

Kapitel 5

Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation beschrieben. Zu Beginn werden das Modell, das der Simulation zugrunde liegt, und die Annahmen, die dazu gemacht wurden, vorgestellt. Der Photostrom ergibt sich in der Simulation im Wesentlichen aus der relativen Häufigkeit, mit der Elektronen aus einer bestimmten Tiefe die Grenzfläche erreichen, gewichtet durch den Anteil der Elektronen, die in dieser Tiefe erzeugt werden. Dieser Photostrom aus der Simulation wird mit dem gemessenen Photostrom verglichen. Die Unterschiede werden diskutiert. Aus der Analyse des Elektronentransportes ergeben sich Einfangzeit und Energieverteilung der Elektrodichte in Abhängigkeit von der Anfangsenergie und der Gittertemperatur. Im letzten Abschnitt wird die Simulation bei Raumtemperatur durchgeführt. Es werden die resultierenden Elektronenverteilungen im Volumen und an der Grenzfläche, sowie die übertragene mittlere Energie bestimmt.

5.1 Modell der MC-Simulation

Das idealisierte Modell des InP:Zn/SnO₂:F-Heterokontaktes, mit dem hier der Photostrom beschrieben wird, besteht aus zwei Raumgebieten, die durch eine *Grenzfläche* voneinander getrennt sind (Abb. 5.1).

Das eine Raumgebiet ($z \geq 0$) erstreckt sich mit den Materialeigenschaften von InP:Zn über einen unendlich ausgedehnten Halbraum und ist bezüglich der x- und y-Richtung symmetrisch. Dieses Gebiet wird als feldfrei angenommen. Auf der anderen Seite der Grenzfläche (bei $z = 0$ beginnend) schließt sich für $z < 0$ eine Senke für Elektronen an. Erreichen die Elektronen dieses Gebiet, werden sie mit einer Effizienz von 100% eingesammelt und tragen zum Photostrom bei.

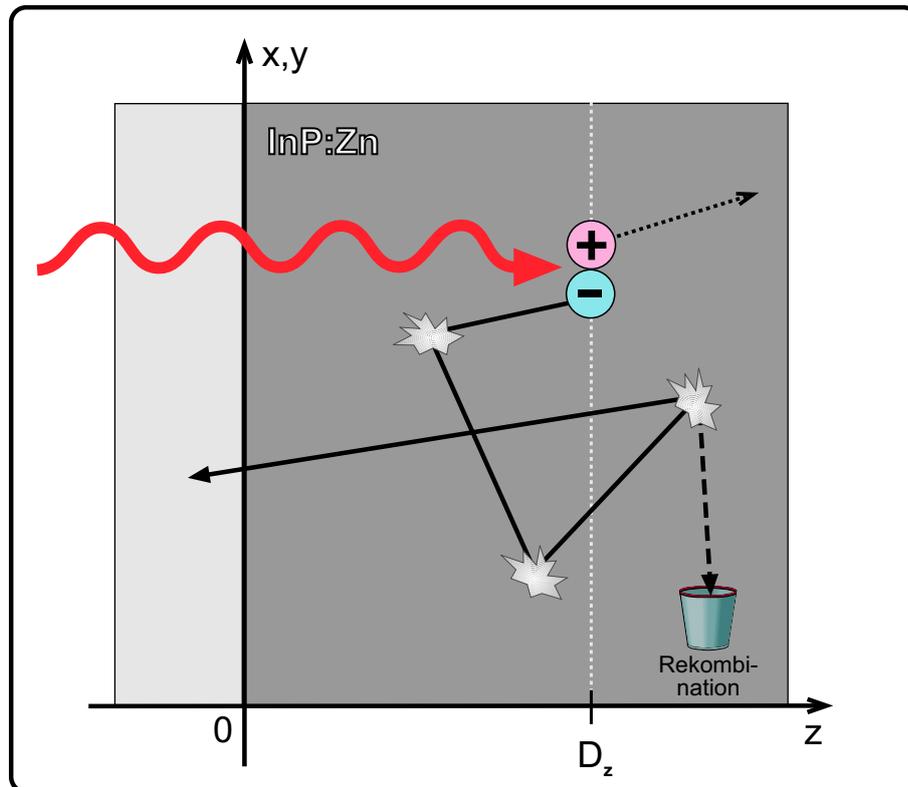


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des random walk eines Elektrons im Halbleiter in der Nähe der Grenzfläche.

Die eigentliche Monte-Carlo-Simulation des Ladungsträgertransportes beschränkt sich auf das feldfreie Gebiet ($z \geq 0$). Durch monoenergetische, optische Anregung werden in der Tiefe $z = D_z$ Elektron-Loch-Paare erzeugt. Nach deren Dissoziation wandern die Elektronen unabhängig von den Löchern mit einem Anfangsimpuls $\hbar\mathbf{k}_i$ per *random walk* durch das Halbleitervolumen. Auf dem Weg durch das Volumen erfahren sie Streuprozesse, durch die sie relaxieren und ihre Flugbahn ändern, bis sie am Ende ihrer Gesamtlebensdauer rekombinieren oder zuvor die Grenzfläche überschreiten und zum Photostrom beitragen.

Die Elektronensenke ($z < 0$) kann eine Raumladungszone oder auch der morphologische Übergang zwischen InP und $\text{SnO}_2\text{:F}$ sein. Die Natur dieser Senke ist für die MC-Simulation des Ladungsträgertransportes unerheblich, für die Beschreibung des Photostroms dagegen ist sie relevant. Bei Vorliegen einer Raumladungszone mit Ausdehnung W bezieht sich die MC-Simulation nur auf den im feldfreien Bereich absorbierten Anteil $I_0(1 - e^{-\alpha W})$ der einfallenden Intensität. Der in der Raumladungszone absorbierte Anteil ist aufgrund der elektrischen Felder ohnehin nicht thermalisiert. Im Folgenden wird angenommen, dass die

Grenzfläche der morphologische Übergang zwischen InP und SnO₂:F ist, an dem eine Versetzung der Leitungsbänder zum irreversiblen Einfang der Elektronen im SnO₂:F führt. Der Einfluss einer Raumladungszone wird an den entsprechenden Stellen der Arbeit diskutiert.

Bei der physikalischen Beschreibung wurden folgende Annahmen gemacht:

- (i) *Sphärisch-parabolische Ein-Bandstruktur*: Wie in Kap. 4.1.1 gezeigt wurde, treten Minima im Photostrom auf, wenn für die kinetische Energie der Elektronen die Resonanzbedingung mit einem ganzzahligen Vielfachen der LO-Eigenenergie erfüllt ist. Eine analoge Serie für Löcher konnte nicht festgestellt werden. Dies liegt an der hohen Masse der Löcher $m_{hh}^* = 0,83 m_0 > m_e^* = 0,0795 m_0$ und der damit verbundenen deutlich geringeren Geschwindigkeit.* Das gilt im Wesentlichen auch für die leichten Löcher ($m_{lh}^* = 0,11 m_0$), die in sehr kurzen Zeiten ins Schwere-Loch-Band gestreut werden. Hinzu kommen die hohe Einfangrate von Löchern an negativ geladenen Akzeptoren, die in der Größenordnung 10^{11} s^{-1} liegt [41], und die hohen Relaxationsraten [101]. Dies führt zu einem untergeordneten Beitrag der Löcher zum Photostrom, weshalb sie bei der Modellierung vernachlässigt und nur die Elektronen im Leitungsband betrachtet werden.

Das Leitungsband wird in der Nähe des Γ -Punktes durch eine sphärisch-parabolische Bandstruktur beschrieben. Wie in Abb. 4.2 gezeigt wurde, stellt dies für Elektronen bis zu kinetischen Energien von 390 meV eine gute Näherung dar. In der MC-Simulation werden die Elektronen deshalb mit maximal $E_{exc} \approx 310 \text{ meV}$ im Leitungsband angeregt. Dadurch bleiben sie auch bei höheren Temperaturen im parabolischen Bereich des Leitungsbandes. Aus diesem Grund kann auch die Streuung in die L- und X-Seitentäler vernachlässigt werden, die 0,59 eV bzw. 0,85 eV oberhalb des Leitungsbandminimums liegen [74].

Im Folgenden wird nur noch die kinetische Energie der Elektronen und nicht die Anregungsenergie der Photonen betrachtet. Deshalb entfällt die weitere Unterscheidung der Valenzbänder, in denen das Elektron erzeugt wurde.

- (ii) *Vernachlässigung der ee-Streuung*: Mit den experimentell verwendeten Anregungsintensitäten von $I_{exc} = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, einer maximalen Lebensdauer der Minoritäts-Elektronen von $\tau_e = 200 \text{ ns}$ [102] und einer Eindringtiefe der Photonen von ca. 500 nm baut sich für die Elektronen eine Gleichgewichtsdichte $n_e \approx 10^9 \text{ cm}^{-3}$ auf. Diese Ladungsträgerdichte ist so niedrig, dass Effekte aufgrund der Abschirmung von Coulomb-Potentialen (*screening*) vernachlässigt werden können. Eine grobe Abschätzung der Impuls-Relaxations-Rate durch Elektron-Elektron-Streuung ist mit $1/\tau_m \approx 10^{-5} \text{ s}^{-1} \cdot n_e$ möglich [28] und liefert Impuls-Relaxationzeiten $\tau_m \approx 10^{-4} \text{ s}$, die um Größenordnungen länger sind als für konkurrierende Reaktionen wie der Streuung mit akustischen

*In Anhang C sind die in der Simulation verwendeten Materialparameter von InP aufgelistet.

Phononen ($\tau \approx 10^{-9}$ s). Die Elektron-Elektron-Streuung kann bei den geringen Anregungsdichten deshalb gegenüber den anderen Streuprozessen vernachlässigt werden.

- (iii) *Berücksichtigung der Elektron-Loch-Streuung:* Ebenso wie die ee-Streuung, kann auch die Streuung zwischen den optisch erzeugten Elektronen und Löchern vernachlässigt werden. Jedoch muß bei höheren Temperaturen die Streuung von Elektronen an den Löchern berücksichtigt werden, die aufgrund der thermischen Aktivierung von Akzeptoren entstehen. Für diese Löcher wird eine thermische Energieverteilung mit einer Temperatur entsprechend der Gittertemperatur angenommen. Die Entartung des Valenzbandes wird vernachlässigt und von einer mittleren Lochmasse von $m_{hh}^* = 0,83 m_0$ ausgegangen [59].
- (iv) *Vernachlässigung heißer Phononen:* Während der LO-Kaskade werden LO-Phononen emittiert, die wiederum über den anharmonischen Effekt mit Lebensdauern von weniger als 10 ps in akustische Phononen zerfallen [103, 104]. Dieser Prozess kann bei hohen Anregungsdichten zu einer heißen Phononenverteilung führen. Bei den hier verwendeten Dichten spielt dieser Effekt jedoch eine untergeordnete Rolle, weshalb die phononische Besetzungsdichte als im thermischen Gleichgewicht mit der Gittertemperatur T_g beschrieben wird.
- (v) *Semiklassische Näherung:* Es wird die semiklassische Näherung gemacht, d. h. der Streumechanismus wird quantenmechanisch formuliert (Kap. 2.2.1), dagegen die Bewegung des Elektrons zwischen zwei Stößen als freier Flug eines klassischen Massenpunktes beschrieben. Diese Näherung ist zulässig, wenn die Dauer t_{Stoss} des Streuvorgangs kürzer ist als die freie Flugzeit t_{Flug} zwischen zwei Streuprozessen. Als Maß gilt hier die Streuzeit ($\tau_{LO} \approx 135$ fs) der LO-Phononen. Muss, wie in der vorliegenden Arbeit, auch die Streuung an ionisierten Störstellen betrachtet werden, ist diese Annahme nicht mehr streng einzuhalten. Bei InP mit moderater Dotierung sind die Streuzeiten $\tau_{II} \approx 50$ fs $<$ τ_{LO} . Nach der Heisenbergschen Unschärferelation ist dies mit einer Energieverbreiterung $\Delta E \leq 12$ meV verbunden. D. h. die Energieerhaltung in Fermi's Goldener Regel gilt nicht mehr scharf, sondern sollte an Stelle der δ -Funktion in Gl. (2.10) mit einer Lorentz-Verteilung formuliert werden. Es zeigt sich allerdings, dass die zusätzlichen Effekte, die auf sehr kurzen Zeitskalen festzustellen sind, sich schon nach wenigen 100 fs aufheben. Danach ist die semiklassische Näherung ausreichend gut. Auch zeigt sich in der Praxis, dass bei geringer Unterschreitung der streng formulierten, theoretischen Grenze $t_{Flug} > \tau_{LO}$ trotzdem brauchbare Ergebnisse zu erzielen sind [105]. Deshalb wird hier die Energieverbreiterung nicht berücksichtigt und die semiklassische Näherung mit exakter Energie-Impuls-Erhaltung angewendet.
- (vi) *Rekombination:* Die Rekombination wurde schon in Kap. 2.3 und Kap. 4.3 diskutiert. Allein bei der strahlenden Rekombination sind mindestens vier verschiedene Rekombinationszentren bzw. Störstellenbänder beteiligt. Die Abhängigkeit dieser strahlenden

