

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Grundlagen vorgestellt, die zur Beschreibung des Ladungsträgertransportes notwendig sind. Nach der Einführung der Boltzmann-Transport-Gleichung und den relevanten Streutermen werden die intrinsischen Streuprozesse erklärt. Dazu werden die Raten für die Streuung von Elektronen mit akustischen und optischen Phononen, die Streuung an Störstellen und mit thermischen Löchern hergeleitet und deren Verlauf mit der Energie und Temperatur diskutiert. Im Anschluss daran wird auf die Rekombinationskanäle eingegangen, insbesondere auf den Elektroneneinfang sowie die strahlende Donator-Akzeptor-Paar-Lumineszenz und die Band-Akzeptor-Lumineszenz. Zum Abschluss wird die intrinsische Leitfähigkeit in p -InP und deren Entwicklung mit der Temperatur beschrieben.

2.1 Ladungsträgertransport - Boltzmann-Transport-Gleichung

Für den Ladungsträgertransport in Halbleitern ist die elektrische Wechselwirkung von Quasiteilchen, Elektronen und Löchern von Bedeutung. Ein Ziel ist die Beschreibung der Stromdichte \mathbf{j} in Bauelementen unter Berücksichtigung der mikroskopischen Eigenschaften des Halbleiters, wie z. B. Bandstruktur, Lebensdauer der Ladungsträger oder elementaren Streuprozesse. Im Fall kleiner elektrischer Felder \mathcal{E} gilt das ohmsche Gesetz $\mathbf{j} = \sigma \mathcal{E}$. Die Leitfähigkeit $\sigma = e(n_e \mu_e + n_h \mu_h)$ fasst die Beiträge der Elektronen (e) und Löcher (h) zum Stromfluss mit Konzentration n und Beweglichkeit μ zusammen. μ ist ein Materialparameter, der sich aus den intrinsischen Streuprozessen ableitet und stark von der Temperatur abhängt. Hohe elektrische Felder führen zusätzlich zu einer Feldabhängigkeit der Beweglichkeit μ . Eine genaue Beschreibung von μ ist nur unter Berücksichtigung der mikroskopischen Verhältnisse im Halbleiter möglich.

Es wird hier ein Modell angewandt, das die Photostromspektren einer Solarzelle bei Anregung nahe der Bandkante in Abhängigkeit von den intrinsischen Streuprozessen, der Rekombination und Temperatur beschreibt.

Dazu wird eine sogenannte *semiklassische* Annahme gemacht, die im Wesentlichen besagt [22]:

- (i) die Ladungsträger lassen sich als punktförmige Teilchen am Ort \mathbf{r} mit einem Impuls $\hbar\mathbf{k}$ beschreiben.
- (ii) die Dichte der Ladungsträger ist niedrig. Deswegen treten nur Zwei-Teilchen-Prozesse auf. Es werden alle erreichbaren Endzustände als unbesetzt angenommen.
- (iii) der Zeitraum t_{Flug} zwischen zwei Streuvorgängen ist lang gegenüber der Dauer der Streuung t_{Stoss} , d. h. $t_{Flug} \gg t_{Stoss}$.

Unter diesen Annahmen wird der Transport der heißen Ladungsträger durch die Boltzmann-Transport-Gleichung (BTG)

$$\frac{df(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{dt} = \left. \frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} \right|_{Störung} \quad (2.1)$$

beschrieben. Die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion $f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)$ ist hierbei die zentrale Größe im semiklassischen Transport. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass der Zustand $\langle \mathbf{r},\mathbf{k} |$ zur Zeit t besetzt ist. Sie ist im ungestörten thermischen Gleichgewicht identisch mit der Fermi-Dirac-Verteilung. Aus $dN = \frac{2}{(2\pi)^3} f(\mathbf{r},\mathbf{k},t) d\mathbf{r} d\mathbf{k}$ erhält man damit die Anzahl der Ladungsträger, die zur Zeit t mit einem Wellenvektor im Intervall $d\mathbf{k}$ um \mathbf{k} und im Intervall $d\mathbf{r}$ um den Ort \mathbf{r} zu erwarten sind.

Mit Kenntnis der Verteilungsfunktion f lassen sich die wichtigsten makroskopischen Größen wie die Elektronendichte

$$n_e(\mathbf{r},t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{r},\mathbf{k},t) d\mathbf{k} \quad (2.2)$$

oder die mittlere Energie

$$\langle E(\mathbf{r},t) \rangle = \frac{1}{n_e(\mathbf{r},t)} \int E(\mathbf{k},t) f(\mathbf{r},\mathbf{k},t) d\mathbf{k} \quad (2.3)$$

bestimmen. Die Integration verläuft hierbei jeweils über die erste Brillouin-Zone.

Erfährt das System von außen eine Störung, wird die Verteilungsfunktion $f = f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)$ aus der Fermi-Dirac-Verteilung ausgelenkt. Die neue Gleichgewichtsverteilung ergibt sich aus der Lösung der BT-Gl. (2.1) mit einem Störterm, der hier folgende Form hat:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{Störung} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \Big|_{Streuung} + W_{Generation} + W_{Rekombination}(\mathbf{k})f + W_{Einfang}(\mathbf{r})f \quad (2.4)$$

Dieser beinhaltet die Streuung von Elektronen durch Phononen, Störstellen und Löcher, die optische Erzeugung der freien Ladungsträger und deren Rekombination, sowie den Einfang der Photoelektronen an der Grenzfläche, wobei letzteres zum Photostrom führt.

Da die Elektronendichte als sehr gering angenommen wird und deshalb jeder mögliche Endzustand nach der Streuung als unbesetzt gilt, ist der Streuoperator linear in der Verteilungsfunktion f und kann durch

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right) \Big|_{\text{Streuung}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] d\mathbf{k}' \quad (2.5)$$

dargestellt werden (V Kristallvolumen) [22, 23]. Die Gesamtstreurate $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ist definiert als die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Elektron pro Einheitszeit aus dem Zustand \mathbf{k} in den Endzustand \mathbf{k}' gestreut wird. Sie setzt sich aus der Summe der unabhängigen Streuraten für die unterschiedlichen Streumechanismen zusammen, die in Kap. 2.2 behandelt werden. In Gl. (2.5) beschreibt demnach der erste Term in der eckigen Klammer den Streuvorgang eines Elektrons in den Zustand \mathbf{k} hinein und der zweite Term die Streuung aus dem Zustand \mathbf{k} heraus.

Im Leitungsband werden pro Einheitszeit und Einheitsvolumen n_e monoenergetische Elektronen mit einer kinetischen Energie $E_{exc} = \frac{\hbar^2 k_{exc}^2}{2m_e^*}$ erzeugt. Die Erzeugungsrate hat dann die Form [20]

$$W_{\text{Generation}}(\mathbf{k}) = 2n_e \pi^2 \frac{1}{k_{exc}^2} \delta(|\mathbf{k}| - k_{exc}) \quad (2.6)$$

wobei $n_e = \frac{2}{(2\pi)^3} \int W_{\text{Generation}}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$ gilt. Wegen der Ladungserhaltung ist die Anzahl der photoerzeugten Elektronen n_e gleich der Summe der Elektronen, die rekombinieren bzw. zum Photostrom beitragen.

Auf den Term der Rekombination wird in Kap. 2.3 eingegangen und die Art der Entstehung des Photostroms im Absorber in Kap. 5.1 diskutiert.

