronen- und Löcherkonzentration bei einer gegebenen Temperatur nach dem Massenwirkungsgesetz konstant:

$$n_0 p_0 = n_i^2 \quad (1.1)$$

mit

n_0 – Dichte der Elektronen im thermischen Gleichgewicht

p_0 – Dichte der Löcher im thermischen Gleichgewicht

n_i – Dichte der intrinsischen Ladungsträger im thermischen Gleichgewicht

Zusätzliche Ladungsträger (auch: Überschußladungsträger, engl.: *excess carrier*) können im Halbleiter entweder durch Absorption von Licht oder durch einen Injektionsstrom erzeugt werden. Die gesamte Ladungsträgerdichte ist dann durch die Summe der Dichten von Gleichgewichts- und Überschußladungsträgern gegeben:

$$n = n_0 + \Delta n \quad \text{und} \quad p = p_0 + \Delta p \quad (1.2)$$

Wir betrachten nun die Rekombination von Ladungsträgern. Das Banddiagramm für einen Halbleiter mit Elektronen und Löchern zeigt Abb. 1.1. Wir betrachten ein freies Elektron im Leitungsband. Uns interessiert die Rate W , mit welcher die Ladungsträgerdichte abnimmt. Die Wahrscheinlichkeit, daß das betrachtete Elektron mit einem Loch rekombiniert ist zur Dichte der Löcher proportional, d.h., $W \propto p$. Die Anzahl der Rekombinationsereignisse ist ebenfalls proportional zur Dichte der Elektronen, wie auch durch die Abbildung angedeutet. Daher ist die Rekombinationsrate insgesamt proportional zum Produkt der Elektronen- und Lochdichten, d.h., $W \propto np$. Unter Verwendung einer Proportionalitätskonstante, welche die Rekombinationsrate pro Zeiteinheit pro Volumeneinheit angibt, kann man schreiben:

$$W = -\frac{dn}{dt} = rnp \quad (1.3)$$

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

Diese Gleichung ist die bimolekulare Ratengleichung und die Proportionalitätskonstante r heißt bimolekularer Rekombinationskoeffizient. Für III-V-Halbleiter nimmt r Werte im Bereich von $10^{-11} - 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$ an. Die Berechnung des Rekombinationskoeffizienten erfolgt in einem späteren Abschnitt.

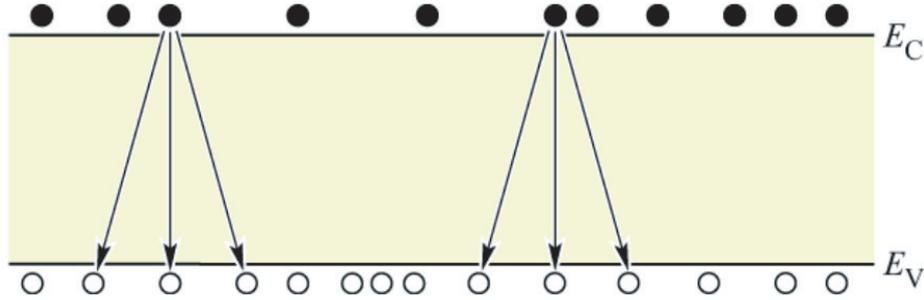


Abbildung 1.1: Erläuterung der Elektron-Loch-Rekombination. Die Anzahl von Rekombinationsprozessen pro Zeiteinheit und Volumeneinheit ist proportional zum Produkt von Elektronen- und Lochdichten.

1.1.1 Strahlende Rekombination im Niederanregungsfall

Wir besprechen nun die zeitliche Dynamik des Rekombinationsprozesses. Hierzu betrachten wir einen Halbleiter, der mit Licht angeregt wird. Die Dichten der Gleichgewichts- und der Überschusselektronen sind n_0 bzw. Δn . Da Elektronen und Löcher durch Rekombination paarweise erzeugt bzw. „vernichtet“ werden, sind die Überschusddichten für Elektronen und Löcher gleich:

$$\Delta n(t) = \Delta p(t) \quad (1.4)$$

Unter Verwendung der bimolekularen Ratengleichung, ergibt sich für die Rekombinationsrate:

$$W = r [n_0 + \Delta n(t)] [p_0 + \Delta p(t)] \quad (1.5)$$

Im sog. Niederanregungsfall (englisch: *low-level excitation*) ist die durch das Licht erzeugte Ladungsträgerdichte viel kleiner als die Dichte der Majoritätsträger, d.h. $\Delta n \ll (n_0 + p_0)$. Unter Verwendung von Gleichungen (1.1) und (1.4) erhält man aus Gleichung (1.5):

$$\begin{aligned} W &= rn_i^2 + r(n_0 + p_0)\Delta n(t) \\ &= W_0 + W_{excess} \end{aligned} \quad (1.6)$$

Der erste Summand auf der rechten Seite der obigen Gleichung stellt die Rekombinationsrate im Gleichgewichtsfall dar, der zweite die Rekombinationsrate der Überschussladungsträger. Die zeitabhängige Ladungsträgerdichte kann über die Ratengleichung berechnet werden:

$$\frac{dn(t)}{dt} = G - W = (G_0 + G_{excess}) - (W_0 + W_{excess}) \quad (1.7)$$

Dabei sind G_0 und W_0 die Generations- und Rekombinationsraten im Gleichgewichtsfall. Wir nehmen nun an, daß der Halbleiter beleuchtet wird und dadurch Überschussladungsträger erzeugt

1.1 Strahlende Elektron-Loch-Rekombination

werden. Zur Zeit $t = 0$ wird die Beleuchtung ausgeschaltet, wie in Abb. (1.2) dargestellt. Die Rekombinationsrate kann dann durch Einsetzen von Gl. (1.6) in Gl. (1.7) berechnet werden unter Verwendung von $G_0 = W_0$. Man erhält die Differentialgleichung

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = -r(n_0 + p_0)\Delta n(t) \quad (1.8)$$

Die Lösung dieser bekannten Differentialgleichung erfolgt durch Variablenseparation. Man erhält:

$$\Delta n(t) = \Delta n_0 e^{-r(n_0 + p_0)t} \quad (1.9)$$

wobei $\Delta n_0 = \Delta n(t = 0)$. Schreibt man dieses Ergebnis als

$$\Delta n(t) = \Delta n_0 e^{-t/\tau}, \quad (1.10)$$

dann kann man die Lebensdauer τ der erzeugten Ladungsträgerpaare durch folgenden Ausdruck angeben:

$$\tau = \frac{1}{r(n_0 + p_0)} \quad (\text{Niederanregungsfall}) \quad (1.11)$$

Für Halbleiter mit einer speziellen Dotierung reduziert sich dies auf

$$\tau_n = \frac{1}{rp_0} \quad \text{für p-dotierte Halbleiter} \quad (1.12)$$

und

$$\tau_p = \frac{1}{rn_0} \quad \text{für n-dotierte Halbleiter} \quad (1.13)$$

Mit (1.12) bzw. (1.13) kann man die Ratengleichung vereinfachen. Man erhält die monomolekularen Ratengleichungen für p- und n-Halbleiter:

$$\frac{d}{dt}\Delta n(t) = -\frac{\Delta n(t)}{\tau_n} \quad \text{für p-dotierte Halbleiter} \quad (1.14)$$

und

$$\frac{d}{dt}\Delta p(t) = -\frac{\Delta p(t)}{\tau_p} \quad \text{für n-dotierte Halbleiter.} \quad (1.15)$$

Abb. 1.2 zeigt für einen p-dotierten Halbleiter die Dichte der Majoritätsträger (in diesem Fall der Löcher) und der Minoritätsträger (Elektronen) abhängig von der Zeit. Es ist darauf zu achten, daß die Darstellung für den Niederanregungsfall gilt, in welchem die fotoerzeugte Ladungsträgerdichte $\Delta n = \Delta p$ viel kleiner ist als die Dichte p der Majoritätsträger. Wenn die Fotoanregung vorbei ist, fällt n exponentiell mit der Zeitkonstante τ der Minoritätsträger (*minority carrier lifetime*) ab. Man beachte, daß die Dichte der Majoritätsträger mit derselben Zeitkonstante τ abfällt. Allerdings, wie in Abb. 1.2 dargestellt, verschwindet nur ein kleiner Teil der Löcher durch Rekombination. Für den Niederanregungsfall ist die durchschnittliche Zeitdauer für Majoritätsträger bis zur Rekombination viel länger als die Lebensdauer der Minoritätsträger. Für viele praktische Zwecke kann man die Lebensdauer der Majoritätsträger als unendlich lang annehmen.