Beiträge von sowohl der Gittertemperatur als auch der kinetischen Energie ist nicht genau bekannt. Ähnliches gilt für die nicht-strahlenden Rekombinationskanäle. Aus diesem Grund wurde in der Modellierung exemplarisch nur die strahlende Leitungsband-Akzeptor-Rekombination (eA^0) aufgenommen. Sie tritt fast im gesamten experimentell untersuchten Temperaturbereich auf und weist nach Gl. (2.34) eine bevorzugte Rekombination niederenergetischer Elektronen auf. Für die MC-Simulation wurde der Vorfaktor so gewählt, dass sich eine mittlere Rekombinationsrate von $1/8$ ns ergibt und diese unabhängig von der Temperatur konstant gehalten.

- (vii) *Elektronensenke*: Wie bereits auf Seite 63 erwähnt wurde, werden Elektronen, die die Grenzfläche erreichen, mit einer Effizienz von 100% eingesammelt und tragen zum Photostrom bei. Eine Reflexion an der Grenzfläche ist in dem Modell nicht vorgesehen. Damit werden auch morphologische Strukturen an der Grenzfläche, wie Oberflächenrauigkeit oder atomare Rekonstruktionen vernachlässigt.

Ausgehend von diesen Annahmen wird der *random walk* der Elektronen durch die Streuung mit akustischen (DA, PE) und optischen Phononen (LO), sowie durch die Streuung an geladenen Störstellen (II) und thermisch verteilten Löchern beeinflusst. Das Zusammenspiel dieser Prozesse bestimmt die Relaxation der angeregten Elektronen.

5.2 Photostromspektren in der MC-Simulation

Um das oben beschriebene Modell zu testen, sollen Photostromspektren berechnet und mit den experimentellen Ergebnissen aus Kap. 4.1.2 verglichen werden. Elektronen, die im Abstand D_z erzeugt wurden, tragen zum Photostrom bei, wenn sie innerhalb ihrer Lebensdauer die Grenzfläche erreichen. Dies geschieht mit einer Wahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C . Über die gesamte Tiefe des Halbleiters summiert, stellt die mit \mathcal{P}_C gewichtete Anzahl derjenigen Elektronen, die in der Tiefe D_z erzeugt werden, den Beitrag zum Photostrom dar. Dieser Photostrom wird in den folgenden Kapiteln untersucht.

5.2.1 Die Sammelwahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C

Die Sammelwahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Elektron, das im Abstand D_z von der Grenzfläche entfernt erzeugt wurde, diese während des *random walk* erreicht. In der MC-Simulation ergibt sich \mathcal{P}_C aus der relativen Häufigkeit derjenigen Elektronen, die diese Strecke D_z in (0,0,-1)-Richtung zur Grenzfläche hin zurückgelegt haben. Neben dieser Flugstrecke D_z hängt \mathcal{P}_C auch von der Anfangsenergie E_{exc} und der Richtung des Anfangsimpulses $\hbar\mathbf{k}_i$ ab.

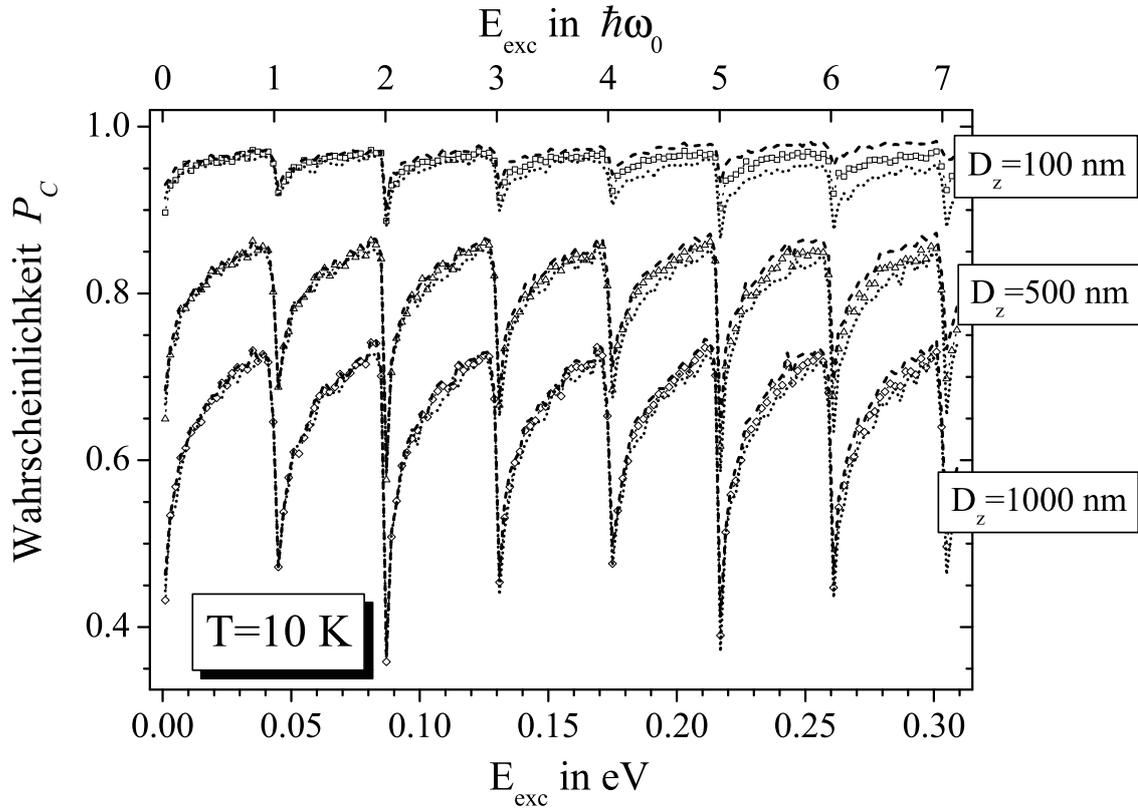


Abbildung 5.2: Wahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C für das Erreichen der Grenzfläche in Abhängigkeit von der Anfangsenergie des Elektrons für verschiedene Abstände $D_z = 100$ nm, 500 nm und 1000 nm. Für jedes D_z ist \mathcal{P}_C für drei verschiedene Richtungen des Anfangsimpulses $\hbar\mathbf{k}_i$ angegeben: $(0,0,-1)$ - Striche, $(1,0,0)$ - Symbole und $(0,0,1)$ - Punkte. Siehe auch Abb. 5.3. (Die Modulation der Tiefe der Minima hat eine numerische Ursache. Für die Energieintervalle ΔE der Stützpunkte galt $n \cdot \Delta E \neq \hbar\omega_0$ (n ganzzahlig). $\hbar\omega_0 = 43,33$ meV) .

In Abb. 5.2 ist diese Sammelwahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C für die Abstände $D_z = 100$, 500 und 1000 nm dargestellt. Für jedes D_z wird das Ergebnis für drei Startrichtungen von \mathbf{k}_i gezeigt: $(0,0,-1)$ - zur Grenzfläche hin; $(1,0,0)$ - parallel dazu und $(0,0,1)$ - von der Grenzfläche weg. Die Vergrößerung in Abb. 5.3 verdeutlicht den Einfluss von \mathbf{k}_i . Freie Elektronen werden mit einer höheren relativen Häufigkeit eingesammelt, wenn sie nahe der Grenzfläche erzeugt werden. Im Mittel tragen ca. 95% der Elektronen, die eine Entfernung von nur 100 nm zurücklegen müssen, zum Photostrom bei. Von den Elektronen, die 1000 nm von der Grenzfläche entfernt erzeugt werden, sind es nur ca. 70%. Unabhängig von der Anfangsentfernung D_z zeigen sich deutliche Minima in der Sammelwahrscheinlichkeit. So erreichen Elektronen die Grenzfläche deutlich seltener, wenn sie auf eine Anfangsenergie gebracht wurden, die

einem ganzzahligen Vielfachen der Eigenenergie $\hbar\omega_0$ des LO-Phonons entspricht. Mit zunehmendem Abstand D_z sind die Minima stärker ausgeprägt und deren Betragsdifferenz zu den Maxima steigt an. An der niederenergetischen Flanke dieser Minima nimmt die Sammelwahrscheinlichkeit stark zu. An der höherenergetischen Flanke dagegen steigt sie sehr viel langsamer und erreicht kurz unterhalb der nächsten Resonanzenergie das Maximum. Diese Struktur zwischen zwei Minima wiederholt sich periodisch.

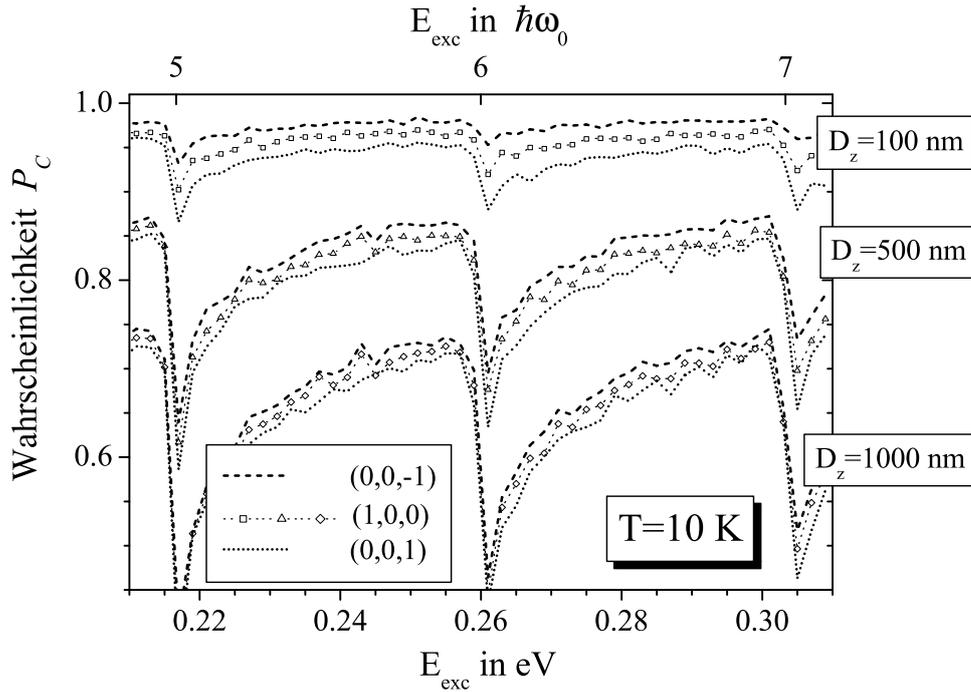


Abbildung 5.3: Vergrößerung aus Abb. 5.2: Unterschied in der Sammelwahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C aufgrund der Richtung des Anfangsimpulses $\hbar\mathbf{k}_i$: $(0,0,-1)$ - zur Grenzfläche hin, $(0,0,1)$ - davon weg und $(1,0,0)$ - parallel zur Grenzfläche.