Zur Bestimmung der Verteilungsfunktion $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ als Lösung der Boltzmann-Transportgleichung (2.1) haben sich verschiedene Methoden etabliert, deren Wahl stark von der Struktur des Störterms Gl. (2.4) abhängt [24]. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Monte-Carlo-Technik eingesetzt, die im Anh. A vorgestellt wird.

2.2 Relaxation in III-V-Halbleitern

An der Relaxation von heißen Ladungsträgern in III-V-Halbleitern ist eine Vielzahl verschiedener Prozesse beteiligt. Im Wesentlichen sind dies: akustische und optische Phononen, ionisierte und neutrale Störstellen, andere Ladungsträger (Elektronen und Löcher), Seitentäler

der Bandstruktur, Stoßionisation und Auger-Prozesse [25, 26]. Das relative Auftreten dieser Streuprozesse wird neben der Dotierung des Halbleiters stark von der Gittertemperatur, der kinetischen Energie der Ladungsträger und deren Dichte bestimmt. Da im Rahmen dieser Arbeit die Verhältnisse bei sehr geringen Anregungsdichten untersucht wurden, kann die Elektron-Elektron-Streuung vernachlässigt werden. Aufgrund der relativ niedrigen Anregungsenergie spielen auch die Streuprozesse unter Beteiligung von Seitentälern der Bandstruktur sowie Auger-Prozesse und die Stoßionisation keine Rolle.

Bei tiefen Temperaturen verbleiben damit als dominierende Relaxationskanäle die Streuung der Ladungsträger mit Phononen und die Streuung an Störstellen. Mit steigender Temperatur gewinnt die Streuung von Elektronen mit thermisch aktivierten Löchern an Bedeutung. Die Streuung mit akustischen Phononen wird allgemein durch ein Deformationspotential (DA) beschrieben. Im Gegensatz zu den Elementarhalbleitern wie Si führt die Vibration der unterschiedlich geladenen Atome in polaren III-V-Halbleitern zu einem Polarisationsfeld mit langer Reichweite. Mit diesem Feld können Ladungsträger wechselwirken und zusätzliche Streuprozesse ausführen. Die Kopplung an ein Feld, das aus der entgegengesetzten Schwingung der unterschiedlichen Atome innerhalb der Einheitszelle stammt, wird als longitudinal-optische Mode (LO) bezeichnet. Die Kopplung an die Polarisation in Verbindung mit akustischen Schwingungen wird piezoelektrische Mode (PE) genannt.

Im ersten Teil dieses Kapitels werden die relevanten Eigenschaften der Phononstreuung zusammengefasst. Im zweiten Teil wird auf die Streuung von Ladungsträgern an Störstellen eingegangen und im dritten auf die damit verwandte Streuung zwischen Elektronen und Löchern. Im vierten Kapitel werden die Abhängigkeiten der diskutierten Streumechanismen von der kinetischen Energie und der Temperatur verglichen.

2.2.1 Streuung mit Phononen

Eine Beschreibung der Streuprozesse mit Phononen kann in diesem Rahmen nur aufzählenden Charakter haben, weshalb für die Details auf die Literatur [22, 25–28] verwiesen sei.

Das Matrixelement $M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ der Streuung eines Elektrons vom Anfangszustand $|\mathbf{k}\rangle$ in den Endzustand $|\mathbf{k}'\rangle$ lässt sich für die verschiedenen Streumechanismen mit Beteiligung von Phononen folgendermaßen beschreiben:

$$|M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|_{DA}^2 = \frac{\hbar \Xi_d^2 q}{2V \rho v_L} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) I^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (2.7)$$

$$|M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|_{PE}^2 = \frac{\hbar e^2 K_{av}^2}{2V \epsilon \epsilon_0} \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{q^2} \frac{q^4}{(q^2 + q_0^2)^2} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) I^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (2.8)$$

$$|M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|_{LO}^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2V \epsilon^*} \frac{q^4}{(q^2 + q_0^2)^2} \left(N_{LO} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) I^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (2.9)$$

mit dem Wellenvektor $\mathbf{q} = \pm(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ und den Besetzungsdichten N_q für akustische und N_{LO} für LO-Phononen. Das obere Vorzeichen stellt den Fall der Absorption eines Phonons dar, das untere Vorzeichen den der Emission. $I^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = |\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle|^2$ ist das Quadrat des Überlappungsintegrals der Zustände $|\mathbf{k}\rangle$ und $|\mathbf{k}'\rangle$. Ξ_d gibt das Deformationspotential für die DA-Mode an. Die Kopplung der PE-Mode ist stark anisotrop und wird durch die Kopplungskonstante K_{av} angegeben, bei der über alle Richtungen gemittelt wurde. $\omega_{\mathbf{q}}$ beschreibt die Kreisfrequenz des akustischen Phonons $|\mathbf{q}\rangle$ und ω_0 die Kreisfrequenz des LO-Phonons. v_L , ρ und V sind die longitudinale Schallgeschwindigkeit, die Dichte und das Volumen des Kristalls. ϵ^* ist definiert durch $\frac{1}{\epsilon^*} = \frac{1}{\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right)$ mit ϵ_∞ der optischen und ϵ der statischen Permittivität. Abhängig von der Ladungsträgerdichte erfährt das Coulomb-Potential der Ladungsträger eine Abschirmung. Seine Ausdehnung wird durch die inverse Debye-Länge q_0 bestimmt. Der Faktor $q^4/(q^2 + q_0^2)^2$ beschreibt diese Abschirmung und verhindert bei den polarisations-gekoppelten Moden eine Divergenz der Matrixelemente für sehr kleine Beträge des Wellenvektors \mathbf{q} .

Aus einer Störungsrechnung 1. Ordnung erhält man mit Fermi's Goldener Regel eine Streurrate

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(E' - E \mp E_{\mathbf{q}}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \mp \mathbf{q}) \quad (2.10)$$

Die δ -Funktionen beschreiben die Energie- und Impulserhaltung

$$E_{\mathbf{k}'} = E_{\mathbf{k}} \pm E_{\mathbf{q}} \quad \text{und} \quad \mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \quad (2.11)$$

in der semiklassischen Näherung, die das Unschärfeprinzip unberücksichtigt lässt. Die Phononenergie E_q resultiert aus den Dispersionsgleichungen, die für Phononen mit kleinen Wellenzahlen q in der Form

$$E_q = \begin{cases} \hbar v_s q & \text{für akustische Phononen} \\ \hbar \omega_0 & \text{für LO-Phononen} \end{cases} \quad (2.12)$$

ausgedrückt werden können.

Näherungsweise wird das Überlappungsintegral $I^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx 1$ gesetzt. Wie in Kap. 4.1.1 gezeigt werden wird, kann InP im betrachteten Energiebereich mit einer einfachen sphärisch-parabolischen Bandstruktur

$$E_k = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (2.13)$$

beschrieben werden. Hiermit führt die Integration von Gl. (2.10) unter Berücksichtigung der Erhaltung von Energie und Impuls zu differentiellen Streuraten $P(E_k, q)$, die eine einfache Abhängigkeit von der kinetischen Energie E_k des Elektrons und der Wellenzahl q des

beteiligten Phonons aufweisen:

$$P_{DA}(E_k, q) dq = \frac{(m^*)^{1/2} \Xi_d^2}{2^{5/2} \pi \hbar v_{LP}} \frac{1}{\sqrt{E_k}} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) q^2 dq \quad (2.14)$$

$$P_{PE}(E_k, q) dq = \frac{e^2 K_{av}^2 (m^*)^{1/2}}{2^{5/2} \pi \epsilon \epsilon_0 \hbar} \frac{1}{\sqrt{E_k}} \frac{\omega_q}{q} \frac{q^4}{(q^2 + q_0^2)^2} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) dq \quad (2.15)$$

$$P_{LO}(E_k, q) dq = \frac{\alpha_p \omega_0}{\epsilon_k} \frac{q^3}{(q^2 + q_0^2)^2} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) dq \quad (2.16)$$

m^* ist die effektive Elektronenmasse. Durch die dimensionslose Kopplungskonstante α_p

$$\alpha_p = \frac{e^2}{4\pi \hbar} \frac{1}{\epsilon^*} \left(\frac{m}{2\hbar\omega_0} \right)^{1/2} \quad (2.17)$$

wird die Fröhlich-Wechselwirkung zwischen Elektronen und longitudinal-optischen Phononen beschrieben. ϵ_k ist als relative kinetische Energie durch $\epsilon_k = \sqrt{\frac{E_k}{\hbar\omega_0}}$ definiert.