Theoretische und experimentelle Werte für die Lebensdauer der Minoritätsträger in GaAs in Abhängigkeit der Dotierdichte sind in Abb. 1.3 dargestellt. Die theoretischen Werte wurden unter Verwendung von Gl. (1.10) berechnet unter Verwendung von $W = 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$. In nominell undotiertem Material wurden Minoritätslebensdauern von bis zu $15 \mu\text{s}$ gemessen (bei Raumtemperatur).

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

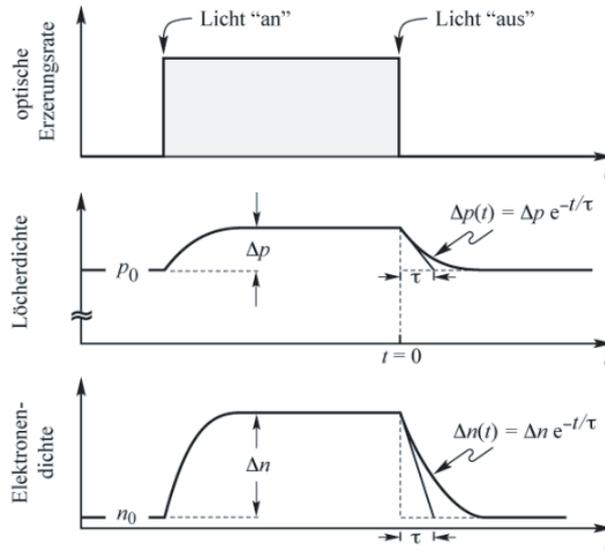


Abbildung 1.2: Ladungsträgerdichten im p-dotierten Halbleiter abhängig von der Zeit vor, während und nach einer optischen Pulsanregung. Es ist $p_0 \gg n_0$. Elektronen und Löcher werden paarweise erzeugt, so daß $\Delta n = \Delta p$ ist. Im Niederanregungsfall, wie hier gezeigt, ist $\Delta n \ll p_0$. In den meisten praktischen Fällen ist die Gleichgewichtsdichte der Minoritätsträger extrem klein, so daß gilt $n_0 \ll \Delta n$.

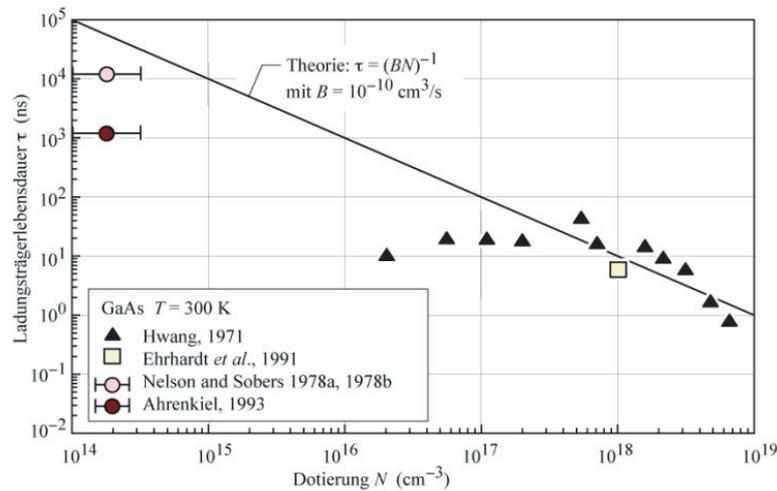


Abbildung 1.3: Lebensdauern von Minoritätsträgern in GaAs abhängig von der Dotierung (für $T = 300$ K). Die experimentellen Werte wurden über Lumineszenzmessungen bestimmt, s. Abschnitt 1.1.3. Die Literaturstellen hierzu sind: Hwang C. J., *J. Appl. Phys.* (1971); Ehrhardt A. et al., *Appl. Phys.* (1991); Nelson R. J., Sobers R. G., *Appl. Phys. Lett.* (1978); Ahrenkiel R. K., in Ahrenkiel R. K., Lundstrom M. S., „Minority carriers in III-V semiconductors: physics and applications“, Academic Press (1993).

1.1.2 Strahlende Rekombination im Hochanregungsfall

Für den Hochanregungsfall ist die fotoerzeugte Ladungsträgerdichte größer als die Gleichgewichtskonzentration, d.h. $\Delta n \gg (n_0 + p_0)$. Die bimolekulare Ratengleichung (1.3) lautet dann

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = -r\Delta n^2 \quad (1.16)$$

Diese Differentialgleichung löst man durch Separation der Variablen. Unter Verwendung der Anfangsbedingung $\Delta n(0) = \Delta n_0$ ergibt sich die Lösung

$$\Delta n(t) = \frac{1}{rt + \Delta n_0^{-1}} \quad (1.17)$$

Anders als beim Niederanregungsfall ergibt sich hier als *keine exponentielle* Abnahme der Ladungsträger. Im Falle eines exponentiellen Abfalls dauert es eine Zeit τ , bis die Ladungsträgerdichte auf $1/e$ ihres Anfangswertes abgefallen ist. Unter Verwendung derselben Definition erhält man für den nicht-exponentiellen Verlauf nach Gl. (1.17) eine „Zeitkonstante“, welche über die Ableitung der Kurve berechnet werden kann:

$$\tau(t) = -\frac{\Delta n(t)}{\frac{d\Delta n(t)}{dt}} \quad (1.18)$$

Für nicht-exponentielle Zeitverläufe hängt die „Zeitkonstante“ von der Zeit t ab. Mit der Definitionsgleichung (1.18) erhält man

$$\tau(t) = t + \frac{1}{r\Delta n_0} \quad (1.19)$$

Das heißt, die Lebensdauer der Minoritätsträger wächst mit der Zeit an. Für ausreichend große Werte von t wird jedoch der Niederanregungszustand erreicht und τ nähert sich dem Niederanregungswert.

1.1.3 Lumineszenzmessung der Rekombinationszeit

Der Ladungsträgerzerfall in Halbleitern kann über die zeitliche Abnahme der Lumineszenz nach Anregung durch einen kurzen optischen Puls gemessen werden. Die Intensität der Lumineszenzstrahlung ist direkt proportional zur Rekombinationsrate. Wenn wir Gleichungen (1.9) und (1.17) zur Verwendung der Rekombinationsrate im Nieder- und im Hochanregungsfall verwenden, dann erhalten wir

$$W = -\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\Delta n_0}{\tau} e^{-t/\tau} \quad (1.20)$$

und

$$W = -\frac{dn(t)}{dt} = \frac{-r}{(rt + \Delta n_0^{-1})^2} \quad (1.21)$$

Abb. 1.5 illustriert beide Fälle. Für den Niederanregungsfall ist das Abklingen der Lumineszenzstrahlung durch eine Exponentialfunktion mit Zeitkonstante τ gegeben, im Hochanregungsfall liegt, wie besprochen ein nicht-exponentieller Verlauf vor. Alle nicht-exponentiellen Zerfallsfunktionen können durch eine Exponentialfunktion mit zeitabhängiger Zeitkonstante ausgedrückt werden, d.h. durch $\exp[-t/\tau(t)]$. Die Zeitkonstante wächst mit der Zeit an. Solche Zerfallsfunktionen werden häufig als „gestreckte Exponentialfunktionen“ bezeichnet.

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

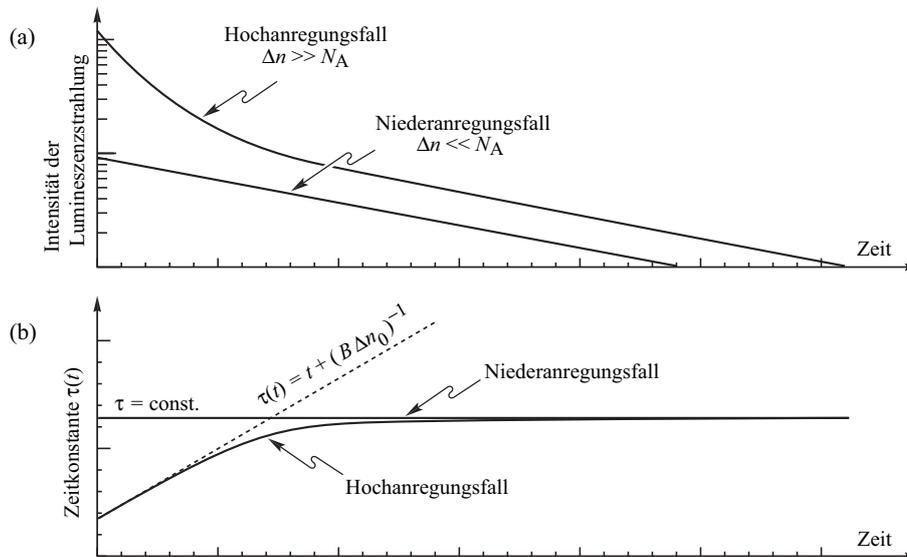


Abbildung 1.4: a) Zeitlicher Verlauf der Lumineszenzstrahlung sowie b) Zeitabhängigkeit der Zeitkonstanten im Nieder- und im Hochanregungsfall.