Abb. 5.3 verdeutlicht den Einfluss der Richtung des Anfangsimpulses auf die Sammelwahrscheinlichkeit \mathcal{P}_C . Trotz der hohen Rate für die Streuung von Elektronen an ionisierten Störstellen, die innerhalb von wenigen ps eine isotrope Verteilung des Elektronenimpulses bewirkt, sind Unterschiede im Einfang aufgrund des Startimpulses zu erkennen. Elektronen mit einem Anfangsimpuls zur Grenzfläche hin [in $(0,0,-1)$ -Richtung] erreichen diese um bis zu 4% häufiger als solche, die von der Grenzfläche weg in $(0,0,1)$ -Richtung starten. Erfolgt der erste freie Flug parallel zur Grenzfläche in Richtung $(1,0,0)$, ergibt sich eine Einfangwahrscheinlichkeit, die zwischen denen der $(0,0,-1)$ - und $(0,0,1)$ -Richtung liegt. Für kurze Laufstrecken und für höhere Anregungsenergien ist dieser Unterschied im Einfang stärker ausgeprägt als für lange Laufstrecken und niedrigere Anfangsenergien.

5.2.2 Photostromspektren

Um den Photostrom I_{MC} aus der MC-Simulation mit dem experimentellen Photostrom I_{PC} vergleichen zu können, muss ein Maß eingeführt werden, in das das Tiefenprofil eingeht, mit dem die Ladungsträger im Halbleiterkristall erzeugt werden. Es sei $\alpha = \alpha(E_{exc})$ der Absorptionskoeffizient für diejenige optische Anregungswellenlänge, bei der ein Elektron mit kinetischer Energie E_{exc} erzeugt wird. Dann beschreibt

$$dN(z) = N_0 \alpha \exp(-\alpha z) dz \quad (5.1)$$

die Anzahl der Photonen, die in einem Volumen $dV = A dz$ im Abstand z von der Grenzfläche entfernt absorbiert werden. N_0 ist die Anregungsintensität an der Grenzfläche bezogen auf die Einheitsfläche A . Jedes absorbierte Photon erzeugt ein freies Elektron, so dass dN die Anzahl der in der Tiefe D_z erzeugten Elektronen beschreibt. Ein Maß I_{MC} für den Photostrom ist dann

$$I_{MC}(E_{exc}) \sim \int_{z=0}^{\infty} \tilde{\mathcal{P}}_C(E_{exc}, z) dN(z) \quad (5.2)$$

$\tilde{\mathcal{P}}_C$ stellt die isotrope Sammelwahrscheinlichkeit dar, die sich aus der Mittelung über die möglichen Raumrichtungen des Anfangsimpulses \mathbf{k}_i ergibt. Sie wird durch

$$\tilde{\mathcal{P}}_C = \frac{1}{6} \left(\mathcal{P}_C^{(0,0,-1)} + 4 \mathcal{P}_C^{(1,0,0)} + \mathcal{P}_C^{(0,0,1)} \right) \quad (5.3)$$

abgeschätzt. $\mathcal{P}_C^{(x,y,z)}$ beschreibt hierbei die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Elektron die Grenzfläche erreicht, wenn es zu Beginn einen Anfangsimpuls in (x,y,z) -Richtung hatte. Gl. (5.1) wird diskretisiert behandelt, wodurch das Integral in Gl. (5.2) die Form

$$\int_{z=0}^{\infty} \tilde{\mathcal{P}}_C(E_{exc}, z) dN(z) \approx N_0 \alpha \sum_i \tilde{\mathcal{P}}_C(E_{exc}, D_{z,i}) \exp(-\alpha D_{z,i}) (D_{z,i} - D_{z,i-1}) \quad (5.4)$$

annimmt, mit den Abständen $D_{z,i=1\dots 5} = 100, 250, 500, 750$ und 1000 nm. Eindringtiefen $D_z > 1000$ nm wurden hierbei vernachlässigt, weil nur noch ein geringer Anteil der Anregungsintensität solche Tiefen erreicht und gleichzeitig auch die Sammelwahrscheinlichkeit für längere Wegstrecken D_z deutlich abnimmt.

Abb. 5.4 zeigt die so simulierten Photostromspektren in Abhängigkeit von der Anfangsenergie E_{exc} des Elektrons für die Temperaturen $T = 10, 25$ und 50 K. Bei $T = 10$ K ist eine deutliche, periodische Struktur zu erkennen. Der Photostrom weist Minima bei kinetischen Energien auf, die einem ganzzahligen Vielfachen von $\hbar\omega_0$ entsprechen. Analog zu der Sammelwahrscheinlichkeit aus Abb. 5.2 ist auch beim Photostrom ein asymmetrischer Verlauf

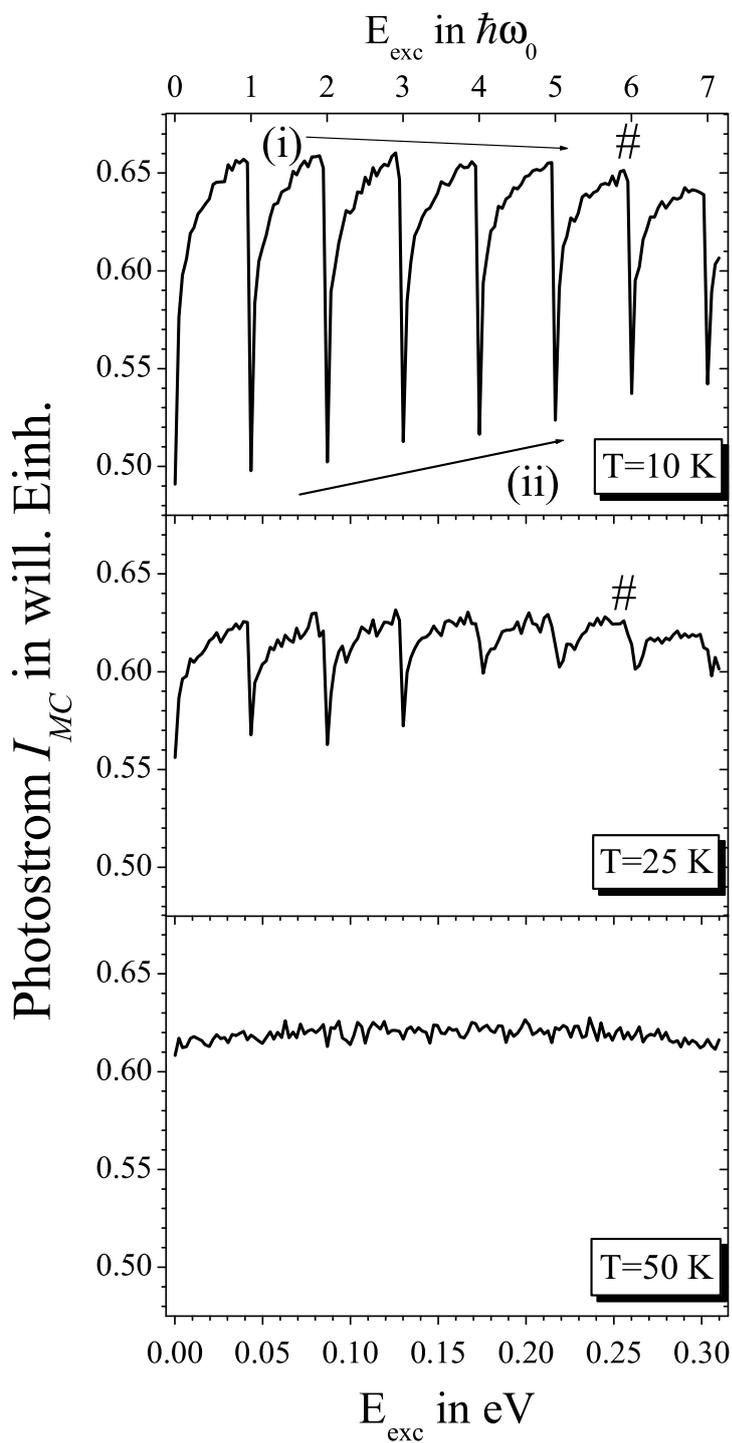


Abbildung 5.4: Simulierte Spektren des Photostroms I_{MC} für die Gittertemperaturen $T = 10$, 25 und 50 K. Auf (i), (ii) und (#) wird im Text Bezug genommen.

zwischen den Minima festzustellen. Der Photostrom bricht an der Resonanzenergie stark ein und wächst bis zum Erreichen des nächsten Maximums vergleichsweise langsam. Mit zunehmender Anfangsenergie der Elektronen nimmt die Amplitude der Berge ab (siehe (i) in Abb. 5.4). Parallel dazu steigt der Betrag des simulierten Photostroms an den Minima an (siehe (ii)).

Für $T = 25$ K ergibt die MC-Simulation ein Photostromspektrum, das einen analogen Verlauf wie das Vergleichsspektrum bei $T = 10$ K zeigt. Allerdings fällt die Amplitude der Maxima deutlich geringer aus, und außerdem nimmt die Tiefe der Minima stark ab. Bei der niederenergetischen Annäherung an die Resonanzenergie fällt der Betrag des Photostroms weniger steil ab als bei 10 K (siehe [#] in Abb. 5.4).

Bei 50 K sind keine Minima mehr im Photostromspektrum festzustellen.

5.2.3 Auswirkung einer Raumladungszone

Die Existenz einer Raumladungszone ist für die weitere prinzipielle Untersuchung der Energieverteilung der Elektronen von untergeordneter Bedeutung. Der Vollständigkeit halber soll deren Auswirkung auf den Photostrom bei tiefen Temperaturen trotzdem an dieser Stelle kurz diskutiert werden.

Eine Raumladungszone wirkt sich in zweierlei Weise auf den Photostrom bei tiefen Temperaturen aus. Zum einen wird ein gewisser Anteil der eingestrahnten Photonen in der Raumladungszone absorbiert. Das bedeutet, dass nur ein geringerer Anteil der Anregungen im feldfreien Bereich des Kristallvolumens deponiert wird und deshalb die periodischen Strukturen aus Kap. 5.2.2 kleinere Beiträge liefern werden. Zum anderen ist diesen Strukturen ein strukturloser Photostrom unterlegt, der aus den Ladungsträgern resultiert, die direkt in der Raumladungszone erzeugt werden.

Abb. 5.5 zeigt das Spektrum des Photostroms I_{MC} , das sich aus dem Modell und der MC-Simulation für verschiedene Ausdehnungen W einer Raumladungszone ergibt. I_{MC} weist die periodische Struktur mit ausgeprägten Minima auf. Wie oben erklärt, wächst der Betrag von I_{MC} jedoch mit zunehmender Ausdehnung der Raumladungszone bei gleichzeitiger Abnahme in der Tiefe der Minima. Im energetischen Vergleich werden die Maxima mit zunehmender Anregungsenergie flacher. Dieser Effekt ist im Fall einer Raumladungszone stärker ausgeprägt als ohne eine solche. Hier macht sich die abnehmende Eindringtiefe von höherenergetischen Photonen bemerkbar, die zu einem größeren Anteil in der Raumladungszone absorbiert werden.