Aus Gründen der Energie- und Impulserhaltung bestimmt der Wellenzahlvektor \mathbf{k} des Elektrons den Bereich $q_{min} \leq q \leq q_{max}$ der möglichen Wellenvektoren \mathbf{q} des an der Streuung beteiligten Phonons. In Tabelle 2.1 sind diese Minima und Maxima für akustische Phononen und in Tabelle 2.2 für optische Phononen zusammengestellt.

	Absorption	Emission ($v > v_s$)
q_{min}	$\begin{cases} 0 & : v > v_s \\ 2m^*v_s/\hbar - 2k & : v < v_s \end{cases}$	0
q_{max}	$2m^*v_s/\hbar + 2k$	$2k - 2m^*v_s/\hbar$

Tabelle 2.1: *Minima und Maxima der Wellenzahlen für akustische Phononen. Nur Elektronen mit Geschwindigkeiten v größer der Schallgeschwindigkeit v_s können akustische Phononen emittieren.*

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Emission von Phononen zu einer Streuung der Elektronen in Vorwärtsrichtung führt. Bei der Randomisierung des anfänglichen Elektronenimpulses sind daher bei primärer Emission von Phononen mehr Streuvorgänge notwendig als bei der Absorption. Dies gilt gleichermaßen für akustische wie optische Phononen.

Die Integration von Gl. (2.14)-(2.16) über die möglichen Wellenvektoren \mathbf{q} aus Tabelle 2.1 und 2.2 liefert die integralen Raten für die Elektron-Phonon-Streuung

	Absorption	Emission ($E_k > \hbar\omega_0$)
q_{min}	$k(\chi_k^+ - 1)$	$k(1 - \chi_k^-)$
q_{max}	$k(\chi_k^+ + 1)$	$k(1 + \chi_k^-)$
	mit $\chi_k^\pm = (1 \pm \hbar\omega_0/E_k)^{1/2}$	

Tabelle 2.2: *Minima und Maxima der Wellenvektoren für LO-Phononen. Nur Elektronen mit kinetischer Energie E_k größer der Eigenenergie $\hbar\omega_0$ können LO-Phononen emittieren.*

$$W_{DA}(E_k) = \frac{m^{1/2}\Xi_d^2(k_B T)^3}{2^{5/2}\pi\hbar^4 v_L^4 \rho} \frac{1}{\sqrt{E_k}} \{F_{DA}(x_{max}) - F_{DA}(x_{min})\} \quad (2.18)$$

$$W_{PE}(E_k) = \frac{e^2 K_{av}^2 (m^*)^{1/2} k_B T}{2^{5/2}\pi\epsilon\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{E_k}} \{F_{PE}(x_{max}) - F_{PE}(x_{min})\} \quad (2.19)$$

$$W_{LO}(E_k) = 2 \frac{\alpha_p \omega_0}{\epsilon_k} [N_{LO} \sinh^{-1}(\epsilon_k) + (N_{LO} + 1) \cosh^{-1}(\epsilon_k)] \quad (2.20)$$

mit der dimensionslosen Größe $x = \frac{\hbar q v_s}{k_B T}$. Wegen der vernachlässigbaren Dispersion der LO-Phononen lässt sich (2.16) analytisch integrieren, wenn man die Abschirmungseffekte ignoriert und $q_0 = 0$ setzt. Für niedrig bis moderat dotierte Halbleiter ist das eine sehr gute Näherung. Der erste Term der Klammer in (2.20) beschreibt dann die Absorption von LO-Phononen, der zweite die Emission, die allerdings nur möglich ist, wenn die kinetische Energie $E_k > \hbar\omega_0$ ist. Die Funktionen $F_{DA}(x)$ und $F_{PE}(x)$ sind definiert über

$$F_{DA}(x) = \int_0^x \left(N_q(x') + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) x'^2 dx' \quad (2.21)$$

für die akustischen Phononen in Verbindung mit dem Deformationspotential und durch

$$F_{PE}(x) = \int_0^x \left(N_q(x') + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \frac{x'^4}{(x'^2 + x_0^2)^2} dx' \quad (2.22)$$

für die akustischen Phononen mit piezoelektrischer Wechselwirkung.

Bei der Berechnung der integralen Rate für die Streuung mit akustischen Phononen ist es wegen deren Dispersionsgleichung notwendig, über die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion der Besetzungsdichten N_q zu integrieren. Dieses Integral lässt sich nicht analytisch lösen. Um dieses Problem zu vermeiden, werden üblicherweise zwei Grenzfälle betrachtet. Im Fall

der *equipartition* geht man von Phonon-Eigenenergien $\hbar\omega_q \ll k_B T$ aus und nähert die Bose-Einstein-Verteilung linear an:

$$N_q = \frac{1}{(\exp(\hbar\omega_q/k_B T) - 1)} \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega_q} \quad (2.23)$$

Für Elektronen im thermischen Gleichgewicht ist dies bis 1 K eine gute Näherung. Bei heißen Elektronen und tiefen Temperaturen dagegen gilt die Annahme $\hbar\omega_q \ll k_B T$ nicht mehr. Hier wird häufig die *zero-point* Annahme gemacht, d.h. es ist $N_q \ll 1$ bzw. $N_q = 0$, womit die Absorption von Phononen vernachlässigt werden kann. Für beide Grenzfälle gibt es geschlossene Ausdrücke für die Gesamtstreuraten [28]. Im Temperaturbereich 20 – 50 K dagegen trifft bei der Beschreibung von heißen Ladungsträgern keine der obigen Annahmen zu. In diesem Fall muss die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion entwickelt werden. Die Bernoulli-Entwicklung und die sich daraus ergebenden Darstellungen der Integrale werden im Anhang B angegeben.

2.2.2 Streuung an Störstellen

Reale Halbleiter besitzen Abweichungen von der idealen Kristallstruktur, die durch Störstellen verursacht werden, unter denen Dotieratome, Verunreinigungen, Fehlstellen, Versetzungen, Wachstumsstörungen und ähnliches zusammengefasst sein sollen.

Die Streuung von Elektronen an solchen Störstellen unterscheidet sich deutlich von der Streuung mit Phononen. Aufgrund des großen Massenverhältnisses zwischen Störstellen und Elektronen ist diese Streuung ein elastischer Prozess. Sie allein kann nicht zur energetischen Relaxation heißer Elektronen führen. Viel mehr bewirkt sie eine isotrope Verteilung des Elektronimpulses. Ein weiterer wesentlicher Unterschied zur Phononstreuung liegt im lokalisierten Charakter der Störstellen. Diese Lokalisierung erlaubt eine Beschreibung des Streuprozesses im Sinne eines klassischen Zwei-Teilchen-Stoßes.