Die Rekombinationsdynamik der Ladungsträger ist einer der begrenzenden Faktoren für die Umschaltzeit bei LEDs. Diese kann durch die Lebensdauer der Minoritätsträger begrenzt werden. Die Lebensdauer der Minoritätsträger wiederum kann entweder durch eine hohe Dotierung der aktiven Zone reduziert werden oder durch eine hohe Konzentration der injizierten Ladungsträger in der aktiven Zone. Daher werden für die Realisierung von LEDs mit kurzen Schaltzeiten (Anwendung in der Übertragungstechnik) Heterostrukturen verwendet, welche die freien Ladungsträger auf einen engen Bereich konzentrieren (elektrisches *confinement*).

1.2 Nichtstrahlende Rekombination

1.2.1 Nichtstrahlende Rekombination im Volumenmaterial

Elektronen und Löcher können strahlend oder nichtstrahlend rekombinieren. Bei der strahlenden Rekombination wird ein Photon emittiert und zwar mit einer Energie, die der Bandlückenenergie des Halbleiters entspricht (Abb. 1.5). Bei der nichtstrahlenden Rekombination wird die Elektronenenergie in Schwingungsenergie der Gitteratome umgewandelt. Es werden sogenannte *Phononen* erzeugt, das sind die den Gitterschwingungen zugeordneten Quantenzustände (analog zur Bezeichnung *Photon* für den Quantenzustand eines optischen Wellenfelds). Die Elektronenenergie wird also in Wärme umgewandelt. Aus offensichtlichen Gründen stellt die nichtstrahlende Rekombination für Lichtemitter den unerwünschte Fall dar.

Es gibt mehrere physikalische Mechanismen, durch welche nichtstrahlende Rekombination erfolgen kann. Die häufigste Ursache besteht im Auftreten von Defektstellen in der Kristallstruktur. Diese Defekte beinhalten unerwünschte Fremdatome, natürliche (sog. native) Fehlstellen, Dislokationen sowie jede Kombination von Defekten, Fremdatomen oder Dislokationen. In Verbindungshalbleitern sind native Defekte z.B. Zwischengitterplätze, Fehlstellen (Gitterlücken) und Umkehrdefekte. All diese Defekte äußern sich im Energiediagramm anders als wenn man ein

1.2 Nichtstrahlende Rekombination

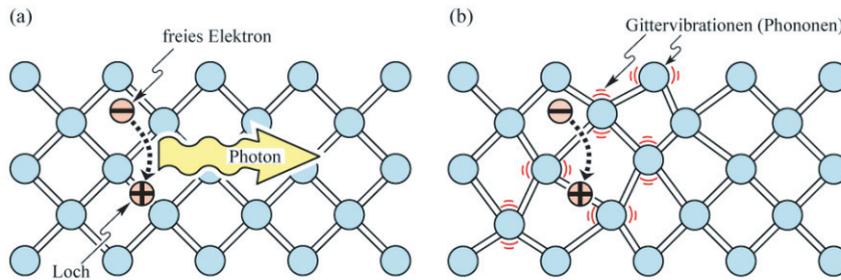


Abbildung 1.5: a) Strahlende Rekombination eines Elektron-Loch-Paars durch Emission eines Photons. b) Bei der nichtstrahlenden Rekombination wird die freiwerdende Energie in Phononen umgewandelt (Darstellung nach W. Shockley, „Electrons and holes in semiconductors“, D. van Nostrand Co., New York, 1950).

Gitteratom einfach durch ein Fremdatom ersetzt. Es entstehen charakteristische Energiezustände, häufig in der verbotenen Bandlücke.

Energiezustände innerhalb der Bandlücke sind effiziente Rekombinationszentren, insbesondere wenn das Energieniveau etwa in der Mitte der Bandlücke liegt. Die Rekombination von Ladungsträgern über einen solchen tiefen Energiezustand (auch: Fangstelle, engl.: *trap level*) wird durch Abb. 1.6 dargestellt. Da solche Energieniveaus die nichtstrahlende Rekombination fördern, bezeichnet man sie auch als „Lumineszenzkiller“.

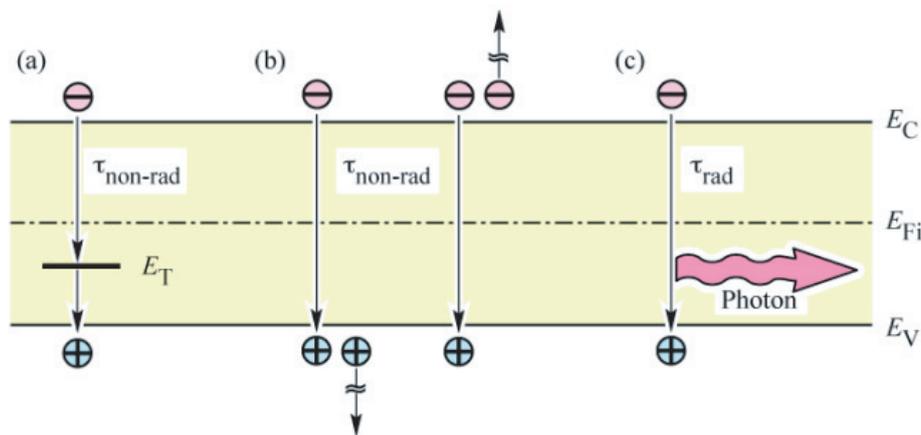


Abbildung 1.6: Energiediagramm für die nichtstrahlende Rekombination über a) ein tiefes Energieniveau, b) einen Auger-Prozeß, c) strahlende Rekombination.

Die Rekombination von freien Ladungsträgern über tiefe Energiezustände wurde zuerst von Shockley, Read und Hall Anfang der 1950er Jahre untersucht. Sie gaben für Rekombinationsrate über einen tiefen Energiezustand mit Energie E_T und Dichte N_t folgende Gleichung an:

$$W_{SR} = \frac{p_0 \Delta n + n_0 \Delta p + \Delta n \Delta p}{(N_t v_p \sigma_p)^{-1} (n_0 + n_1 + \Delta n) + (N_t v_n \sigma_n)^{-1} (p_0 + p_1 + \Delta p)} \quad (1.22)$$

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

mit

$$\begin{aligned} \Delta n &= \Delta p \\ v_n, v_p &- \text{thermische Geschwindigkeit von Elektronen bzw. Löchern} \\ \sigma_n, \sigma_p &- \text{Wirkungsquerschnitte der Fehlstellen} \end{aligned}$$

Die Größen n_1 und p_1 sind die Dichten der Elektronen und Löcher, falls die Fermienergie beim Fehlstellenniveau liegt. Sie sind durch folgende Ausdrücke gegeben:

$$n_1 = n_i e^{\frac{E_T - E_{F_i}}{kT}} \quad \text{und} \quad p_1 = n_i e^{\frac{E_{F_i} - E_T}{kT}} \quad (1.23)$$

Hierbei ist E_{F_i} das intrinsische Fermi-Niveau, welches typischerweise nahe der Mitte der Bandlücke liegt.