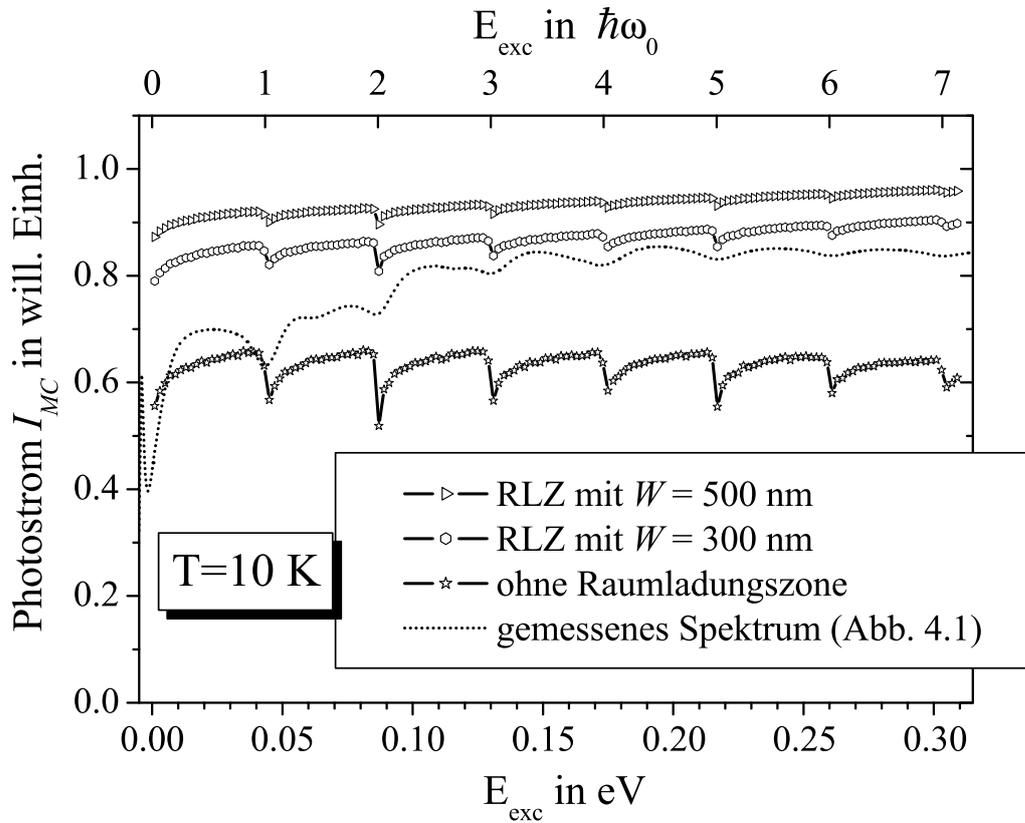


Abbildung 5.5: Vergleich des Photostromspektrums mit den simulierten Spektren für verschieden ausgedehnte Raumladungszonen W . (Zur Modulation siehe Abb. 5.2).

5.2.4 Diskussion der simulierten Photostromspektren

Wesentliche Strukturen des experimentellen Photostroms werden von der MC-Simulation wiedergegeben. Es zeigen sich Minima, die sich bei Energien entsprechend der Resonanzbedingung analog zu Gl. (4.1) befinden. Mit steigender Temperatur nehmen diese periodischen Strukturen ab und verschwinden schließlich vollständig.

Trotz dieser qualitativen Übereinstimmung sind signifikante Unterschiede festzustellen. Dies betrifft die Form der Minima und den Verlauf der Photostromspektren bei steigender Temperatur. Der Kurvenverlauf zwischen zwei Minima ist im Vergleich zum Experiment deutlich asymmetrischer, mit einer steilen Flanke zu niedrigen Energien hin. Damit verbunden liefert die MC-Simulation sehr viel schmalere Minima als das Experiment. Hierfür kommen verschiedene Ursachen in Frage. In der Simulation ist mit der eA^0 -Lumineszenz eine stark vereinfachte Form der Rekombination verwendet worden. Die Realität ist viel komplexer.

Wie in Kap. 4.3 gezeigt wurde, gibt es im InP:Zn/SnO₂:F-Heterokontakt mindestens vier Rekombinationszentren, die Elektronen einfangen können. Nach dem *Kaskaden Einfang Mechanismus* [36,37] ist auch durch LO-Streuung ein Einfang der Elektronen in die angeregten Zustände von Donatoren unterhalb des Leitungsbandminimums möglich. Ein solcher Prozess hat einen geringeren Einfangquerschnitt als der direkte Einfang eines Elektrons aus dem Leitungsbandminimum. Aber er stellt einen Rekombinationskanal für Elektronen dar, deren kinetische Energie nur wenig kleiner ist als $\hbar\omega_0$. Dieser Rekombinationskanal an flachen, ionisierten Donatoren ist von Ulbrich in der Photolumineszenz von GaAs nachgewiesen worden [83]. Auch die Bildung von Exzitonen mit einer Bindungsenergie $E_X = 5,1 \text{ meV}$ wäre möglich [82]. Diese Kanäle führen effektiv zu einer Zunahme der Rekombinationsmöglichkeiten für Elektronen mit einer kinetischen Energie wenig unterhalb von $n \cdot \hbar\omega_0$. Dadurch nimmt der Photostrom wenige meV unterhalb der Resonanzenergie ab. Die Flanke sollte in diesem Fall weniger steil werden. Experimentell ist für tiefe Temperaturen (10 K) jedoch keine Verschiebung der Minima-Energien in die Bandlücke hinein festgestellt worden. Deshalb kann die oben diskutierte Rekombinationsrate für die Bindung von Exzitonen nur klein sein.

Eine weitere Ursache für den Unterschied im Kurvenverlauf der Photostromspektren sind elektrische Felder. In der Nähe von ionisierten Störstellen und auch in der Raumladungszone treten elektrische Felder und Feldgradienten auf. Diese können ein Elektron über die Schwelle der LO-Eigenenergie $\hbar\omega_0$ beschleunigen und eine weitere LO-Emission ermöglichen, die das Elektron zum Leitungsbandminimum streut. Dort kann es leichter rekombinieren. In Untersuchungen zur intrinsischen Photoleitfähigkeit wurde beobachtet, dass mit Zunahme der angelegten elektrischen Felder die Berge zwischen zwei Minima flacher werden und schließlich ganz verschwinden [79]. Dieser Trend wurde auch in einer theoretischen Beschreibung der Photoleitfähigkeit gefunden [20]. Zusätzlich wird dort schon bei kleinen Feldern (5 V/cm) eine deutliche Verbreiterung der Minima festgestellt. Die Vernachlässigung von Feld-Effekten bei der MC-Simulation kann zu den scharfen Minima führen und daher diesen Unterschied zum Experiment erklären.

Ein weiterer wichtiger Unterschied zwischen dem Photostromspektrum aus dem Modell und dem Experiment liegt im Verlauf der Spektren bei steigender Temperatur. Im Experiment sind periodische Strukturen bis 83 K festzustellen, wohingegen der simulierte Photostrom schon bei 50 K keine Minima mehr aufweist. Wie in Kap. 5.3.3 beschrieben, deutet dies auf eine Überbetonung der Elektron-Loch-Streuung in der Simulation hin. Ist der InP:Zn-Halbleiter im Modell im Vergleich zum Experiment zu gering kompensiert, steigt die Konzentration der thermisch verteilten Löcher stärker an und damit auch die eh-Streuung. Das führt zu einem weiteren Fortschreiten in der Thermalisierung bzw. einem schnelleren Erreichen der thermalisierten Verteilung.

Eine zusätzliche Quelle für diese Abweichung vom Experiment kann in der Rekombination liegen. Diese ist mit einer Lebensdauer von 8 ns moderat gewählt. Nicht-strahlende

Einfangzeiten an Störstellen können zwischen 10 ps [40] und 500 ns [39] liegen. Ebenso variiert der Einfangquerschnitt sehr stark mit der kinetischen Energie des Elektrons. Wie in Kap. 2.3.1 beschrieben wurde, sind beim *Kaskaden-Einfang-Mechanismus* akustische Phononen beteiligt. Abb. 2.1 zeigt, dass die Streuraten der akustischen Phononen für kleine Elektronenenergien deutlich zunimmt. Deshalb ist der Einfangquerschnitt an Defekten für energiearme Elektronen erhöht. Dies kann in der Summe im Experiment zu einer höheren Rekombinationsrate bei kleinen kinetischen Energien geführt haben, als sie in der Simulation berücksichtigt wurde.

Trotz dieser quantitativen und stellenweise auch qualitativen Unterschiede beschreibt das Modell wesentliche Strukturen der Anregungsspektren des Photostroms bei tiefen Temperaturen. Die Minima im Photostromspektrum erscheinen an den richtigen energetischen Lagen, und auch der Trend der Spektren bei steigenden Temperaturen wird getroffen. Die oben diskutierten Effekte, die zu den Unterschieden führen (Rekombination, E-Feld), haben auf den Thermalisierungsprozess im feldfreien Raum einen eher untergeordneten Einfluss. Das Modell kann herangezogen werden, um erste qualitative Aussagen über die Energieverteilungen zu treffen, die heiße Elektronen nahe der Grenzfläche ausbilden.

5.3 Untersuchung der Dynamik

5.3.1 Einfangzeiten

In der untersuchten Heterostruktur wird die Lebensdauer eines Elektrons durch zwei Komponenten begrenzt: zum einen durch die Rekombination, die auf der ns-Skala stattfindet, und zum anderen durch den Einfang von Elektronen an der Grenzfläche mit einer charakteristischen Einfangzeit t_{tr} , die Gegenstand dieses Kapitels ist. Die schnellere dieser beiden Komponenten bestimmt die Stromausbeute und darüber hinaus, ob ein Elektron überschüssige Energie gegenüber der thermischen Verteilung nahe der Grenzfläche aufweist.

Mit dem Ausdruck *Einfangzeit* t_{tr} wird hier die Zeit bezeichnet, die ein Elektron benötigt, um per *random walk* die Strecke vom Ort der Erzeugung D_z bis zur Grenzfläche zurückzulegen. Neben der Entfernung D_z hängt sie von der Anfangsenergie E_{exc} und der Richtung des Anfangsimpulses $\hbar\mathbf{k}_i$ des Elektrons ab.