Bei der Streuung an Störstellen unterscheidet man die Streuung an geladenen und neutralen Störstellen. Neutrale Störstellen treten vorwiegend bei sehr tiefen Temperaturen auf und besitzen Streuraten, die deutlich kleiner sind als die der Streuung an geladenen Störstellen. Aus diesem Grund wurde hier die Streuung an neutralen Störstellen vernachlässigt. Für die Streuung an geladenen Störstellen haben sich zwei Modelle etabliert, die sich darin unterscheiden, wie die Ausdehnung des Coulomb-Potentials der geladenen Störstelle auf einen endlichen Radius beschränkt wird: im Modell von Brook-Herring (BH) erfolgt die Beschränkung über die Abschirmung von Ladungsträgern, im Modell von Conwell-Weisskopf (CW) über ein geometrisches Argument [23]. Da das CW-Modell die Verhältnisse in kompensierten Halbleitern bei niedriger Dotierung besser beschreibt [29], soll hier ausschließlich auf das Conwell-Weisskopf-Modell eingegangen werden.

Das CW-Modell beschränkt die Reichweite des Coulomb-Potentials eines Ions auf den mitt-

leren halben Abstand zwischen zwei geladenene Störstellen und definiert einen maximalen Stossparameter b_{max} durch

$$b_{max} = \left(\frac{3}{4\pi n_I} \right)^{1/3} \quad (2.24)$$

mit der Dichte der geladenen Störstellen n_I . Dieser maximale Stossparameter b führt nach der klassischen Streutheorie zu einem minimalen Streuwinkel Θ_m . Mit dieser Vereinfachung erhält man eine Gesamtstreurate $W_{CW}(E_k)$ an Ionen mit Ladungszahl Z von

$$W_{CW}(E_k) = \pi n_I Z^2 b_{max}^2 \left(\frac{2}{m^*} \right)^{1/2} E_k^{1/2} \quad (2.25)$$

Im Gegensatz zur Phononstreuung hängt diese Rate nicht direkt von der Temperatur ab. Eine Abhängigkeit von der Temperatur resultiert jedoch aus der thermischen Aktivierung der Ionisation und wirkt in W_{CW} über die Dichte n_I der geladenen Störstellen.

2.2.3 Die Elektron-Loch-Streuung

Die Elektron-Loch-Streuung (eh) zwischen einem Elektronen \mathbf{k}_e aus dem Leitungsband und einem Loch \mathbf{k}_h aus dem Valenzband ist verwandt mit der Streuung von Ladungsträgern an geladenen Störstellen. Da die Wechselwirkung nur vom Abstand zwischen Elektron und Loch abhängt, kann das eigentliche Zwei-Teilchen-Problem in das gemeinsame Schwerpunktsystem transformiert und die Streuung dort beschrieben werden. Im Schwerpunktsystem verhält sie sich analog zu einer Streuung eines Massenpunktes mit einer reduzierten Masse

$$\mu^* = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h} \quad (2.26)$$

und einem Wellenvektor

$$\mathbf{K}_{eh} = \frac{m_h \mathbf{k}_e - m_e \mathbf{k}_h}{m_e + m_h} \quad (2.27)$$

an einem fixierten Coulombpotential [28, 30]. Zur Bestimmung der Streurrate kann dann eine Gleichung analog Gl. (2.25) verwendet werden. Die neue Richtung von \mathbf{K}'_{eh} nach dem Streuvorgang ergibt sich wie in Kap. A.3 beschrieben. Mit \mathbf{K}'_{eh} und dem Gesamtwellenvektor $\mathbf{K}_{tot} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h$ liefert die Rücktransformation mittels

$$\mathbf{k}'_e = \frac{m_e}{m_e + m_h} \mathbf{K}_{tot} + \mathbf{K}'_{eh} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{k}'_h = \frac{m_h}{m_e + m_h} \mathbf{K}_{tot} - \mathbf{K}'_{eh} \quad (2.29)$$

die gestreuten Wellenvektoren \mathbf{k}'_e und \mathbf{k}'_h für das Elektron bzw. das Loch.

2.2.4 Zusammenfassung der Streuprozesse

Zusammenfassend werden in diesem Kapitel für die einzelnen Streuprozesse die Abhängigkeit der Streuraten von der kinetischen Energie der Elektronen und von der Gittertemperatur gegenübergestellt. Der Berechnung liegen die Materialparameter von InP:Zn zu Grunde, mit einer Konzentration der Zn-Akzeptoren von $N_A = 1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, die mit Donatoren der Konzentration $N_D = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ kompensiert sind. Dies entspricht den Verhältnissen der eingesetzten InP-Absorber-Schichten (Kap. 3.2.2).

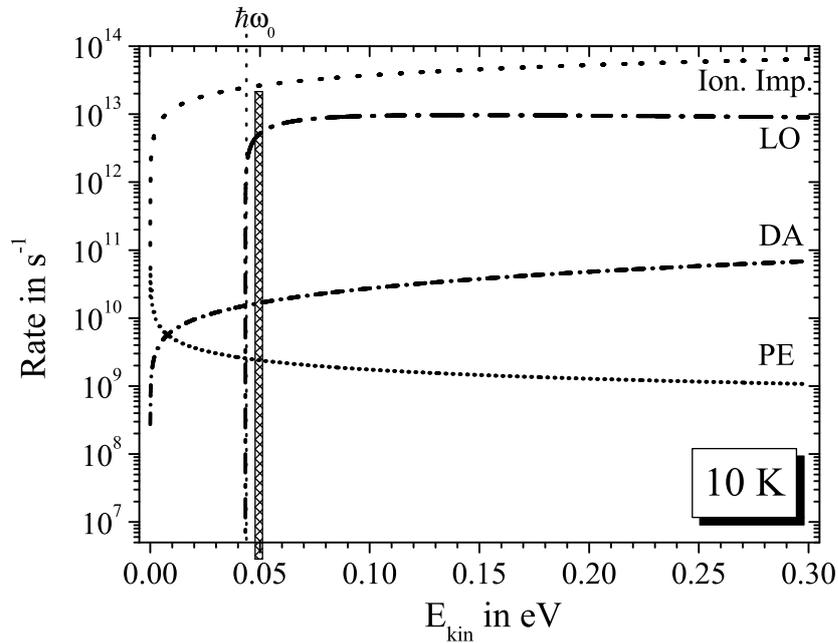


Abbildung 2.1: Raten der relevanten Streuprozesse in Abhängigkeit von der kinetischen Energie E_{kin} der Elektronen für $T = 10 \text{ K}$. Für den unterlegten Bereich bei 50 meV zeigt Abb. 2.2 den Verlauf der Raten in Abhängigkeit von der Temperatur.

Abb. 2.1 verdeutlicht den Verlauf der betrachteten Streuraten mit der kinetischen Energie der Elektronen bei einer Temperatur von $T = 10 \text{ K}$. Über den gesamten Energiebereich dominiert die elastische Streuung an ionisierten Störstellen und sorgt nach kurzen Zeiten für eine homogene Verteilung der Impulsrichtungen. Für kinetische Energien oberhalb der LO-Phononen-Eigenenergie $\hbar\omega_0$ stellt die Emission von LO-Phononen den schnellsten Relaxationskanal mit $\tau_{LO} \sim 135 \text{ fs}$ [31] dar. Liegt die kinetische Energie der Elektronen unterhalb dieser Schwelle, erfolgt die Relaxation vergleichsweise langsam über Streuung an akustischen Phononen. Hierbei erreicht die Streuung mit piezoelektrischen Phononen in der unmittelbaren Nähe des Leitungsbandminimums Raten von 10^{10} s^{-1} . Ab $E_{kin} = 7 \text{ meV}$ nimmt deren

Beitrag allerdings gegenüber der Deformationspotentialstreuung mit akustischen Phononen ab. Insgesamt erfolgt die inelastische Streuung mit akustischen Phononen um mehr als zwei Größenordnungen langsamer als die Emission von LO-Phononen.