Die Lebensdauer der Überschusselektronen kann über die Gleichung $W_{SR} = \Delta n / \tau$ hergeleitet werden. Daher folgt für die Lebensdauer:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{p_0 + n_0 + \Delta p}{(N_t v_p \sigma_p)^{-1} (n_0 + n_1 + \Delta n) + (N_t v_n \sigma_n)^{-1} (p_0 + p_1 + \Delta p)} \quad (1.24)$$

Wir unterscheiden nun zwischen Majoritäts- und Minoritätsträgern und nehmen an, daß es sich um einen p-leitenden Halbleiter handelt. Dann sind die Löcher in der Überzahl, d.h. $p_0 \gg n_0$ und $p_0 \gg p_1$. Wenn wir weiter annehmen, daß eine kleine Abweichung vom Gleichgewichtsfall vorliegt, d.h. $\Delta n \ll p_0$, dann ist die Lebensdauer der Minoritätsträger durch

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{n_0}} = N_t v_n \sigma_n \quad (1.25)$$

gegeben. In dem Falle, daß Elektronen die Majoritätsträger sind (n-leitender Halbleiter), ist die Lebensdauer analog:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{p_0}} = N_t v_p \sigma_p \quad (1.26)$$

Diese Ergebnisse zeigen, daß die Shockley-Read-Rekombinationsrate begrenzt ist durch die Rate, mit welcher Minoritätsträger eingefangen werden. Dieses Ergebnis wird dadurch begründet, daß der Einfang von Majoritätsträgern ein viel wahrscheinlicheres Ereignis ist als der Einfang von Minoritätsträgern. Gleichung (1.24) kann dann wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{p_0 + n_0 \Delta p}{\tau_{p_0} (n_0 + n_1 + \Delta n) + \tau_{n_0} (p_0 + p_1 + \Delta p)} \quad (1.27)$$

Für kleine Abweichungen vom Gleichgewichtsfall, d.h. $\Delta n \ll p_0$, vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$\tau = \tau_{n_0} \frac{p_0 + p_1}{p_0 + n_0} + \tau_{p_0} \frac{n_0 + n_1 + \Delta n}{p_0 + n_0} = \tau_{n_0} \frac{p_0 + p_1}{p_0 + n_0} \quad (1.28)$$

Beim Betrachten der Gleichung stellen wir fest, daß die Lebensdauer sich für kleine Abweichungen vom Gleichgewicht nicht ändert.

Für das weitere Verständnis nehmen wir an, daß die Falle Elektronen und Löcher mit der jeweils gleichen Rate einfängt, d.h. $v_n \sigma_n = v_p \sigma_p$ und $\tau_{n_0} = \tau_{p_0}$. Man erhält mit Gl. (1.28)

$$\tau = \tau_{n_0} \left(1 + \frac{p_0 + p_1}{p_0 + n_0} \right). \quad (1.29)$$

1.2 Nichtstrahlende Rekombination

Für den Fall von intrinsischem Material, d.h. $n_0 = p_0 = n_i$, vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$\tau_i = \tau_{n_0} \left(1 + \frac{p_1 + n_1}{2n_i} \right) = \tau_{n_0} \left[1 + \cosh \left(\frac{E_T - E_{F_i}}{kT} \right) \right] \quad (1.30)$$

Die cosh-Funktion in Gl. (1.30) weist Minima auf, wenn ihr Argument Null wird. Daher wird die Lebensdauer minimal für $E_T - E_{F_i} = 0$, d.h. wenn das *Trap*-Energieniveau E_T bei oder nahe bei der Mitte der Bandlücke liegt. In diesem Fall ist die Lebensdauer durch $\tau = 2\tau_{n_0}$ gegeben. Dieses Ergebnis zeigt, daß tiefe Energiezustände effiziente Rekombinationszentren sind, wenn sie in der Mitte der Bandlücke liegen.

In der Nachbarschaft eines tiefen Energiezustands reduziert sich somit die Effizienz der Lumineszenz. Ein einzelner Punktdefekt ist wegen seiner relativ geringen Wirkung nur schwer zu beobachten. Häufig gruppieren sich jedoch mehrere Defektstellen zu Clustern oder ausgedehnten Defektstellen. Solche ausgedehnten Defekte sind z.B. Schraubendislokationen oder Versatzdislokationen, die auftreten, wenn Halbleiter auf fehlangepaßte Substrate aufgewachsen werden, d.h. wenn unterschiedliche Gitterkonstanten vorliegen. Es gibt auch eine große Zahl anderer ausgedehnter Defekte. Die lumineszenz-störende Wirkung von ausgedehnten Defekten ist in Abb. 1.7 dargestellt. Hier ist die Kathodolumineszenzaufnahme einer GaAs-Schicht bei Raumtemperatur gezeigt. In der Aufnahme erkennt man mehrere dunkle Punkte. Diese entstehen durch die reduzierte Lumineszenz in der Nähe der nichtstrahlenden Rekombinationszentren. Die Größe der Punkte entspricht der Größe der Defekte und der Diffusionslänge der Minoritätsträger.

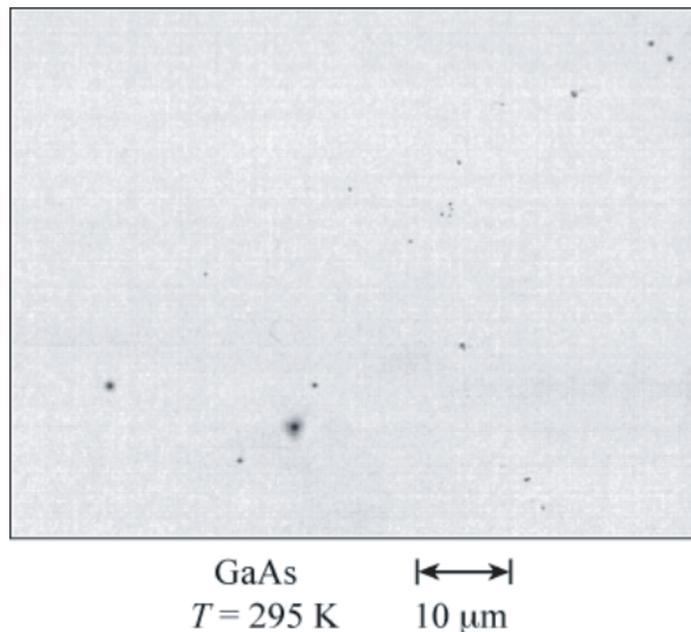


Abbildung 1.7: Mikroaufnahme einer epitaktischen GaAs-Schicht mit Hilfe von Kathodolumineszenz nach Schubert (1995). Die dunklen Punkte entstehen durch große Cluster nichtstrahlender Rekombinationszentren.

Zwar sind die meisten tiefen Energiezustände nichtstrahlend, aber es gibt auch Ausnahmen. Einige wenige tiefe Energiezustände haben strahlende Übergänge. Ein Beispiel für einen strahlenden

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

Übergang in GaN ist in Abb. 1.8 gezeigt. Hier sieht man das Lumineszenzspektrum für den Band-Band-Übergang bei 365 nm und einen breiten Übergang für ein tiefes Energieniveau bei 550 nm (mit wesentlichen Anteilen im gelben Bereich des sichtbaren Spektrums). Die gelbe Lumineszenzlinie kommt durch GaAs-Fehlstellen zustande (Grieshaber, W., Schubert, E. F., Goepfert, I. D., Karlicek, R. F. Jr., Schurmann, M. J., Tran C., J. Appl. Phys. 80 (1996) 4615).

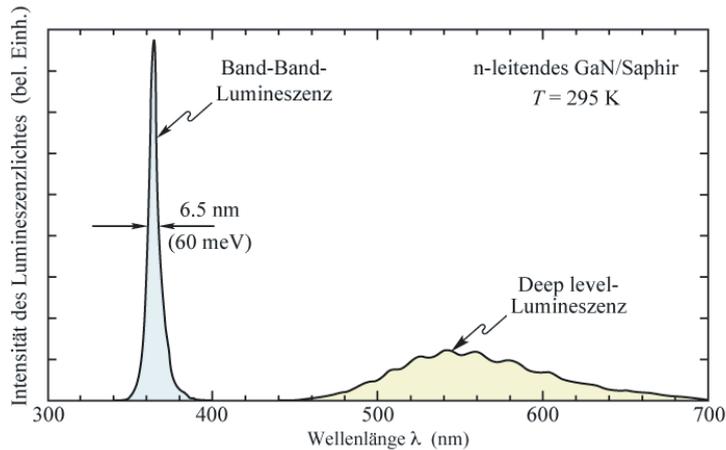


Abbildung 1.8: Fotolumineszenzspektrum von GaN mit einem Band-Band-Übergang bei 365 nm und einem zweiten Übergang bei 550 nm. Der zweite Übergang wurde als ein optisch aktiver Übergang eines tiefen Energiezustands identifiziert.

Tiefe Energiezustände können durch native Defekte erzeugt werden, z.B. durch Ga-Fehlstellen, unerwünschte Fremdatome, Versetzungen, komplexe Verunreinigungsdefekte sowie durch Kombination unterschiedlicher Defekte.