Abb. 5.6 zeigt die relative Häufigkeit dieser Einfangzeit t_{tr} für Elektronen mit einer Anfangsenergie $E_{exc} = 33$ meV und einem Anfangsimpuls in (0,0,-1)-Richtung in Abhängigkeit von der Flugstrecke D_z . Für jedes D_z ist eine asymmetrische Verteilungskurve festzustellen, die ein ausgeprägtes Maximum bei einer Zeit t_z aufweist. Die Breite dieser Verteilung wächst mit zunehmender Transitstrecke D_z . Hierbei fällt die relative Häufigkeit nach $t \approx 4 \cdot t_z$ auf etwa 1/3 ab. Dieser Faktor ≈ 4 variiert für die einzelnen D_z nur wenig. Wie Abb. 5.6 zeigt,

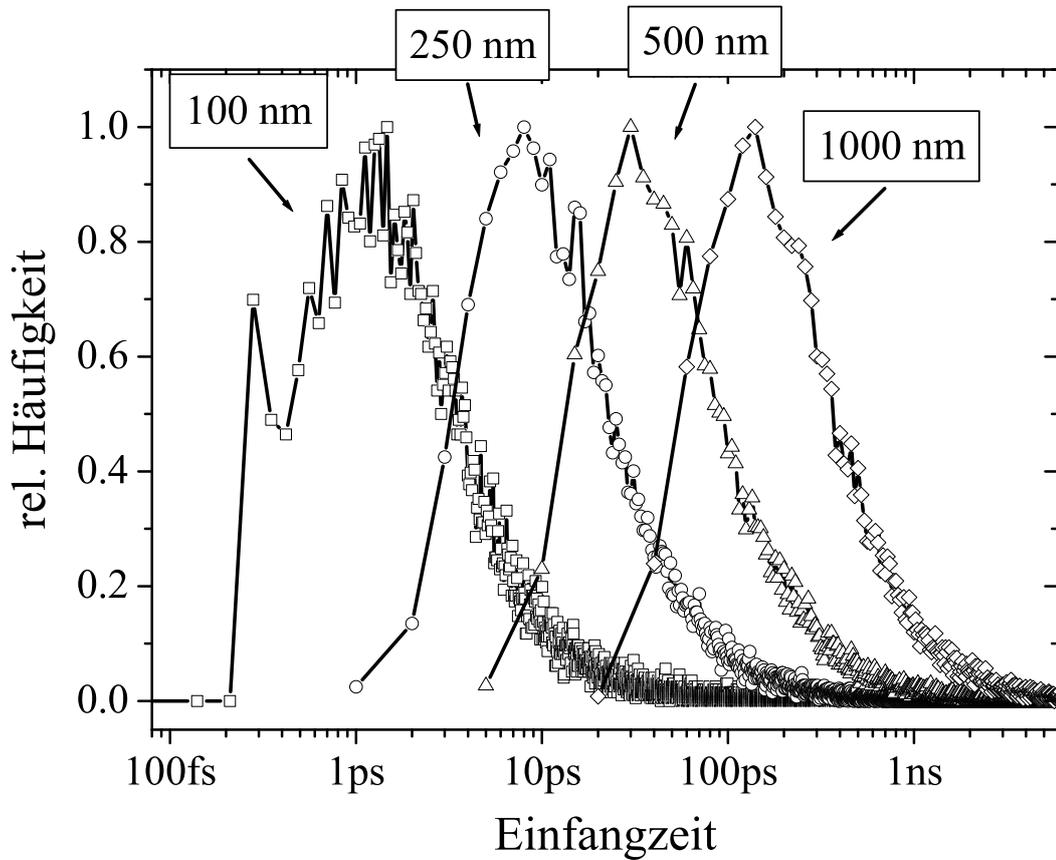


Abbildung 5.6: Simulierte Stromtransienten als Verteilung der Einfangzeiten t_{tr} für verschiedene Entfernungen D_z bei $T = 10\text{ K}$ und $E_{exc} = 33\text{ meV}$. $\hbar\mathbf{k}_i$ weist in $(0,0,-1)$ -Richtung zur Grenzfläche hin.

haben die meisten Elektronen die Entfernung $D_z = 100\text{ nm}$ schon nach einer Pikosekunde zurückgelegt, für $1\text{ }\mu\text{m}$ benötigen die meisten Elektronen etwa 130 ps.

Die Verteilung der Einfangzeiten für $D_z = 100\text{ nm}$ zeigt, dass ein deutlicher Anteil der Elektronen diese Entfernung bereits nach $t = 270\text{ fs}$ zurückgelegt hat. Diese haben eine kinetische Energie $E_{kin} = 33\text{ meV}$ und erreichten die Grenzfläche demnach auf direktem Weg ohne vorherige Streuung. Einen vergleichbaren Anteil nicht gestreuter Elektronen findet man dagegen nicht, wenn die Elektronen initial in $(0,0,1)$ -Richtung, d. h. von der Grenzfläche weg, gestartet sind.

In Abb. 5.7 ist die häufigste Einfangzeit t_z in Abhängigkeit von der Transitstrecke D_z für drei verschiedene Anfangsenergien E_{exc} dargestellt. Gezeigt werden jeweils Verläufe für Elektronen mit Anfangswellenvektor \mathbf{k}_i in $(0,0,-1)$ -Richtung zur Grenzfläche hin [schwarze Sym-

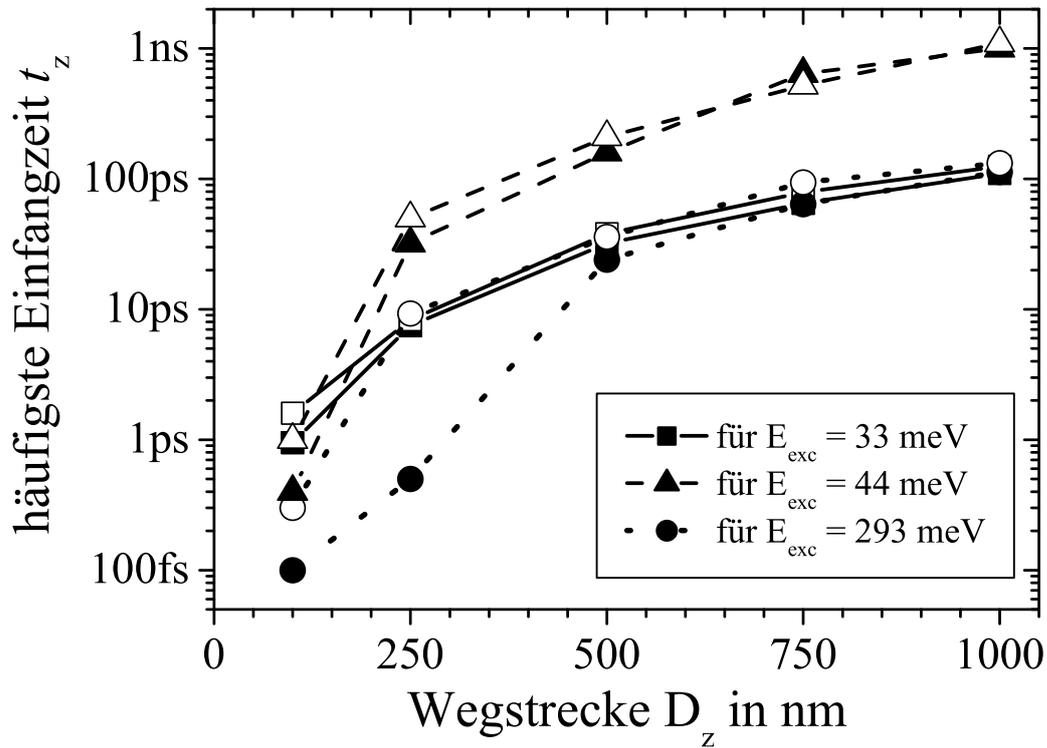


Abbildung 5.7: Einfangzeiten t_z für verschiedene Anfangsenergien E_{exc} in Abhängigkeit von der Entfernung D_z . Die Zeiten sind jeweils für Elektronen mit Anfangsimpuls in $(0,0,-1)$ -Richtung [schwarze Symbole] und in $(0,0,1)$ -Richtung [weiße Symbole] gezeigt.

bole] und in $(0,0,1)$ -Richtung von der Grenzfläche weg [weiße Symbole]. Elektronen, die zur Grenzfläche hin starten, erreichen diese in der Regel früher, als diejenigen, die in die entgegengesetzte $(0,0,1)$ -Richtung starten. Dieser Unterschied ist besonders stark ausgeprägt für Transitzeiten unterhalb von 20 ps für Anfangsenergien $E_{exc} > 33$ meV. Elektronen mit höherer Anfangsenergie ($\bullet = 293$ meV) erreichen die Grenzfläche früher als langsame Elektronen mit $E_{exc} = 33$ meV [\blacksquare]. Gleichzeitig macht sich die Richtung von \mathbf{k}_i stärker bemerkbar. Ganz deutlich sieht man dies bei der Einfangzeit t_{250nm} für Elektronen mit $E_{exc} = 293$ meV. In Richtung der Grenzfläche gestartet [\bullet], erreichen sie diese innerhalb 1 ps, von der Grenzfläche weg gestartet [\circ], benötigen sie ca. 8 ps. Für Transitzeiten oberhalb von 20 ps verschmiert der Einfluss der Anfangsrichtung von \mathbf{k}_i . Der betreffende Stromtransient wird verbreitert, und die beiden Beiträge können nicht mehr deutlich getrennt werden. Elektronen mit 33 meV ($= 0,76 \hbar\omega_0$) und 293 meV ($= 6,76 \hbar\omega_0$), denen nach der LO-Kaskade jeweils eine Restenergie von 33 meV bleibt, erreichen Entfernungen $D_z \geq 500$ nm zu vergleichbaren Zeiten. Elektronen mit einer Startenergie von $E_{exc} = 44$ meV ($= 1,02 \hbar\omega_0$),

d. h. einer Restenergie $E_{kin} = 0,7 \text{ meV}$ nach der LO-Emission, brauchen dagegen für die gleiche Entfernung fast eine Größenordnung länger.

Abb. 5.7 lässt sich folgendermaßen interpretieren: Erreichen die Elektronen die Grenzfläche erst nach mehr als ca. 20 ps, ist deren Impuls durch Stöße vorwiegend an ionisierten Störstellen isotrop verteilt. Die Relaxation entlang der LO-Phonon-Kaskade ist lange beendet und der Transport durch eine kinetische Energie $E_{kin} < \hbar\omega_0$ bestimmt. Im Zeitfenster bis 2 ps findet die LO-Kaskade statt. Zur Beschreibung der Bewegung der Elektronen müssen hier dieser Relaxationsprozess sowie die Anfangsrichtung des Impulses berücksichtigt werden.

Mit Hilfe von Abb. 5.7 lässt sich auch die Ursache für die Absenkung des Photostroms an den LO-Resonanzenergien beschreiben. Elektronen mit Überschussenergie $n \cdot \hbar\omega_0$ haben nach sehr kurzen Zeiten ($t < 2 \text{ ps}$) ihre kinetische Energie verloren, $E_{kin} \approx 0$. Diese Elektronen brauchen lang, um die Grenzfläche zu erreichen. Das erhöht die Wahrscheinlichkeit für Rekombination. Zusätzlich ist die Rekombinationswahrscheinlichkeit höher bei $E_{kin} \approx 0$ als bei $E_{kin} > 0$. Beides erklärt die Minima im Photostromspektrum.

5.3.2 Energieverteilung bei $T = 10 \text{ K}$

Ein Vergleich der Einfangzeiten aus Kap. 5.3.1 mit den inversen Streuraten aus Abb. 2.1 zeigt, dass die Elektronen bei tiefen Temperaturen in der Regel nur wenige Male inelastisch gestreut werden, bevor sie die Grenzfläche erreichen. Es stellt sich die Frage nach der resultierenden Energieverteilung der Elektronendichte. Wie in Anh. A.4 beschrieben ist, wird in der MC-Simulation die Energieverteilung der Elektronendichte aus der Zeitdauer ermittelt, während der die sich die kinetische Energie des Elektrons beim *random walk* in einem bestimmten Energieintervall befindet. Auf die Gesamtflugzeit normiert spiegelt diese Größe die stationäre Energieverteilung der Elektronendichte wider. Durch die einfangende Grenzfläche bei $z = 0$ entsteht eine Asymmetrie im Raum, so dass diese Energieverteilungen im Allgemeinen von der Richtung des Anfangsimpulses $\hbar\mathbf{k}_i$ abhängen. Um eine Verteilung zu erhalten, die unabhängig von der Anfangsrichtung ist, wird deshalb ein gewichteter Mittelwert bestimmt. Dieser ergibt sich aus den Verteilungen für die jeweiligen Anfangsrichtungen durch eine Gewichtung dieser Verteilungen entsprechend ihrer Häufigkeit analog zu Gl. (5.3).