Für den in Abb. 2.1 unterlegten Energiebereich bei 50 meV wird in Abb. 2.2 die Abhängigkeit der Streuraten von der Temperatur dargestellt.

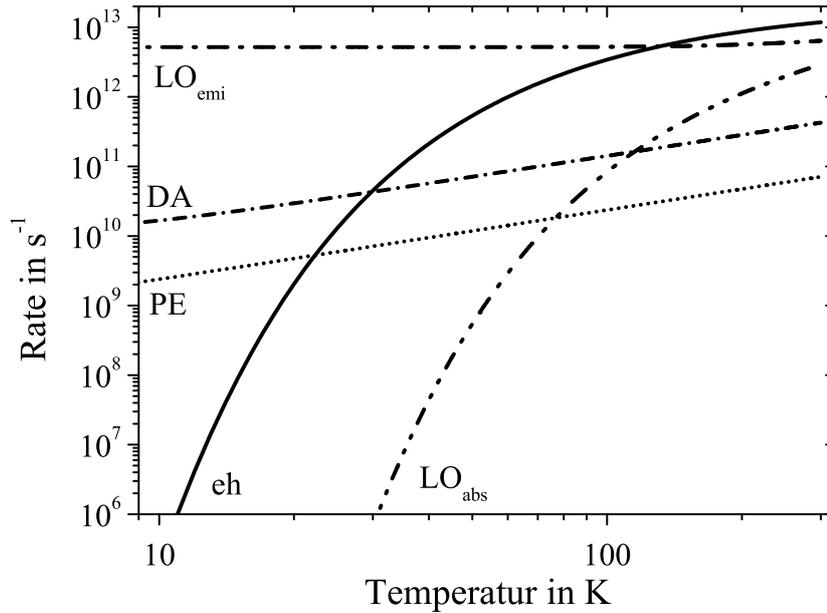


Abbildung 2.2: Raten der relevanten Streuprozesse in Abhängigkeit von der Gittertemperatur für Elektronen mit kinetischer Energie $E_{kin} = 50$ meV. Im Fall der eh-Streuung bezieht sich die kinetische Energie auf ein Teilchen mit der reduzierten Masse μ^* .

Die integrale Streurrate für die Emission von LO-Phononen bleibt von 10 K bis Raumtemperatur nahezu konstant. Sie wird ausschließlich über die Temperaturabhängigkeit der LO-Besetzungsdichte bestimmt, deren Variation nur eine sehr geringe Auswirkung auf den $(N_{LO} + 1)$ -Term der Gl. (2.20) hat. Für die akustischen Phononen hängt die Streurrate in Gl. (2.18) und (2.19) explizit von der Temperatur ab. Sie steigt linear mit der Temperatur an. Oberhalb von ca. 20 K nimmt die Dichte der Löcher aus thermisch ionisierten Akzeptoren stark zu und macht sich in einem steilen Anwachsen der Streurrate von Elektronen an Löchern bemerkbar. Dieser Kanal erreicht bereits bei $T \sim 35$ K Streuraten, die mit 10^{11} s^{-1} deutlich höher liegen als die Streuung an akustischen Phononen. Mit steigender Temperatur nimmt auch die thermische Besetzungsdichte N_{LO} der LO-Phononen zu und damit die Rate für die Absorption von LO-Phononen. Dieser Prozess tritt relevant ab 70 K auf. Bei Raumtemperatur wird die Relaxation im Wesentlichen durch die eh-Streuung und Streuung

mit LO-Phononen dominiert. Der Beitrag von akustischen Phononen kann vernachlässigt werden.

2.3 Rekombination in III-V-Halbleitern

Bei der Elektron-Loch-Rekombination wird Energie in der Größenordnung der Bandlücke E_g abgegeben, und die beteiligten Ladungsträger werden vernichtet [32]. In der Photovoltaik stellt sie den zentralen Verlustkanal für die photoerzeugten Elektronen bzw. Löcher dar. Es wird zwischen strahlender und nicht-strahlender Rekombination unterschieden. Oft ist die direkte strahlende Rekombination über die Bandlücke nicht der dominierende Kanal. Störstellen mit Energieniveaus innerhalb der Bandlücke erhöhen die Rekombinationsrate deutlich. Hierbei werden Elektronen in einem ersten Schritt aus dem Leitungsband in der Störstelle eingefangen und relaxieren von dort aus in einem weiteren Schritt ins Valenzband. Analoges kann für die Löcher formuliert werden. Der Einfang von Ladungsträgern in Störstellen ist deshalb ein zentraler Prozess bei der Rekombination und bestimmt die Lebensdauer der photoerzeugten, freien Ladungsträger [33].

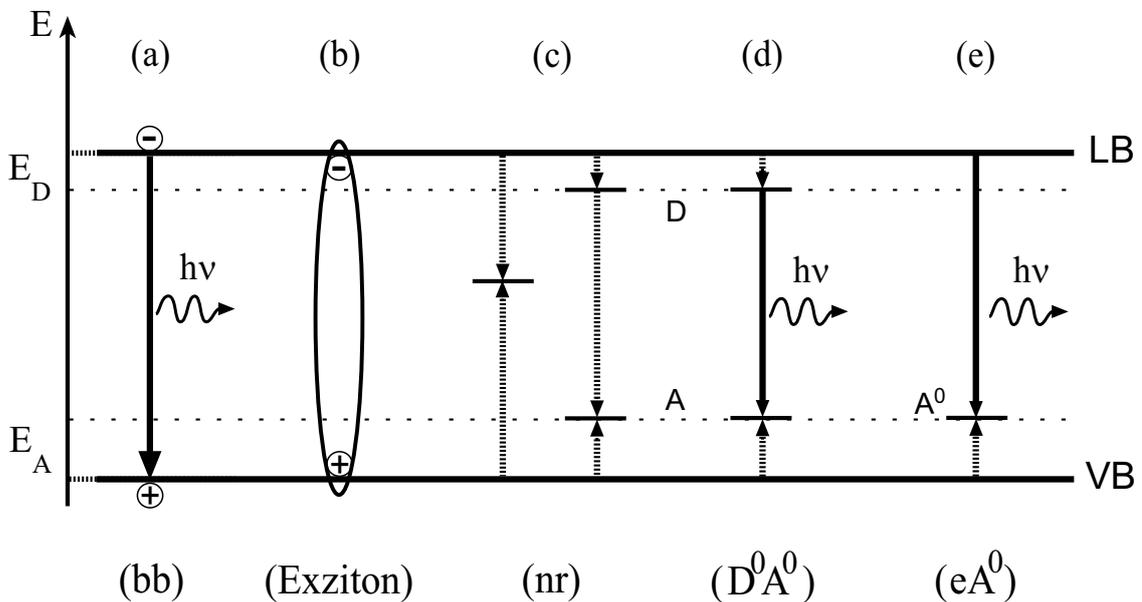


Abbildung 2.3: Übersicht über die Rekombinationskanäle: a) Band-Band, b) exzitatorisch, c) nicht-strahlend, d) Donator-Akzeptor-Paar-Lumineszenz und e) Leitungsband-Akzeptor-Lumineszenz.