Ein weiterer wichtiger nichtstrahlender Rekombinationsmechanismus ist die *Auger-Rekombination*. Bei diesem Prozeß wird die durch Elektron-Loch-Rekombination freiwerdende Energie (ungefähr gleich E_G) durch Anregung eines Elektrons hoch im Leitungsband oder eines Lochs tief im Valenzband dissipiert. Diese Prozesse sind in Abb. 1.6b schematisch dargestellt. Die hochangeregten Ladungsträger verlieren nach und nach ihre Energie durch mehrfache Phononenanregung, bis sie nahe bei der jeweiligen Bandkante liegen. Die Rekombinationsraten für den Auger-Prozeß sind durch

$$W_{Auger} = C_p n p^2 \quad (1.31)$$

bzw.

$$W_{Auger} = C_n n^2 p \quad (1.32)$$

gegeben. Die Auger-Rekombinationsrate ist proportional zum Quadrat der Ladungsträgerkonzentrationen (entweder p^2 oder n^2), da für den Rekombinationsprozeß zwei gleichartige Ladungsträger (entweder zwei Löcher oder zwei Elektronen) erforderlich sind. In einem p-leitenden Halbleiter tritt der erste Prozeß (s. Gl. (1.31)) mit höherer Wahrscheinlichkeit auf (wegen der reichlich vorhandenen Löcher), in einem n-leitenden Halbleiter der zweite nach Gl. 1.32.

Bei der Auger-Rekombination müssen Energie und Impuls erhalten bleiben. Infolge der unterschiedlichen Struktur von Valenz- und Leitungsband sind die Auger-Koeffizienten, C_p und C_n i.a. unterschiedlich.

1.2 Nichtstrahlende Rekombination

Im Hochanregungsfall, wo die Nichtgleichgewichtsladungsträger eine höhere Dichte haben als die Gleichgewichtsladungsträger, reduzieren sich die Auger-Ratengleichungen zu

$$W_{Auger} = (C_p + C_n)n^3 = Cn^3 \quad (1.33)$$

wobei C der Auger-Koeffizient ist. Typische Werte für C liegen im Bereich von $10^{-29} \dots 10^{28} \text{cm}^6/\text{s}$ für III-V-Halbleiter.

Auger-Rekombination reduziert die Effizienz der Lumineszenz in Halbleitern nur bei sehr hohen Anregungsintensitäten oder bei sehr hohen Ladungsträgerkonzentrationen. Die Ursache hierfür ist die kubische Abhängigkeit von der Ladungsträgerkonzentration. Bei niedrigen Ladungsträgerdichten ist die Augerrekombination sehr gering und kann daher für praktische Zwecke vernachlässigt werden. Die Zahlenwerte für die Augerkoeffizienten lassen sich über quantenmechanische Berechnungen ermitteln, welche die Bandstruktur des jeweiligen Halbleitermaterials berücksichtigen.

1.2.2 Nichtstrahlende Rekombination an Oberflächen

Schnelle nichtstrahlende Rekombination tritt vor allem auch an den Oberflächen von Halbleitern auf. Oberflächen stellen eine starke Beeinträchtigung der Periodizität des Kristallgitters dar. In diesem Zusammenhang erinnern wir uns daran, daß strikte Periodizität eine Voraussetzung für das Bändermodell darstellt. Da diese Periodizität an einer Oberfläche endet, muß das Banddiagramm für diesen Fall modifiziert werden. Diese Modifikation beinhaltet das Hinzufügen elektronischer Zustände im Bereich der Bandlücke.

Wir betrachten die Oberfläche eines Halbleiters vom chemischen Standpunkt aus. Für Atome an der Oberfläche liegen andere Voraussetzungen für das Eingehen von Bindungen vor als für Atome im Inneren des Kristalls. Ursache ist das teilweise Fehlen von Nachbaratomen. Daher sind einige der Atomorbitale nicht an einer chemischen Bindung beteiligt. Diese teilweise aufgefüllten Energieorbitale (oder: *dangling bonds* – von dem englischen Wort *dangling*: baumelnd) entsprechen Energiezuständen in der verbotenen Bandlücke des Halbleiters, wo sie als Rekombinationszentren wirken. Abhängig vom Ladungszustand dieser Valenzorbitale verhalten sich diese Rekombinationszentren wie Akzeptoren bzw. Donatoren.

Die *dangling bonds* können sich auch selbst umarrangieren und zu Bindungen zwischen benachbarten Atomen an der Oberfläche führen. Diese *Oberflächenrekonstruktion* kann lokal zu neuartigen Atomstrukturen führen, welche andere Energiezustände aufweisen als das Volumenmaterial. Die Oberflächenbindungsstruktur hängt von den spezifischen Eigenschaften der Halbleiteroberfläche ab. Die energetische Zuordnung von Oberflächenzuständen ist sehr schwierig, selbst mit leistungsfähigen theoretischen Modellen. Daher werden meist phänomenologische Modelle für die Oberflächenrekombination benutzt.

Es ist gezeigt worden, daß an Oberflächen elektronische Zustände innerhalb der verbotenen Bandlücke auftreten. Das Fundament zum Verständnis von Oberflächenzuständen und ihrer Rolle als Rekombinationszentren wurde von Bardeen und Shockley 1950 gelegt.

Wir berechnen nun den Einfluß der Oberflächenrekombination auf die Ladungsträgerverteilung für einen p-leitenden Halbleiter. Wir nehmen an, daß der Halbleiter beleuchtet wird und daß diese Beleuchtung im Gleichgewichtszustand für eine gleichmäßige Generationsrate G sorgt. Die Kontinuitätsgleichung muß dann an jedem Ort im Halbleiter erfüllt sein. Im eindimensionalen Fall

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

lautet sie:

$$\frac{\partial \Delta n(x, t)}{\partial t} = G - W + \frac{1}{e} \frac{\partial J_n}{\partial x} \quad (1.34)$$

Dabei ist J_n die Stromdichte, welche durch den Elektronenfluß hin zur Oberfläche erzeugt wird. Im Innern eines homogenen Halbleiters wird keine Orts- und Zeitabhängigkeit vorliegen und daher lautet in diesem Fall die Kontinuitätsgleichung $G = W$. Mit dem Ausdruck für die Rekombinationsrate gemäß Gleichung (1.14) bestimmt sich die Überschußträgerdichte im Volumenmaterial zu $\Delta n_\infty = G\tau_n$ (siehe Abb. 1.9). Mit der Annahme, daß der Elektronenstrom ein Diffusionsstrom der Form

$$J_n = eD_n \frac{\partial \Delta n(x, t)}{\partial x} \quad (1.35)$$

ist und durch Einsetzen in Gleichung (1.34) erhalten wir die Kontinuitätsgleichung für diffusive Ströme, d.h.

$$\frac{\partial \Delta n(x, t)}{\partial t} = G - \frac{\Delta n(x, t)}{\tau_n} + D_n \frac{\partial^2 \Delta n(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.36)$$

An der Halbleiteroberfläche werden die Ladungsträger schnell rekombinieren wegen der dort vorhandenen Oberflächenzustände. Die Randbedingung an der Oberfläche ist daher gegeben durch

$$eD_n \left. \frac{\partial \Delta n(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = eS \Delta n(x, t)|_{x=0} \quad (1.37)$$

wobei S die Rekombinationsgeschwindigkeit an der Oberfläche ist. Diese Randbedingung beinhaltet, daß Minoritätsträger, welche zur Oberfläche hin diffundieren, dort rekombinieren. Wir nehmen an, daß die Erzeugungsrate G unabhängig von der Zeit ist, d.h. damit ist auch die Minoritätsträgerdichte unabhängig von t . Damit ergibt sich als Lösung der Differentialgleichung im Gleichgewichtsfall unter obiger Randbedingung:

$$n(x) = n_0 + \Delta n(x) = n_0 + \Delta n_\infty \left[1 - \frac{\tau_n S e^{-x/L_n}}{L_n + \tau_n S} \right] \quad (1.38)$$

Die Ladungsträgerdichte nahe an der Oberfläche ist in Abb. 1.9 für unterschiedliche Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten dargestellt. Für $S \rightarrow 0$ ist die Minoritätsträgerdichte identisch zum Wert für das Volumenmaterial, d.h. $\Delta n(0) = n_0 + \Delta n_\infty$. Im anderen Extremfall, d.h. für $S \rightarrow \infty$, nähert sich die Minoritätsträgerdichte an der Oberfläche dem Gleichgewichtswert an, d.h. $n(0) \rightarrow n_0$.