In Abb. 5.8 ist diese gemittelte Verteilung der Energie dargestellt, die die Elektronen während ihres Flugs vom Anfangsabstand D_z bis zur Grenzfläche angenommen haben. Die Anfangsenergie beträgt $E_{exc} = 33 \text{ meV}$, die Gittertemperatur $T_g = 10 \text{ K}$. Es zeigt sich eine energetisch scharfe, hohe Elektronendichte bei der Anfangsenergie E_{exc} . Etwa $1,5 \text{ meV}$ oberhalb und unterhalb von E_{exc} sind deutliche Strukturen in der Verteilung zu erkennen. Zu höheren Energien nimmt die Elektronendichte in einer steilen Flanke ab, deren Steigung vergleichbar der Abnahme in der Maxwell-Boltzmann-Verteilung (M-B) ist. Zu niedrigeren Energien hin nimmt die Dichte langsamer ab. Der niederenergetische Ausläufer baut sich

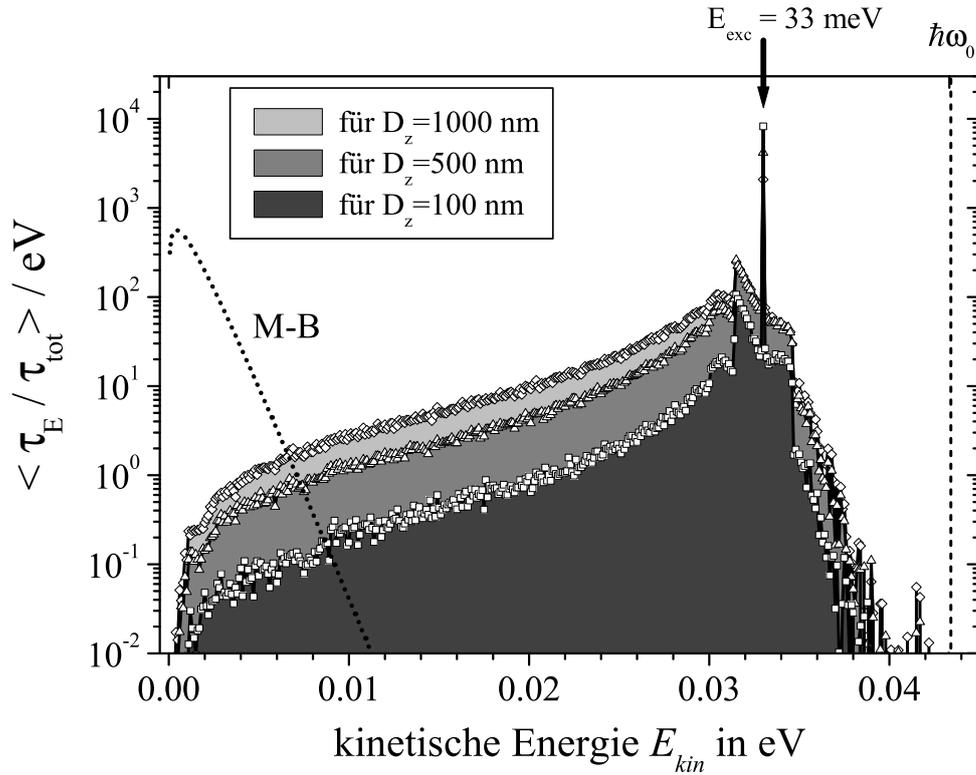


Abbildung 5.8: Energetische Verteilung der Elektronendichte bei 10 K für Elektronen mit einer Anfangsenergie $E_{\text{exc}} = 33 \text{ meV}$ für die Entfernungen $D_z = 100, 500$ und 1000 nm . M-B (···) stellt die Maxwell-Boltzmann-Verteilung bei $T = 10 \text{ K}$ dar.

erst mit zunehmender Flugstrecke D_z auf, d. h. nach längeren Flugzeiten und damit verbundener zunehmender Zahl an inelastischen Stößen. Parallel dazu nimmt die Elektronendichte bei der Anregungsenergie ab und verschmieren die Strukturen um E_{exc} . Diese Strukturen können mit der ersten Emission (Absorption) eines akustischen Phonons in Verbindung gebracht werden, das über das Deformationspotential wechselwirkt. Wie in der differentiellen Streurrate $P_{DA}(E_{\text{kin}}, q)$ in Gl. (2.14) zu sehen ist, erfolgt die Streuung im Deformationspotential bevorzugt über Phononen mit großer Wellenzahl q , d. h. mit großer Energieabgabe (-aufnahme). Die maximale Energie dieser Phononen hängt nach Gl. (2.12) und Tabelle 2.1 von der kinetischen Energie E_{kin} der Elektronen ab. Mit $E_{\text{kin}} = 33 \text{ meV}$ ergeben sich maximale Energien für die Phononen von $E_q^{\text{emi}} = 1,57 \text{ meV}$ ($E_q^{\text{abs}} = 1,61 \text{ meV}$), die in guter Übereinstimmung mit dem energetischen Abstand zwischen der Anregungsenergie und den Strukturen in Abb. 5.8 sind.

Abb. 5.9 zeigt die Elektronendichten für drei Anfangsenergien in der Nähe der Eigenener-

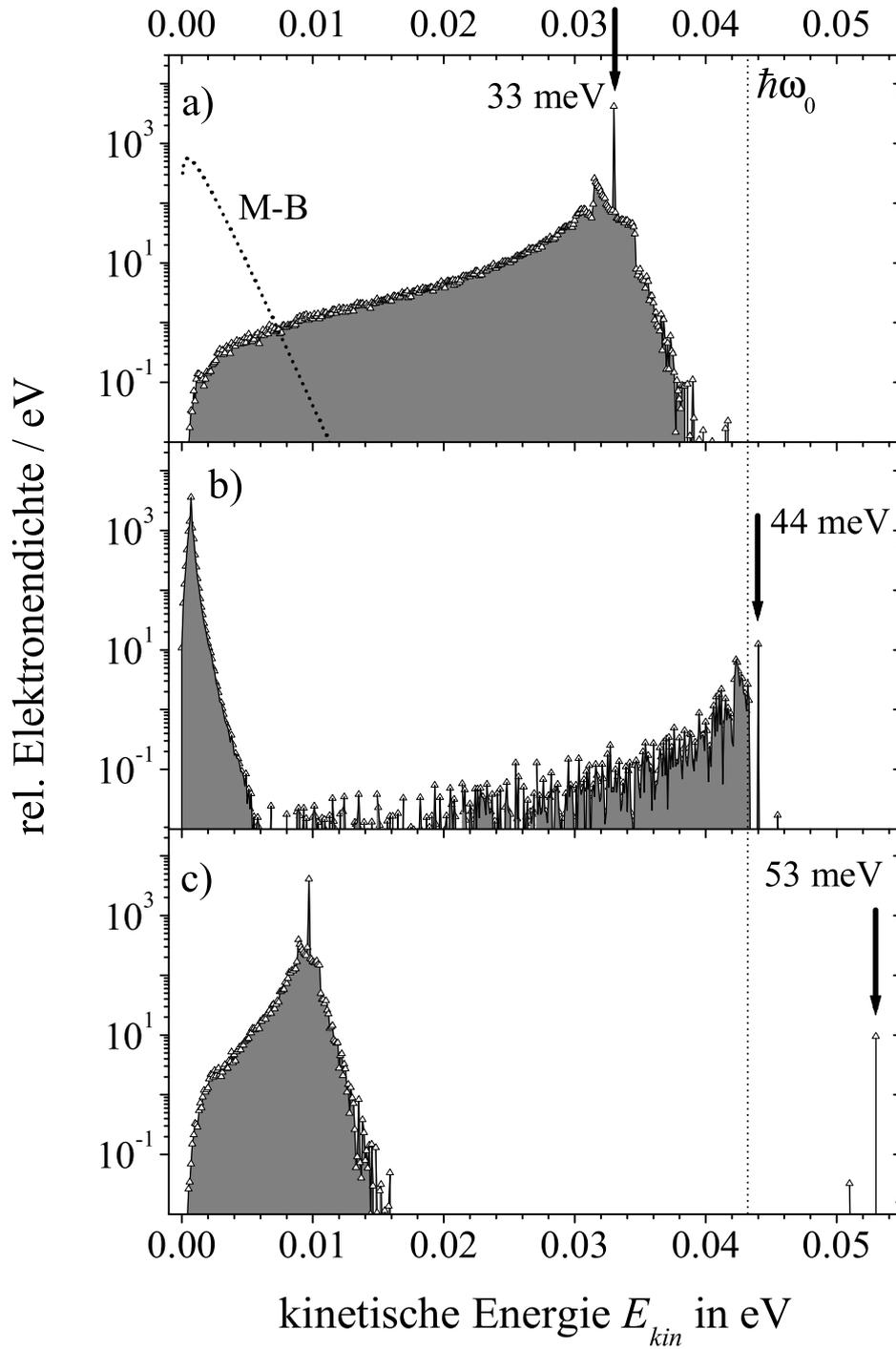


Abbildung 5.9: Energetische Verteilung der Elektronendichte bei $T = 10 \text{ K}$ für die Anregungsenergien a) $E_{exc} = 33 \text{ meV} = 0,76 \hbar\omega_0$; b) $E_{exc} = 44 \text{ meV} = 1,02 \hbar\omega_0$ und c) $E_{exc} = 53 \text{ meV} = 1,22 \hbar\omega_0$. Hierbei ist $D_z = 500 \text{ nm}$.

gie $\hbar\omega_0$ des LO-Phonons, die sich für eine Grenzflächenentfernung von $D_z = 500$ nm bei $T = 10$ K ergeben. Zum Vergleich ist in Abb. 5.9-a) nochmals die energetische Verteilung für $E_{exc} = 33$ meV ($= 0,76 \hbar\omega_0$) dargestellt. Bei einer Anregungsenergie von $E_{exc} = 44$ meV ($= 1,02 \hbar\omega_0$), d. h. um $0,7$ meV oberhalb von $\hbar\omega_0$, baut sich für die Elektronen eine Energieverteilung auf, die eine starke Konzentration bei $E_{kin} = 0,7$ meV aufweist (Abb. 5.9-b). Diese ist um mehr als zwei Größenordnungen höher als die Dichte an $E_{kin} = E_{exc}$. In diesem Fall emittieren die Elektronen in sehr kurzen Zeiten ein LO-Phonon und werden in die Nähe des Leitungsbandminimums gestreut. Erst dann beginnt die energetische Verbreiterung der Verteilung durch nachgeordnete Streuung mit akustischen Phononen. Bei Energien wenig unterhalb der LO-Eigenenergie $\hbar\omega_0$ streuen Elektronen an akustischen Phononen inelastisch und relaxieren dabei nur langsam. Abb. 5.9-c) zeigt die Energieverteilung für eine Anfangsenergie $E_{exc} = 53$ meV ($= 1,22 \hbar\omega_0$) deutlich oberhalb von $\hbar\omega_0$. Die höchste resultierende Elektronendichte liegt hier um $E_{kin} = 9,7$ meV mit einem steilen Ausläufer zu hohen Energien und einem flachen zu niedrigen Energien hin. Deutlich ausgeprägt sind auch die Phonon-Strukturen im Abstand von ca. 1 meV um das Maximum. Bei der Anfangsenergie E_{exc} ist wiederum eine δ -förmige Verteilung festzustellen, deren Dichte allerdings gegenüber dem Maximum bei $9,7$ meV um über zwei Größenordnungen niedriger ist.