In Abb. 2.3 sind die wichtigsten Rekombinationskanäle in III-V-Halbleitern schematisch dar-

gestellt. (a) Die direkte strahlende Band-Band-Rekombination [bb] von Elektronen aus dem Leitungsband mit Löchern aus dem Valenzband stellt in hochreinen Halbleitern bei Raumtemperatur den dominierenden Rekombinationsweg dar. (b) Freie Elektronen und Löcher können bei tiefen Temperaturen gebundene Paarzustände [Exzitonen] bilden, die in der Regel strahlend rekombinieren. (c) Ladungsträger werden an flachen oder tiefen Störstellen eingefangen und geben ihre Energie nicht-strahlend [nr] durch Phononen ab (Kap. 2.3.1). (d) Elektronen und Löcher werden an flachen Störstellen eingefangen und rekombinieren dort miteinander strahlend [D^0A^0] (Kap. 2.3.2). (e) Ladungsträger rekombinieren strahlend an neutralen Störstellen [eA^0] (Kap. 2.3.3). Die einzelnen Prozesse werden in den folgenden Kapiteln beschrieben.

2.3.1 Ladungsträgereinfang an Defekten

Der Einfang von Ladungsträgern an Defekten im Halbleiter wird in der Regel mit dem *Kaskaden-Einfang-Mechanismus* beschrieben [34, 35]. Dieser wurde schon 1959 von Lax [36, 37] formuliert und stellt noch heute im Wesentlichen die Vorstellung zum Einfang von Elektronen und Löchern an Störstellen dar. Für Elektronen betrachtet sieht das Modell folgendermaßen aus: Unter Beteiligung von Phononen wird das Elektron aus dem Leitungsband in einen hochangeregten Zustand des Defektes gestreut. Von dort aus kann es zum einen durch weitere Emission von Phononen in tiefer liegende Zustände relaxieren, bis es den Grundzustand des Defektes erreicht. In diesem Fall wird die Störstelle als Rekombinationszentrum bezeichnet. Zum anderen kann das Elektron nach einer gewissen Aufenthaltszeit im Störstellensystem durch Absorption von Phononen wieder zurück ins Leitungsband entkommen. Ein solcher Defekt ist eine Haftstelle.

Der Wirkungsquerschnitt für den Einfang eines Elektrons mit kinetischer Energie E_{kin} kann durch

$$\sigma(E_{kin}) = \sum_U \sigma(E_{kin}, U) P(U) \quad (2.30)$$

beschrieben werden. $\sigma(E_{kin}, U)$ stellt den differentiellen Einfangquerschnitt in einem angeregten Zustand mit Bindungsenergie U dar. $P(U)$ gibt die Haftwahrscheinlichkeit dafür an, dass ein Elektron, das im Zustand U eingefangen wurde, nicht wieder zurück ins Leitungsband entkommen kann. Summiert wird über alle Zustände des Defektes, die energetisch ausgehend vom Leitungsband durch Emission eines Phonons erreichbar sind. Der genaue Prozess des Elektroneinfangs ist nach wie vor Gegenstand der aktuellen wissenschaftlichen Diskussion [32, 35, 38].

Die Form des Einfang-Wirkungsquerschnittes ist stark materialspezifisch und hängt von dem Charakter des Defektes ab. So wurde bei niedrig n-dotiertem GaAs für den Einfang von Elektronen an ionisierten Donatoren eine Einfangzeit von $\tau = 22$ ns ermittelt [39]. Bei moderat Zn-dotiertem GaAs erfolgt der Einfang von Löchern an geladenen Akzeptoren

dagegen innerhalb von ca. 10 ps [40,41]. Allgemein kann man sagen, dass Defekte mit attraktivem (Coulomb-)Potential einen größeren Einfangquerschnitt für Elektronen aufweisen als neutrale Defekte, die nur über ihre geringere Polarisierung mit den Elektronen wechselwirken können. Unterschieden werden muss auch die Form der Energieabgabe. Akustische Phononen erschließen aufgrund ihrer ausgeprägten Dispersion einen kleinen aber kontinuierlichen Energiebereich bis hin zu sehr kleinen Energien. Durch Emission akustischer Phononen können Elektronen viele Bindungszustände des Defektes in der Nähe des Leitungsbandminimums erreichen. Im Gegensatz dazu kann die Relaxation mittels der quasi monoenergetischen optischen Phononen nur entlang diskreter Energieniveaus verlaufen, dafür aber über hohe Energiedifferenzen hinweg. So ist der direkte Einfang von Elektronen $\hbar\omega_0$ oberhalb der Leitungsbandkante möglich.

Aus diesem Mechanismus ergeben sich zwei wichtige Konsequenzen. Erstens ist der Einfangprozess stark energieabhängig. Elektronen, die nahe dem Leitungsbandminimum sind und eine geringe kinetische Energie besitzen, werden mit höheren Wirkungsquerschnitten eingefangen als Elektronen, die sich höher im Leitungsband befinden. Das wird auch bei den Streuraten für akustische Phononen in Abb. 2.1 deutlich. Zweitens gibt es einen signifikanten Einfangkanal für Elektronen, deren kinetische Energie wenig unterhalb der Eigenenergie $\hbar\omega_0$ des LO-Phonons liegt. Diese können direkt in den Grundzustand des Defektes gestreut werden, der innerhalb der Bandlücke liegt. Eine theoretische Formulierung dieser Abhängigkeit des Einfangquerschnittes von der Energie des Elektrons ist in [36] angegeben.

2.3.2 Donator-Akzeptor-Paar-Rekombination

In kompensierten Halbleitern gibt es unter Gleichgewichtsbedingungen auch bei tiefen Temperaturen immer sowohl geladene Donatoren (D^+) als auch geladene Akzeptoren (A^-) (s. Kap. 2.4). Werden Elektronen und Löcher im Leitungsband bzw. Valenzband optisch erzeugt, können sie von diesen geladenen Störstellen eingefangen werden (Kap. 2.3.1). Um ins Gleichgewicht zurückzukehren, können die Elektronen der neutralen Donatoren mit den Löchern der neutralen Akzeptoren strahlend rekombinieren. Diese Donator-Akzeptor-Paar-Rekombination (D^0A^0) kann beschrieben werden als



Hopfield et al. [42–44] haben diese Rekombination theoretisch und experimentell an Hand der Photolumineszenzspektren in GaP untersucht. Die Rekombinationsrate $W_{D^0A^0}(r)$ des D^0A^0 -Übergangs bestimmt sich aus der Überlappung der Wellenfunktionen des eingefangenen Elektrons und des eingefangenen Lochs. Diese hängt daher vom Abstand r zwischen dem Akzeptor und dem Donator ab. Da bei III-V-Halbleitern in der Regel das Elektron schwächer an den Donor (D^+) gebunden ist als das Loch an den Akzeptor (A^-) und sich das Energieschema des Donors in guter Näherung wasserstoffartig beschreiben lässt, reicht

es zur Abschätzung der Rekombinationsrate $W_{D^0A^0}(r)$ aus, die Überlappung der Elektronen-Wellenfunktion am Ort des neutralen Akzeptors zu betrachten.

Dies liefert

$$W_{D^0A^0}(r) = W_{max} \exp\left(\frac{-2r}{a_B}\right) \quad (2.32)$$

a_B gibt den Bohr-Radius des schwächer gebundenen Rekombinationszentrums an. Bei InP ist dies der des Donators [44]. W_{max} ist eine Konstante.