1.2 Nichtstrahlende Rekombination

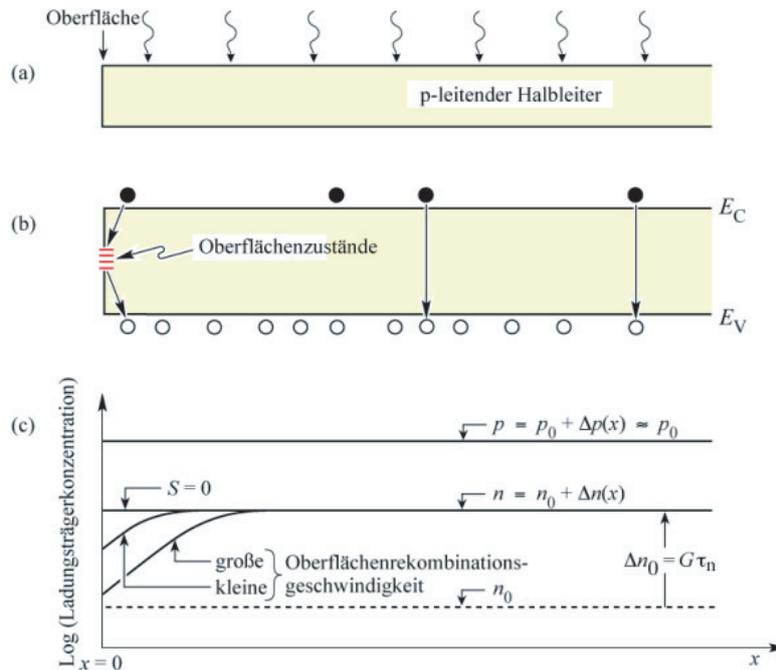


Abbildung 1.9: Beleuchteter p-leitender Halbleiter a). b) Banddiagramm und c) Dichten der Minoritäts- und Majoritätsträger nahe der Oberfläche. Es ist dabei angenommen, daß die Beleuchtung eine homogene Ladungsträgerdichte erzeugt. Die Überschußdichten sind Δn und Δp .

Oberflächenrekombination führt zu einer reduzierten Lumineszenzeffizienz sowie zur Erwärmung der Oberfläche. Beide Effekte sind bei elektrolumineszenten Bauelementen offensichtlich unerwünscht. Die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit S ist für einige wichtige Halbleiter in Tabelle 1.1 angegeben. Die Daten zeigen, daß GaAs eine besonders große Rekombinationsgeschwindigkeit aufweist.

Material	S in cm/s
GaAs	10^6
InP	10^3
Si	10^1

Tabelle 1.1: Geschwindigkeiten der Oberflächenrekombination für unterschiedliche Halbleitermaterialien.

Der experimentelle Nachweis der Oberflächenrekombination ist in Abb. 1.10 illustriert. Hierzu wurde auf der Rückseite eines GaAs-Plättchens ein metallischer Streifenkontakt angebracht. Über den Streifenkontakt werden Ladungsträger injiziert. Das Foto stellt eine Seitenansicht des Substrats dar, so daß der Streifenkontakt „hinter“ dem lichtemittierenden Bereich liegt. Man sieht, wie die Lumineszenz in der Nähe der Oberfläche auf Grund der Oberflächenrekombination abnimmt.

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

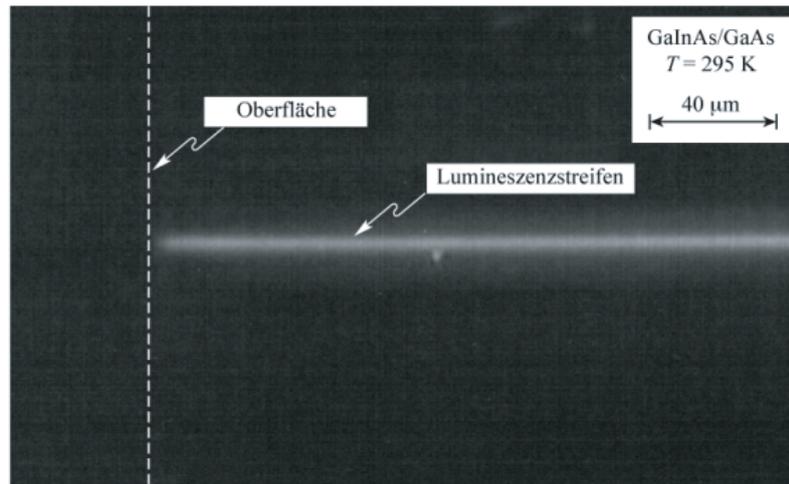


Abbildung 1.10: Mikroskopaufnahme einer GaInAs//GaAs-Struktur mit einem Streifenkontakt auf der einen Seite und einem Kontaktfenster auf der gegenüberliegenden Seite. Bei Stromfluß wird im Bereich des Streifenkontakts durch Ladungsträgerinjektion und Rekombination Lumineszenzlicht erzeugt. Im Bereich der Oberfläche des Substrats ist die Intensität des Lumineszenzlichts deutlich reduziert.

Oberflächenrekombination kann nur dann auftreten, wenn beide Ladungsträgertypen vorhanden sind. Beim Entwurf von lichtemittierenden Bauelementen wie LEDs ist es wichtig, daß die aktive Region, in welche Ladungsträger injiziert werden und wo natürlich beide Ladungsträgertypen auftreten, möglichst großen Abstand zu den Oberflächen aufweist. Dies kann zum Beispiel dadurch erreicht werden, daß man den metallischen Kontakt zur Ladungsträgerinjektion wesentlich kleiner macht als das Halbleitersubstrat und daß der Abstand des Kontakts von den Oberflächen maximiert wird. Wenn die Ladungsträger auf den Bereich unterhalb des Kontakts begrenzt werden (*confinement*), dann „sehen“ sie keine Oberflächen. Man beachte, daß in den unipolaren Bereichen eines Halbleiterbauelements die *Confinement*-Bereiche nicht durch Oberflächenrekombination beeinflusst werden und zwar wegen des Mangels an Minoritätsträgern in diesen Regionen.

Um die Oberflächenrekombination klein zu halten, sind unterschiedliche Verfahren zur Passivierung von Oberflächen entwickelt worden. Diese beinhalten u.a. die Behandlung mit Schwefel oder anderen Chemikalien.

1.2.3 Wettbewerb zwischen strahlender und nichtstrahlender Rekombination

Bisher haben wir gesehen, daß mehrere Mechanismen für die nichtstrahlende Rekombination existieren, u.a. Shockley-Read, Auger und Oberflächenrekombination. Auch wenn man durch geeignete Maßnahmen die nichtstrahlende Rekombination reduzieren kann, so kann sie doch nicht vollständig ausgeschlossen werden. Zum Beispiel, wie oben angesprochen, kann man die Oberflächenrekombination drastisch reduzieren, wenn man durch geeignetes Design eines Bauelements die aktive Zone räumlich von den Oberflächen separieren kann. Allerdings, selbst bei großem Abstand zu den Oberflächen werden einige Ladungsträger dennoch zu den Oberflächen hin diffundieren und dort rekombinieren.

So wie die Oberflächenrekombination können auch die nichtstrahlende Rekombination im Volu-

menmaterial und die Auger-Rekombination nie ganz vermieden werden. Ein Halbleiterkristall bei Raumtemperatur wird immer native Defekte aufweisen. Die Dichte dieser nativen Defekte kann sehr gering sein, ist jedoch nie gleich Null. Aufgrund von thermodynamischen Überlegungen kann man vorhersagen, daß die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Punktdefekts, für dessen Erzeugung eine Energie E_a aufgebracht werden muß, durch den Boltzmann-Faktor $\exp(-E_a/kT)$ gegeben ist. Das Produkt der Dichte von Gitterstellen mit dem Boltzmann-Faktor gibt die Dichte der Defekte. Ein nativer Punktdefekt oder ein ausgedehnter Defekt können einen tiefen Energiezustand in der Bandlücke erzeugen und daher als nichtstrahlendes Rekombinationszentrum wirken.

Beispiel 1.1 Dichte von Punktdefekten

Wir nehmen an, daß die Energie, welche erforderlich ist, um ein Gitteratom in eine Zwischengitterposition zu bewegen $E_a = 1$, 1eV beträgt. Wie groß ist die Gleichgewichtsdichte für Zwischengitterdefekte in einem einfachen kubischen Gitter mit der Gitterkonstanten $a_0 = 2,5\text{\AA}$?

Lösung:

Die Dichte der Gitteratome in einem kubischen Gitter ist $N = a_0^{-3} = 6,4 \times 10^{22}$. Die Dichte von Zwischengitterfehlstellen ist bei Raumtemperatur und im thermischen Gleichgewicht

$$N_{defekt} = N e^{-E_a/kT} = 2,7 \times 10^4 \text{cm}^{-3}$$

Dieser Wert ist klein im Vergleich zu den üblichen Werten für die Dichten von Elektronen und Löchern. Wenn die Defektart, die wir hier besprechen, ein Energieniveau in der Bandlücke einnimmt, kann nichtstrahlende Rekombination über das Defektniveau stattfinden.