Für höhere Anfangsenergien wurde ein vergleichbares Verhalten gefunden. Entlang den *Sprossen* der LO-Kaskade mit Energien von $E_{kin} = E_{exc} - n \cdot \hbar\omega_0$ (n ganzzahlig) bilden sich δ -artige Verteilungen aus. Unterhalb von $E_{kin} < \hbar\omega_0$ werden Verteilungen festgestellt, die eine analoge Form haben, wie sie in Abb. 5.9-a) und -c) dargestellt sind.

In Kap. 5.3.1 wurde gezeigt, dass sich die Einfangzeiten für Elektronen mit $E_{exc} = 33$ meV nur wenig voneinander unterscheiden, wenn sie mit \mathbf{k}_i in $(0,0,-1)$ - oder in $(0,0,1)$ -Richtung starten. Betrachtet man die Dichteverteilung in Abhängigkeit von der Richtung des Anfangsimpulses $\hbar\mathbf{k}_i$, stellt man Verteilungen fest, die nahezu identisch sind, solange $E_{kin} < \hbar\omega_0$ gilt. Bei höheren Anregungsenergien dagegen haben Elektronen mit \mathbf{k}_i in $(0,0,-1)$ -Richtung auf kurzen Entfernungen D_z eine deutlich kürzere Einfangzeit. Dies spiegelt sich in den Verteilungen dadurch wider, dass der niederenergetische Ausläufer der Verteilung dieser Elektronen niedrigere Dichten aufweist als die Verteilung für Elektronen, die in $(0,0,1)$ -Richtung starten. Für lange Flugstrecken dagegen, d. h. nach vielen Streuprozessen, ist in der Verteilung der Elektronendichte kein signifikanter Einfluss der Anfangsrichtung des Elektrons festzustellen.

Die Energieverteilung der Elektronendichte unterscheidet sich deutlich von der Maxwell-Boltzmann-Verteilung. Die Elektronen haben auf ihrer Wanderung durch den Kristall nicht genug inelastische Streuungen erfahren, um ausreichend zu relaxieren und eine M-B-Verteilung bei der Gittertemperatur $T_g = 10$ K anzunehmen. Sowohl wegen der Konzentration der Elektronendichte bei der Anfangsenergie und bei Energien, die um $n \cdot \hbar\omega_0$ niedriger als E_{exc} sind, als auch wegen den Strukturen aus der ersten Streuung eines DA-Phonons lässt

sich die Energieverteilung der Elektronen im Heterokontakt bei 10 K prinzipiell nicht mit einer M-B-Verteilung beschreiben. Dies gilt auch für M-B-Verteilungen bei Temperaturen $T > T_g$.

Hinweise hierauf finden sich bereits bei Maksym [106] und Ulbrich [107]. Maksym hat den Einfluss der ee-Streuung auf die Besetzungsdichte von Elektronen im GaAs-Kristallvolumen bei $T = 1$ K untersucht. Für Anregungsdichten von $n = 10^{11} - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, die bereits deutlich oberhalb der in dieser Arbeit verwendeten liegen, findet er nicht-Maxwell-artige Verteilungen mit einer deutlichen Schulter bei der Anregungsenergie, die in seinem Fall nur 1,46 meV oberhalb des Leitungsbandminimums liegt. Er zeigt, dass die ee-Streuung bei diesen Anregungsdichten lediglich zu einer geringen Erwärmung der Energieverteilung führt und die Strukturen in der Nähe der Anregungsenergie etwas abgerundet werden. Für moderat höhere Anregungsdichten ergaben sich thermische Besetzungsdichten. Der Einfluss der Anregungsenergie und der Temperatur auf die Energieverteilung wurde von ihm [106] nicht untersucht. Ulbrich [107] zeigt mit zeitaufgelösten PL-Messungen, dass die Verteilungsfunktion nahe des Leitungsbandminimums erst 4 ns nach dem Anregungspuls eine thermische Verteilung annimmt. Auch seine Anregungsdichten von $9 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ sind deutlich höher als im vorliegenden Fall. Eine weitere Unterstützung der These, dass die Thermalisierung bei tiefen Temperaturen nach einigen 100 ps noch nicht abgeschlossen ist, haben Gurioli et al. [108] indirekt aus der exzitonischen Lumineszenz erhalten. Exzitonen können strahlend rekombinieren, wenn der Gesamtimpuls des gebundenen Elektron-Loch-Paares sehr klein ist, d. h. in der Regel wenn Elektron und Loch jeweils zu kleiner Energie relaxiert sind. Die zeitliche Entwicklung der Exzitonen-Lumineszenz ist damit ein Indikator für den Grad der Ladungsträgerrelaxation. Diese Entwicklungszeit liegt für GaAs bei $T = 10$ K und Anregungsdichten von $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ in der Größenordnung 1 ns [108].

Zusammenfassend kann gesagt werden: Bei $T = 10$ K und den verwendeten niedrigen Anregungsintensitäten erreichen die optisch erzeugten Elektronen die Grenzfläche, bevor sich eine thermische Verteilung der Elektronenenergie ausgebildet hat.

5.3.3 Energieverteilung bei höheren Temperaturen

In Kap. 5.2.2 wurde für das simulierte Photostromspektrum die Temperaturabhängigkeit diskutiert. Das Auftreten der Minima im Photostrom konnte für $T = 10$ K bereits mit einer nicht-thermisch verteilten Elektronendichte erklärt werden. Dieses Kapitel beschäftigt sich für $E_{exc} = 33$ meV mit der Elektronenverteilung bei höheren Temperaturen.

Die Energieverteilung der Elektronendichte mit steigender Temperatur ist in Abb. 5.10 für die Temperaturen $T = 10, 25, 50$ und 70 K gezeigt. Dargestellt sind die gemittelten Verteilungen für Elektronen, die $D_z = 500$ nm von der Grenzfläche mit einer Anfangsenergie von $E_{exc} = 33$ meV erzeugt wurden. Zum Vergleich sind die zur jeweiligen Temperatur gehören-

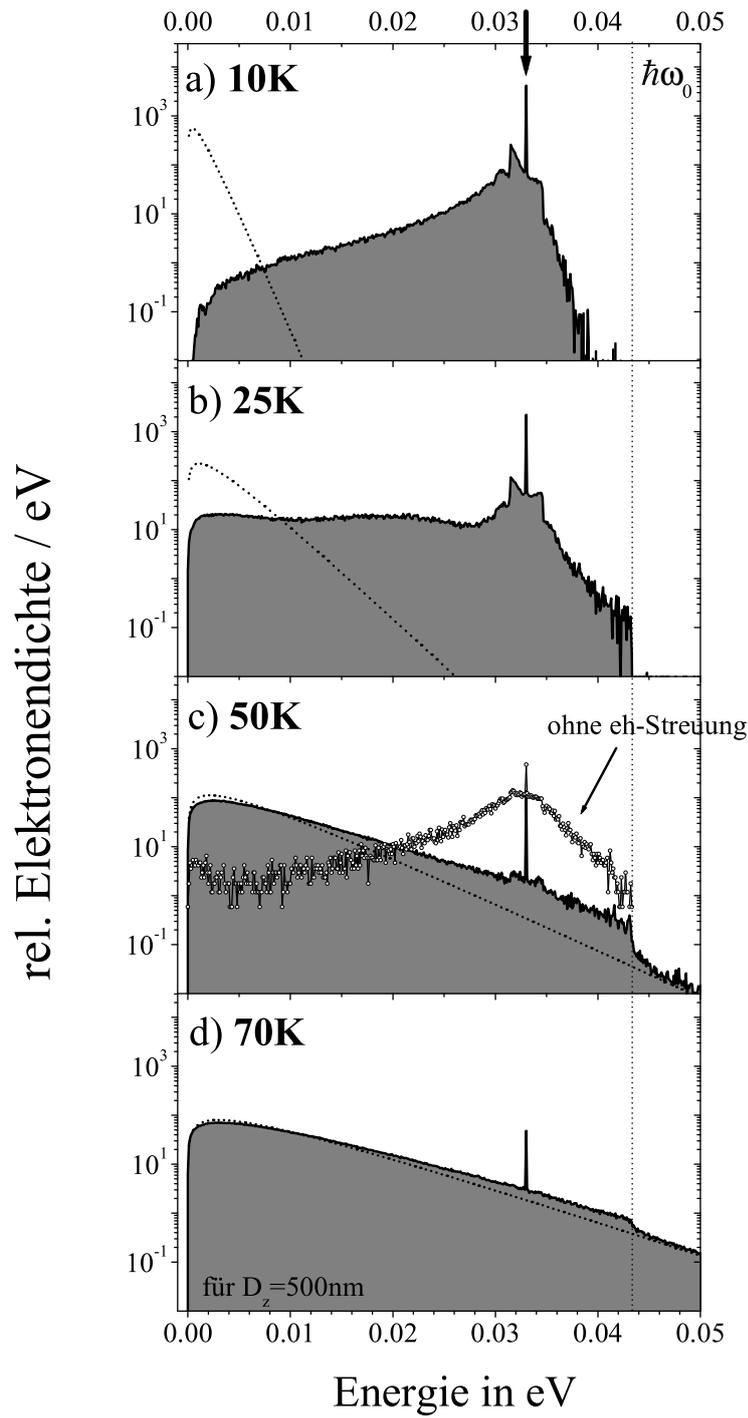


Abbildung 5.10: Energieverteilung der Elektronendichte für die Temperaturen $T = 10, 25, 50$ und 70K . Die Anfangsenergie ist $E_{exc} = 33\text{meV}$ und der Erzeugungsabstand $D_z = 500\text{nm}$. In Bild c) ist zusätzlich die Elektronendichte bei Vernachlässigung der eh-Streuung gezeigt.

den Maxwell-Boltzmann-Verteilungen eingezeichnet. In Abb. 5.10-a) ist die bereits diskutierte nicht-thermische Verteilung bei 10 K dargestellt. Bereits bei $T = 25$ K [in Abb. 5.10-b] ist ein großer Anteil der Elektronen in die Nähe des Leitungsbandminimums relaxiert. Trotzdem unterscheidet sich die Verteilung noch deutlich von einer M-B-Verteilung. Eine hohe Besetzungsdichte verbleibt nahe der Anfangsenergie. Auch sind die Strukturen der DA-Streuung nach wie vor sehr stark ausgeprägt. Bei 25 K ist noch keine thermische Verteilung erreicht. Für $T = 50$ K [in Abb. 5.10-c] kann der niederenergetische Bereich unterhalb der Anfangsenergie als thermisch verteilte M-B-Verteilung mit einer Temperatur $T_e = 62$ K beschrieben werden, die wärmer ist als die Gittertemperatur. Dieser Teil der Elektronendichte ist bereits thermalisiert, aber noch nicht auf die Gittertemperatur relaxiert. Nahe der Anfangsenergie verbleibt nach wie vor eine hohe, scharfverteilte Dichte, deren Amplitude das niederenergetische Maximum um fast eine Größenordnung überragt. An der LO-Eigenenergie $\hbar\omega_0$ ist in der Verteilung ein Sprung zu erkennen. Die Relaxation durch die Emission von LO-Phononen ist weiterhin der schnellste Relaxationsprozess. Die Energieverteilung für eine Gittertemperatur $T_g = 70$ K [in Abb. 5.10-d] zeigt für niedrige kinetische Energien entsprechend eine weitgehend thermische Form, die mit einer Elektronentemperatur von $T_e = 77,3$ K beschrieben werden kann. Auch hier ist bei der Anfangsenergie noch eine deutliche Erhöhung der Elektronendichte zu erkennen. Für den Rest der Verteilung ist jedoch der Unterschied zur thermischen M-B-Verteilung gering.