Nach dem Rekombinationsvorgang sind beide Zentren geladen. Das resultierende Coulomb-Potential zwischen den Defekten muss bei der Energiebilanz der D^0A^0 -Paar-Rekombination berücksichtigt werden. Über die Abstandsabhängigkeit des Coulomb-Terms hängt auch die Energie $E_{D^0A^0}$ des emittierten Photons vom Abstand r der beteiligten Zentren ab [42].

$$E_{D^0A^0}(r) = E_g - E_D - E_A + \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \quad (2.33)$$

E_D und E_A sind die Bindungsenergien der isolierten Donatoren bzw. Akzeptoren, ϵ ist die statische Dielektrizitätskonstante.

Wie Gl. (2.32) beschreibt, rekombinieren D^0A^0 -Paare mit geringem Abstand mit höherer Wahrscheinlichkeit als solche, die weiter voneinander entfernt sind. Gleichzeitig leuchten diese nahen Paare nach Gl. (2.33) auch bei höheren Energien. Die Spektren der D^0A^0 -Lumineszenz werden somit von der Rekombination der D^0A^0 -Paare dominiert, die einen geringen Abstand zueinander haben. Neben der rein räumlichen Verteilung der Defekte spiegelt sich auch die Anregungsdichte in den Spektren wider [45]. Bei hohen Anregungsdichten können viele Ladungsträger eingefangen werden, wodurch die Dichte der neutralen Zentren steigt und der Abstand zwischen ihnen abnimmt. D^0A^0 -Spektren schieben mit steigender Anregungsdichte zu höheren Energien. Als Maß α_{DA} für diese energetische Verschiebung wird die Differenz der Maximumsenergie bei Variation der Anregungsintensität um eine Dekade angegeben. Die Energieverschiebung $\alpha_{D^0A^0}$ der D^0A^0 -Übergänge zwischen flachen Donatoren und Akzeptoren ist bei InP und GaAs üblicherweise kleiner als 3 meV/Dekade [46].

2.3.3 Leitungsband-Akzeptor-Rekombination

Konkurrierend zum nicht-strahlenden Einfang von Ladungsträgern an Störstellen stehen strahlende Übergänge in Defektzustände, die sogenannten eA^0 - bzw. hD^0 -Übergänge. In InP dominiert die eA^0 -Lumineszenz, bei der Elektronen aus dem Leitungsband in neutralen Akzeptoren (eA^0) eingefangen werden. Unter der Annahme eines wasserstoffartigen Energieschemas für die Akzeptoren leitet Dumke [47] eine Wahrscheinlichkeit \mathcal{R} her, mit der ein Elektron der kinetischen Energie E_k rekombiniert

$$\mathcal{R}_{eA}(E_k) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{64\sqrt{2}\pi e^2 \hbar n_r |P_{vc}|_{av}^2}{m_0^2 c^3} \frac{1}{(m_A E_A)^{3/2}} \frac{(E_g + E_k - E_A)}{\left[1 + \frac{m_e^* E_k}{m_A E_A}\right]^4} \quad (2.34)$$

E_A stellt die Akzeptor Bindungsenergie und n_r den Brechungsindex dar. Das gemittelte Matrixelement des Impulsoperators für den Band-Band-Übergang $|P_{vc}|_{av}^2$ lässt sich nach [47] für InP mit $|P_{vc}|_{av}^2 \approx 0,998 \cdot m_0 \cdot E_g$ abschätzen. m_A stellt eine effektive Elektronenmasse im Termschema des wasserstoffartigen Akzeptors dar und liegt bei InP mit $m_A = 0.54 m_0$ in der Größenordnung des schweren Loches. Die Rekombinationsrate ergibt sich aus

$$\frac{dn_e}{dt} = -\frac{n_e}{\tau_{eA}} = -N_A \int_0^\infty f_e(E_k) \mathcal{R}_{eA}(E_k) \rho(E_k) dE_k \quad (2.35)$$

mit N_A , f_e und ρ der Akzeptoren-, Besetzungs- und Zustandsdichte. Die strahlende Lebensdauer τ_{eA} liegt in der Größenordnung weniger Nanosekunden [41].

Wegen der großen Masse m_A und Bindungsenergie E_A ändert sich der Nenner im letzten Term in Gl. (2.34) mit zunehmender kinetischer Energie E_k nur wenig. \mathcal{R}_{eA} hängt nur schwach von E_k ab. Die Verteilung der emittierten Photonenergie $\hbar\omega = E_g + E_k - E_A$ spiegelt somit gut die Elektronenverteilung im Leitungsband wider und wird zur Bestimmung der Elektronentemperatur verwendet [48]. Eine einfache Abschätzung der Elektronentemperatur erhält man mit der Annahme $E_k = 1/2 k_B T$ aus der energetischen Verschiebung des Maximums der eA^0 -Lumineszenz

$$E_{eA} = E_g - E_A + 1/2 k_B T \quad (2.36)$$

Für den hD^0 -Übergang kann analog zu Gl. (2.34) eine Rekombinationswahrscheinlichkeit bestimmt werden, indem die Klammern im Nenner durch $(m_e^* E_D)^{3/2} [1 + m_A E_k / m_e^* E_D]^4$ ersetzt werden. In diesem Fall hängt die Wahrscheinlichkeit \mathcal{R}_{hD} sehr stark von der kinetischen Energie der Löcher ab. Löcher mit einer kinetischen Energie von nur $E_k = 10 \text{ meV}$ rekombinieren bereits um einen Faktor 10^4 seltener als solche mit $E_k \approx 0$, d. h. beim Valenzband-Donator-Übergang sind im Wesentlichen die Löcher nahe am Valenzbandmaximum beteiligt.

2.4 Leitfähigkeit in InP:Zn

In den vorangegangenen Kapiteln wurde der Zusammenhang zwischen dem Ladungsträgertransport und den intrinsischen Streuprozessen im Halbleiter beschrieben. Diese Streuprozesse sind stark abhängig von der Temperatur, aber auch von der Materialzusammensetzung wie z. B. der Dotierung oder Kompensation, und übertragen diese Abhängigkeiten auf die Leitfähigkeit.

Für die Leitfähigkeit bei niedrigen elektrischen Feldern und ohne äußeres Strahlungsfeld soll hier ein Szenario der Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt werden. Betrachtet wird ein niedrig p-dotierter Halbleiter, der zu einem Grad $K = N_D/N_A \leq 1$ kompensiert ist. Das bedeutet, dass neben den Akzeptoren mit einer Konzentration N_A auch N_D Donatoren in den Kristall eingebaut sind, die die Leitfähigkeit beeinflussen. Aufgrund der Überlappung der Wellenfunktionen der Donatoren sind deren Niveaus energetisch verteilt. Analoges gilt auch für die Akzeptoren. Diese Verteilung der jeweiligen Zustandsdichte wird als *Störstellenband* bezeichnet, auch wenn die Ladungsträger in diesem Band lokalisiert sein können [49]. Die Breite, Lage und Form dieser Störstellenbänder wird durch die Konzentration der Störstellen und durch die Coulomb-Wechselwirkung zwischen geladenen Akzeptoren und Donatoren beeinflusst [49]. Akzeptoren, die energetisch unterhalb des Fermi-Niveaus liegen, nehmen Elektronen auf, die von oberhalb der Fermi-Energie liegenden Donator-Niveaus stammen. Auf diese Weise stellt sich ein Besetzungsgleichgewicht ein, bei dem das Fermi-Niveau auf Höhe des Akzeptorbandes liegt bzw. bei dem alle Donatoren ionisiert sind. Im letzten Fall geben auf diese Weise bei $T = 0$ K alle N_D Donatoren jeweils ein Elektron ab und werden N_D Akzeptoren damit besetzt [50]. Nur die verbliebenen $N_A - N_D$ neutralen Akzeptoren können mit steigender Temperatur Elektronen aus dem Valenzband aufnehmen und entsprechend ihrer Bindungsenergie E_A eine Löcherdichte im Valenzband aufbauen [51].