Ein weiterer Aspekt ist die chemische Reinheit der Halbleiter. Es ist schwierig Materialien mit Verunreinigungen von weniger als 10^{-9} (in der englischsprachigen Literatur abgekürzt mit *ppb* = *parts per billion*. Man beachte: im Englischen bedeutet *billion* eine Milliarde, also 10^9). D.h., selbst die reinsten Halbleitermaterialien enthalten Verunreinigungen in der Größenordnung 10^{12}cm^{-3} . Einige Elemente können tiefe Energiezustände erzeugen und die Lumineszenzeffizienz reduzieren.

In den 1960er Jahren, als die ersten III-V-Halbleiter demonstriert wurden, lagen die Werte für die innere Lumineszenzeffizienz unterhalb von 1%. Heute weisen hochreine Volumenmaterialien und Quantentopf-Strukturen Effizienzwerte von mehr als 90% auf, in einigen Fällen sogar 99%. Die Ursache für diesen bemerkenswerten Fortschritt liegt in den Verbesserungen bei der Kristallqualität, insbesondere geringen Defekt- und Verunreinigungsdichten.

1.2.4 Interner Quantenwirkungsgrad

Wir berechnen nun den internen Quantenwirkungsgrad in einem Halbleiter mit nichtstrahlenden Rekombinationszentren. Der interne Quantenwirkungsgrad η_i eines Halbleiters ist definiert als das Verhältnis von strahlenden Rekombinationsprozessen zur Gesamtzahl von Rekombinationsprozessen (d. h. strahlend und nicht-strahlend). η_i stellt eine wichtige Größe dar, die angibt, wie gut sich ein Halbleitermaterial zur Herstellung von Lichtquellen eignet. Man beachte, daß nicht alle intern

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

erzeugten Photonen den Halbleiter verlassen. Bedingt durch innere Totalreflexion, Reabsorption im Substrat oder anderen Reabsorptionsmechanismen wird nur ein Teil ausgekoppelt.

Wir bezeichnen mit τ_r die Lebensdauer für strahlende Rekombination (r für *radiative*; strahlend) und mit τ_{nr} (*non-radiative*) die Lebensdauer für nichtstrahlende Rekombination. Die Gesamtwahrscheinlichkeit für das Ereignis Rekombination ist dann durch die Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten gegeben:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}} \quad (1.39)$$

Die relative Wahrscheinlichkeit für die strahlende Rekombination ist durch das Verhältnis der Einzelwahrscheinlichkeit und der Gesamtwahrscheinlichkeit gegeben. Diese relative Wahrscheinlichkeit stellt den *internen Quantenwirkungsgrad* dar:

$$\eta_{\text{int}} = \frac{\tau_r^{-1}}{\tau_r^{-1} + \tau_{nr}^{-1}} \quad (1.40)$$

Mit Hilfe des Zusammenhangs zwischen Erzeugungsrate und Lebensdauer können wir auch schreiben:

$$\eta_{\text{int}} = \frac{r_r}{r} = \frac{r_r}{r_r + r_{nr}} \quad (1.41)$$

Die Lebensdauer τ_r für die strahlende Rekombination bestimmt die Raten für die Absorption und die Rekombination. Der Wert für τ_r hängt von den Ladungsträgerkonzentrationen und dem Rekombinationsparameter r_r ab. Für nicht zu große Konzentrationen ist

$$\tau_r \approx \frac{1}{r_r(n_0 + p_0)} \quad (1.42)$$

Eine ähnliche Gleichung gilt für die Lebensdauer für die nichtstrahlende Rekombination. Wenn die nichtstrahlende Rekombination allerdings über Defektzentren stattfindet, hängt τ_{nr} stärker von der Konzentration dieser Zentren ab als von der Konzentration von Elektronen und Löchern. Für Si und GaAs sind die Werte für die Rekombinationsrate r_r , die Rekombinationslebensdauern sowie für den internen Quantenwirkungsgrad der Größenordnung nach in Tabelle 1.2 aufgeführt. Für einen indirekten Halbleiter wie Si liegt die Lebensdauer für die strahlende Rekombination um mehrere Größenordnungen über der Gesamtlebensdauer für die Rekombination, was zu einem kleinen internen Quantenwirkungsgrad führt. Bei GaAs hingegen mit seinem direkten Bandübergang sind beide Rekombinationslebensdauern in etwa von der gleichen Größenordnung und η_{int} ist sehr groß.

	r_s	τ_s	τ_n	τ	η_i
Si	$10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	10 ms	100 ns	100 ns	10^{-5}
GaAs	$10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	100 ns	100 ns	50 ns	0,5

Tabelle 1.2: Größenordnungen für r_s , τ_s , τ_n , τ und η_i für Si und GaAs. Es ist angenommen, daß n -dotiertes Material mit $n_0 = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ vorliegt.

1.3 Theorie der strahlenden Rekombination

1.3.1 Van Roosbroeck-Shockley-Modell

Das van Roosbroeck-Shockley-Modell erlaubt es einem, die Rate für die spontane strahlende Rekombination unter Gleichgewichtsbedingungen zu berechnen. Hierfür muß man lediglich einige grundlegende Parameter kennen, nämlich die Bandlückenenergie, den Absorptionskoeffizienten und den Brechungsindex. Diese können alle durch bekannte und einfache Verfahren experimentell bestimmt werden.

Wir betrachten einen Halbleiter mit einem Absorptionskoeffizienten $\alpha(\nu)$ gemessen in Einheiten von cm^{-1} . Die mittlere Entfernung, welche ein Photon der Frequenz ν zurücklegt, bis es absorbiert wird, ist einfach $\alpha(\nu)^{-1}$. Die Zeit, die dabei vergeht ist

$$\tau(\nu) = \frac{1}{\alpha(\nu)v_{gr}} \quad (1.43)$$

wobei v_{gr} die Gruppengeschwindigkeit ist, mit der sich die Photonen im Halbleiter bewegen. Diese ist gegeben durch

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = c \frac{d\nu}{d(\bar{n}\nu)} \quad (1.44)$$

\bar{n} ist der Brechungsindex. Setzt man Gleichung (1.44) in (1.43) ein, so erhält man

$$\frac{1}{\tau(\nu)} = \alpha(\nu)v_{gr} = \alpha(\nu)c \frac{d\nu}{d(\bar{n}\nu)} \quad (1.45)$$

Diese Gleichung gibt die inverse Lebensdauer bzw. Rekombinationswahrscheinlichkeit an. Das Produkt von Rekombinationswahrscheinlichkeit mit der Photonendichte ergibt die Absorptionsrate für Photonen pro Zeiteinheit pro Volumeneinheit.

Im thermischen Gleichgewicht ist die Photonendichte pro Volumeneinheit in einem Medium mit Brechungsindex \bar{n} durch die Planck'sche Strahlungsformel gegeben:

$$N(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\lambda \quad (1.46)$$

Hieraus können wir $N(\nu)d\nu$ berechnen, also die Anzahl von Photonen mit Frequenzen zwischen ν und $\nu + d\nu$. Man erhält:

$$N(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2\bar{n}^2}{c^3} \frac{d(\bar{n}\nu)}{d\nu} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \quad (1.47)$$

Die Absorptionsrate pro Volumeneinheit im Frequenzintervall zwischen ν und $\nu + d\nu$ ist durch das Verhältnis von Photonendichte und mittlerer Lebensdauer für Photonen gegeben:

$$R_0(\nu) = \frac{N(\nu)}{\tau(\nu)} = \frac{8\pi\nu^2\bar{n}^2}{c^3} \frac{d(\bar{n}\nu)}{d\nu} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \alpha(\nu)c \frac{d\nu}{d(\bar{n}\nu)} \quad (1.48)$$

Durch Integration über ν erhält man die Absorptionsrate pro Volumeneinheit.

$$R_0 = \int_0^\infty R_0(\nu)d\nu = \int_0^\infty \frac{8\pi\nu^2\bar{n}^2}{c^2} \frac{\alpha(\nu)}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \quad (\text{van Roesbroeck-Shockley-Gl.}) \quad (1.49)$$

1 Strahlende und nichtstrahlende Rekombination

Die van Roesbroeck-Shockley-Gleichung kann vereinfacht werden, indem man den Absorptionskoeffizienten wie folgt schreibt:

$$\alpha = \alpha_0 \sqrt{\frac{E - E_g}{E_g}} \quad (1.50)$$

Diese Quadratwurzelabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von der Energie ergibt sich aus der Proportionalität zwischen Absorptionskoeffizient und der Dichte der Energiezustände, welche wiederum mit der Energie über eine Wurzelabhängigkeit in Beziehung steht. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich indem man die Frequenzabhängigkeit des Brechungsindex vernachlässigt und den Wert für den Brechungsindex an der Bandkante ansetzt, $\bar{n} = \bar{n}(\nu_g)$. Damit kann man schreiben:

$$R_0 = 8\pi c \bar{n}_g^2 \alpha_0 \sqrt{\frac{kT}{E_g}} \left(\frac{kT}{ch}\right)^3 \int_{x_g}^{\infty} \frac{x^2 \sqrt{x - x_g}}{e^x - 1} dx \quad (1.51)$$

wobei $x = \frac{h\nu}{kT} = \frac{E}{kT}$ ist und $x_g = \frac{E_g}{kT}$.

Wegen des schnellen Anwachsens der Exponentialfunktion mit x trägt nur ein kleiner Bereich von Energien nahe der Bandkante zum Integral bei. Das Integral besitzt keine einfache analytische Lösung und muß numerisch berechnet werden.

Das van Roesbroeck-Shockley-Modell liefert die Rekombinationsrate im *Gleichgewichtszustand*. Wir benutzen dieses Modell nun, um einen Ausdruck für den bimolekularen Rekombinationskoeffizienten herzuleiten, der auch für Nichtgleichgewichtszustände gilt. Die bimolekulare Raten-gleichung besagt, daß $W = rnp$ ist. Im thermischen Gleichgewicht ist $W = W_0 = rn_i^2$. Daher ist der Zusammenhang zwischen dem bimolekularen Rekombinationskoeffizienten und der Rekombinationsrate im Gleichgewichtsfall

$$r = \frac{W_0}{n_i^2} \quad (1.52)$$

Tabelle 1.3 gibt einige Werte für r für unterschiedliche Halbleiter, berechnet gemäß den Gleichungen (1.51) und (1.52). Die Materialparameter sind in der Tabelle mit angegeben. Die berechneten Werte zeigen, daß für III-V-Halbleiter $r = 10^{-11} \dots 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Diese berechneten Werte stimmen gut mit experimentell bestimmten überein. Silizium, als indirekter Halbleiter, besitzt einen viel kleineren bimolekularen Rekombinationskoeffizienten als III-V-Halbleiter.

	E_g (eV)	α_0 (cm^{-1})	\bar{n}_g	W_0 ($\text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$)	n_i (cm^{-3})	r ($\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$)	τ_{spont} (s)
GaAs	1,42	5×10^4	3,3	$2,7 \times 10^3$	2×10^6	$6,8 \times 10^{-10}$	$1,5 \times 10^{-9}$
InP	1,35	5×10^4	3,4	$4,0 \times 10^4$	2×10^7	$4,0 \times 10^{-10}$	$3,0 \times 10^{-9}$
GaN	3,4	1×10^5	2,5	$9,2 \times 10^{-30}$	2×10^{-10}	$2,3 \times 10^{-10}$	$4,3 \times 10^{-9}$
Si	1,12	1×10^3	3,4	$4,1 \times 10^6$	1×10^{10}	$4,1 \times 10^{-14}$	$2,0 \times 10^{-5}$

Tabelle 1.3: Bimolekulare Rekombinationskoeffizienten bei Raumtemperatur für unterschiedliche Halbleiter. Die Berechnung erfolgt nach Gl. (1.51) und (1.52) in Abhängigkeit der Bandlückenenergie, des Absorptionskoeffizienten und des Brechungsindex an der Bandkante. Die spontane Lebensdauer ist durch $\tau_{spont} = 1/(rN_{D,A})$ gegeben und ist für eine Majoritätsträgerkonzentration von 10^{18} cm^{-3} berechnet.

Die bimolekulare Ratengleichung $W = rnp$ gilt für verdünnte Ladungsträgerkonzentrationen, d.h. nicht-entartet dotierten Halbleitern. In diesem Fall ist der bimolekulare Rekombinationskoeffizient

1.3 Theorie der strahlenden Rekombination

fizient unabhängig von der Ladungsträgerdichte. Für sehr hohe Ladungsträgerdichten kann man den bimolekularen Rekombinationskoeffizienten wie folgt ausdrücken:

$$r|_{hoheKonz} = r - \frac{n}{N_C} r^* \quad (1.53)$$

D.h., daß der bimolekulare Rekombinationskoeffizient bei hohen Konzentrationen um $\frac{n}{N_C} r^*$ reduziert wird.

1.3.2 Einstein-Modell

Die erste Theorie über optische Übergänge war von Einstein entwickelt worden. Das Einstein-Modell beinhaltet spontane, stimulierte oder induzierte Übergänge. Spontane Übergänge treten ohne äußere Anregung auf. Im Gegensatz dazu werden stimulierte Übergänge durch äußere Anregung, nämlich ein Photon induziert. Daher ist die Rate für induzierte Anregung proportional zur Photonenzahl oder Strahlungsdichte.

Die Koeffizienten A und B beschreiben spontane und stimulierte Übergänge in einem Atom mit zwei diskreten Energiezuständen. Wir bezeichnen diese Energieniveaus mit „1“ und „2“. Einstein postulierte, daß die Wahrscheinlichkeiten für den Abwärtsübergang $2 \rightarrow 1$ (Emission) und Aufwärtsübergang $1 \rightarrow 2$ (Absorption) durch folgende Ausdrücke beschrieben werden:

$$P_{21} = B_{21}\rho(\nu) + A \quad (1.54)$$

und

$$P_{12} = B_{12}\rho(\nu) \quad (1.55)$$

Die Wahrscheinlichkeit für den Emissionsvorgang hat zwei Terme, nämlich einen für den induzierten Übergang und einen für den spontanen. Der induzierte Term ist proportional zur Strahlungsdichte $\rho(\nu)$, der spontane Term ist A . Die Wahrscheinlichkeit für die Absorption weist nur einen Term auf.

Der Einstein-Koeffizient in einem Atom entspricht dem bimolekularen Rekombinationskoeffizienten in einem Halbleiter. Für ein Atom spielen die Ausdrücke für die Dichte (d.h., n und p) keine Rolle: damit ein Emissionsvorgang auftritt, muß das obere Niveau besetzt sein (ein Elektron, „ $n = 1$ “) und das untere Niveau muß leer sein (ein Loch, „ $p = 1$ “). Einstein zeigte, daß $B_{12} = B_{21} = B$. D.h., stimulierte Absorption und stimulierte Emission sind komplementäre Prozesse. (Diese Äquivalenz kann auch auf der Grundlage quantenmechanischer Überlegungen gezeigt werden, unter Verwendung von Fermis „Goldener Regel“.) Weitere Details zum Einstein-Modell wurden im Kursteil Optoelektronik I behandelt.

Verzeichnis der verwendeten Symbole

C	Auger-Koeffizient
e	Elementarladung ($1,602 \times 10^{-19}$ C)
G	Erzeugungsrate (für Ladungsträger)
J	Stromdichte
\bar{n}	Brechungsindex
n_0	Dichte der Elektronen im thermischen Gleichgewicht
n_i	Dichte der intrinsischen Ladungsträger im thermischen Gleichgewicht
p_0	Dichte der Löcher im thermischen Gleichgewicht
r	bimolekularer Rekombinationskoeffizient
S	Rekombinationsgeschwindigkeit
v_n, v_p	thermische Geschwindigkeit von Elektronen bzw. Löchern
W	Rekombinationsrate
α	Absorptionskoeffizient
η	Wirkungsgrad, Effizienz
σ_n, σ_p	Wirkungsquerschnitte der Fehlstellen
τ	Lebensdauer (von Ladungsträgern)
$\tau_{n,p}$	Lebensdauer von Elektronen bzw. Löchern

1.4 Fragen

1. Was sind freie Ladungsträger in einem Halbleiter, was sind Überschußladungsträger?
2. Was gibt die Rekombinationsrate, was der Rekombinationskoeffizient an?
3. Was bezeichnet man als Niederanregungsfall?
4. Was bezeichnet man als Hochanregungsfall?
5. Was ist ein Elektron-Loch-Paar?
6. Was geschieht im Fall der strahlenden Rekombination?
7. Welche Mechanismen gibt es für die nichtstrahlende Rekombination?
8. Welche Situation beschreibt das van Roosbroeck-Shockley-Modell?
9. Welche typischen Werte nimmt der Rekombinationskoeffizienten für III-V-Halbleiter an?
10. Was sind Einstein-Koeffizienten?