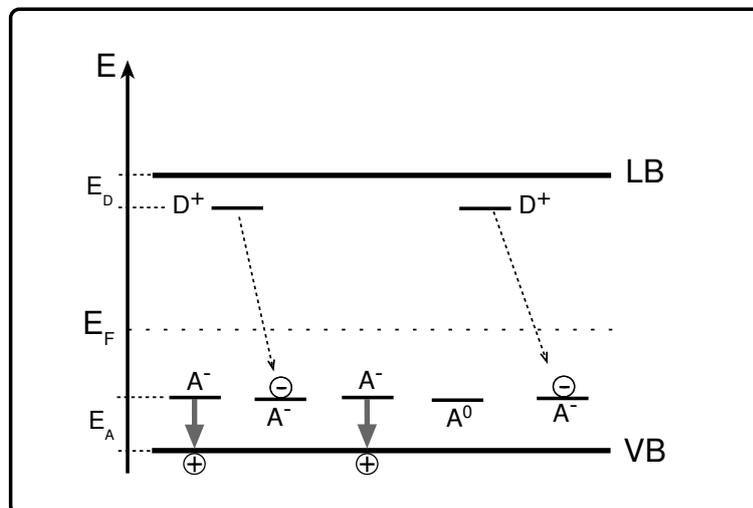


Abbildung 2.4: Thermisch aktivierte Löcherdichte im Valenzband eines niedrig p-dotierten, kompensierten Halbleiters bei hohen Temperaturen.

Für hohe Temperaturen wird die Leitfähigkeit in p-dotierten Halbleitern durch die thermisch aktivierte Löcherdichte im Valenzband und die Beweglichkeit der Löcher dominiert (Abb. 2.4). Mit sinkender Temperatur nimmt deren Dichte im Valenzband exponentiell ab.

Dies spiegelt sich in einer exponentiellen Abnahme der Leitfähigkeit wider [52]. Bei tiefen Temperaturen ist die Löcherdichte im Valenzband nahe Null. Es sind fast alle der $N_A - N_D$ nicht kompensierten Akzeptoren unbesetzt, d.h. neutral (A^0). In diesem Temperaturregime dominiert der Ladungsträgertransport via Störstellenleitung die Leitfähigkeit [53].

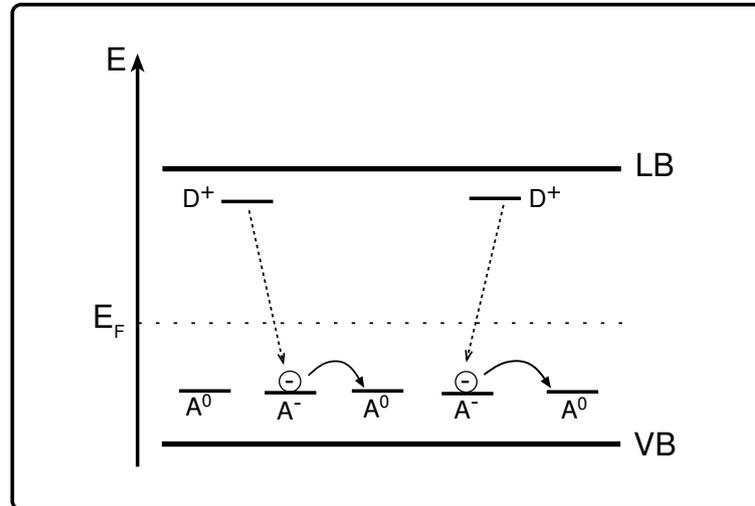


Abbildung 2.5: Hüpfprozess in niedrig p -dotierten Halbleitern bei tiefen Temperaturen

In niedrig dotierten Halbleitern erfolgt der Transport bei tiefen Temperaturen über phononassistierte Hüpfprozesse, wie in Abb. 2.5 dargestellt ist. Elektronen hüpfen entlang der Akzeptoren von besetzten (A^-) zu unbesetzten Akzeptoren (A^0) [54]. Das kann als Hüpfen der Löcher von unbesetzten zu besetzten Akzeptoren interpretiert werden, also als Löchertransport in die entgegengesetzte Richtung. Angetrieben wird dieses Hüpfen durch eine schwache Überlappung der Wellenfunktionen von besetzten und unbesetzten Akzeptoren. Variationen in den energetischen Niveaus werden durch Emission und Absorption von Phononen ausgeglichen.

Die Hüpfwahrscheinlichkeit ist stark vom Abstand der Akzeptoren $r_A \sim N_A^{-1/3}$ abhängig. Hier spiegelt sich die Wechselwirkung der Elektronen mit dem elektrischen Hintergrundfeld von negativ und positiv geladenen Störstellen wider [50], dessen Fluktuation zu einer thermischen Aktivierung des Hüpfprozesses führt [55]. Bei niedrig dotierten III-V-Halbleitern wie z.B. n -dotiertes InP bzw. GaAs ist die Aktivierungsenergie für die Störstellenleitfähigkeit $< 1 \text{ meV}$ [56].

Für p -leitendes InP:Zn haben Benzaquen et al. [57, 58] die Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Temperatur im Bereich von 3 – 300 K untersucht. Ihre Probe B316 ($N_A = 7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und $K = N_D/N_A = 0,16$) ist ähnlich den in dieser Arbeit untersuchten InP:Zn

Schichten. Das in [57] beobachtete Szenario sollte sich übertragen lassen und wird hier zusammengefasst dargestellt: Im Temperaturbereich oberhalb von 45 K wird die Leitfähigkeit durch die Löcherdichte im Valenzband bestimmt, die durch den thermisch aktivierten Einfang von Elektronen aus dem Valenzband zustandekommt. Als Aktivierungsenergie wurde $E_A = 42,7 \text{ meV}$ ermittelt, was gut mit der Ionisationsenergie der Zn-Akzeptoren in InP übereinstimmt, wenn es mit einer Zn-Konzentration $N_A = 7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ dotiert ist [59]. Der Beitrag der Störstellenleitung ist oberhalb von 45 K viel kleiner und kann vernachlässigt werden. Unterhalb von 45 K nimmt die thermisch aktivierte Löcherdichte im Valenzband stark ab. Der Beitrag durch Hüpfprozesse gewinnt an Bedeutung. Beide Anteile erreichen bei ca. 31 K Parität. Bei tieferen Temperaturen als 26 K ist die Löcherdichte im Valenzband so gering, dass deren Beitrag zur Leitfähigkeit vernachlässigt werden kann. Hüpfprozesse bestimmen dann den Transport der Ladungsträger. Für Temperaturen von 11 – 7,3 K lässt sich die Leitfähigkeit durch Hüpfen der Ladungsträger zu nächsten Nachbarn (*nearest-neighbor-hopping*) entsprechend $\sigma = \sigma_3 \cdot \exp(-\epsilon_3/k_B T)$ beschreiben. Unterhalb von 7,3 K kann die Leitfähigkeit sehr gut mit dem *variable-range-hopping*-Modell von Mott [56] beschrieben werden. In diesem Fall lässt sich die Leitfähigkeit in der Form $\sigma = \sigma_0 \exp[-(T_0/T)^{1/4}]$ darstellen.