In Abb. 5.10-c) ist zusätzlich die Verteilung bei Vernachlässigung der Streuung zwischen Elektronen und thermischen Löchern gezeigt. In diesem Fall stellt sich bei $T = 50$ K auch im Bereich niedriger Energien keine thermisch beschreibbare Energieverteilung ein. Die resultierende Dichte ist weitgehend symmetrisch um die Anfangsenergie E_{exc} verteilt. In der Nähe des Leitungsbandminimums steigt sie etwas an. Dies rührt von Elektronen her, deren ursprüngliche kinetische Energie durch sukzessive Absorption von akustischen Phononen die Schwellenenergie $\hbar\omega_0$ überschritten hat. Die folgende Emission von LO-Phononen führt zur Streuung in die Nähe des Leitungsbandminimums. Bei 50 K ist die Absorption von akustischen Phononen gegenüber den tiefen Temperaturen bereits deutlich erhöht. Der Vergleich der Verteilungen mit und ohne eh-Streuung zeigt, dass die Elektron-Loch-Streuung der dominierende Relaxationskanal in der untersuchten InP:Zn-Struktur ist, der die Energieverteilung in die thermische Verteilung treibt. Diese thermische Verteilung wird aber auch bei höheren Temperaturen nicht vollständig erreicht, ist doch weiterhin eine Konzentration der Elektronendichte in der Nähe der Anfangsenergie E_{exc} festzustellen.

Die Entwicklung der Elektronenverteilung hin zu einer Verteilung, die als weitgehend thermisch bezeichnet werden kann, zeigt Abb. 5.11. Es werden die mittleren Energien $\langle E_{kin} \rangle$ entsprechend Gl. (2.3) dargestellt, die sich aus den Elektronenverteilungen während des *random walk* ergeben, und mit der mittleren Energie $E_{FEG} = 3/2 k_B T$ eines freien Elektrogases verglichen. Gezeigt werden die Verläufe für die drei Wegstrecken $D_z = 100, 250$ und 1000 nm im Temperaturbereich von $T = 10 - 300$ K.

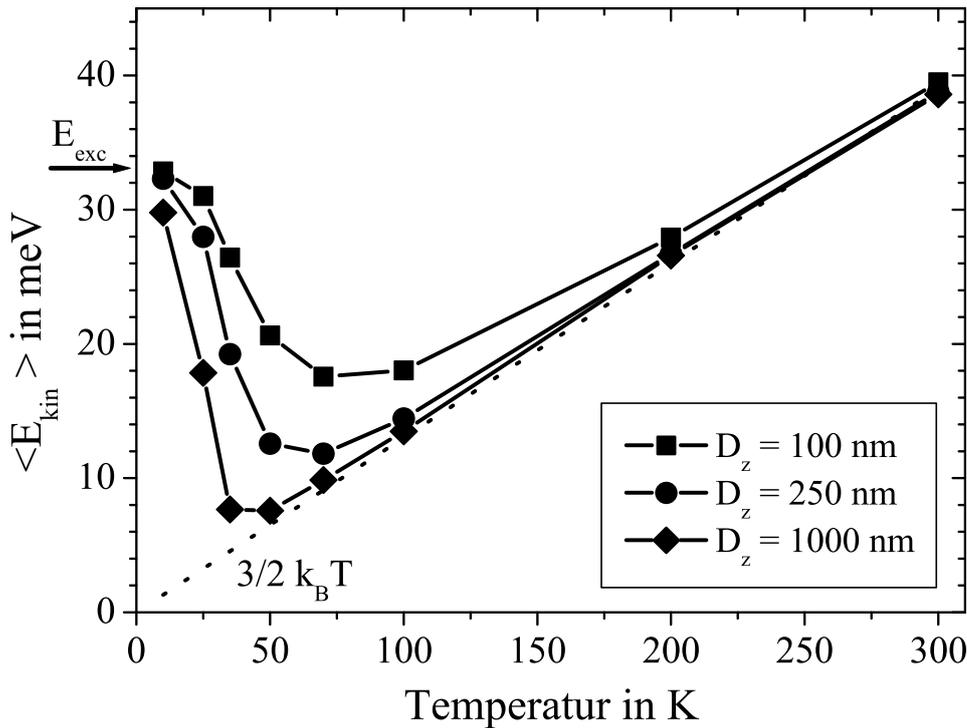


Abbildung 5.11: Mittlere Energie der Elektronen in Abhängigkeit von der Temperatur für eine Anfangsenergie $E_{exc} = 33$ meV und einen Anfangsimpuls $\hbar\mathbf{k}_i$ in $(0,0,-1)$ -Richtung zur Grenzfläche hin. Die mittlere Energie E_{FEG} des freien Elektronengases ist gepunktet dargestellt.

Unabhängig von der Wegstrecke D_z beträgt $\langle E_{kin} \rangle \approx 3/2 k_B T$ für Temperaturen oberhalb von $T = 200$ K. Unterhalb von 50 K ist die mittlere Energie deutlich höher als die eines freien Elektronengases. Für 10 K unterscheidet sie sich unabhängig von der Wegstrecke D_z nur wenig von der Anfangsenergie $E_{exc} = 33$ meV der optisch erzeugten Elektronen. Legen die Elektronen weite Strecken zurück ($D_z = 1000$ nm) und sind damit längere Zeiten unterwegs, können sie stärker relaxieren und erreichen Energieverteilungen, deren mittlere Energie schon bei 50 K mit $\langle E_{kin} \rangle = 7,6$ meV nahe der eines freien Elektronengases ($E_{FEG} = 6,5$ meV) ist. Im Gegensatz dazu sind Elektronen nach 100 nm Flugstrecke und der entsprechend kurzen jeweiligen Flugdauer erst auf eine mittlere Energie von 21 meV relaxiert. Um nach diesen kurzen Strecken auf $\langle E_{kin} \rangle \approx 3/2 k_B T$ relaxieren zu können, sind deutlich höhere Relaxationsraten notwendig, die erst ab ca. 200 K erreicht werden.

Die Form der Verteilung wird hiernach aus den Raten der Energierelaxation bestimmt, die stark von der Temperatur abhängen und im Wesentlichen mit steigender Temperatur zunehmen. Gleichzeitig wird der Relaxationsverlauf aber auch von der Zeitdauer beeinflusst,

nach der die optisch erzeugten Elektronen die Grenzfläche erreichen. Diese Einfangzeit hängt allerdings wiederum von der Energie der Elektronen, also dem Grad der Relaxation, ab. In Kap. 5.3.1 sind diese Einfangzeiten t_z für $T = 10$ K diskutiert worden. In Abb. 5.12 ist nun ihre Entwicklung mit steigender Temperatur für die Abstände $D_z = 100, 250, 500, 750$ und 1000 nm dargestellt.

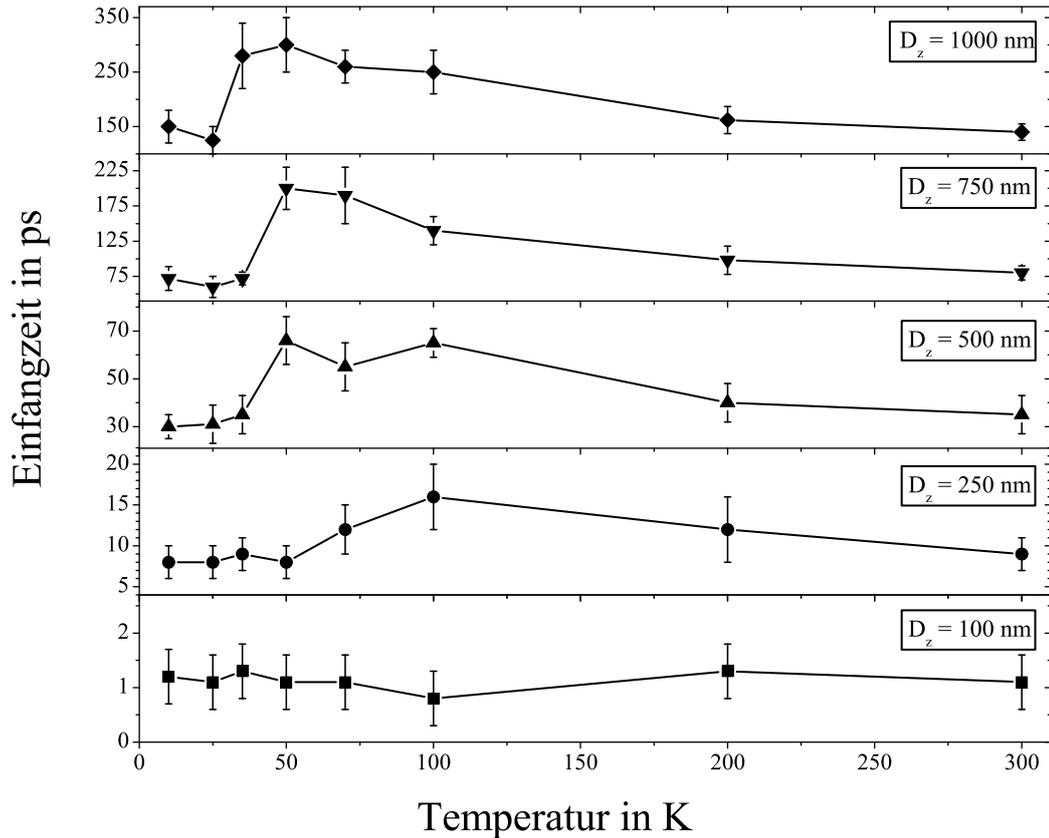


Abbildung 5.12: Einfangzeiten t_z im Temperaturbereich 10 – 300 K für Elektronen mit einer Anfangsenergie $E_{exc} = 33$ meV und einem Anfangsimpuls $\hbar\mathbf{k}_i$ in $(0,0,-1)$ -Richtung.

Um die Grenzfläche vom Abstand $D_z = 100$ nm aus zu erreichen, benötigen die Elektronen eine Einfangzeit von rund 1 ps. Diese Flugzeit ist innerhalb der Fehlergrenzen unabhängig von der Temperatur. Für die größeren Abstände zur Grenzfläche ($D_z > 100$ nm) ändern sich die Einfangzeiten mit der Temperatur. Deren gesamter Verlauf jedoch spiegelt für die einzelnen Flugstrecken D_z eine vergleichbare Entwicklung wider. Es gibt eine Temperatur T_z , unterhalb der die Einfangzeiten nahezu konstant sind. Oberhalb von T_z findet der Einfang zu signifikant späteren Zeiten statt. Mit weiterer Temperaturerhöhung jedoch nimmt die Einfangzeit wieder langsam ab. Dieser Vorgang setzt für kurze Flugstrecken bei höheren

Temperaturen ein ($T_{250nm} = 50$ K) als für lange Abstände D_z ($T_{1000nm} = 25$ K).

Auch in diesem Verhalten drückt sich die Relaxation der Elektronenverteilung aus. Unterhalb von T_z ist die Dynamik der Elektronen stark von der Anfangsenergie bestimmt. Die mittlere Energie liegt über der eines vergleichbaren thermalisierten Elektronengases. Oberhalb von T_z ist die Relaxation weit fortgeschritten. Bei langen Strecken D_z bzw. bei höheren Gittertemperaturen hat sich die mittlere Energie der Elektronenverteilung der mittleren Energie eines thermischen Systems angenähert. Sie wird nun von der Gittertemperatur bestimmt und nicht mehr von der Anfangsenergie. Mit weiter steigender Temperatur wächst die mittlere Energie und nimmt deshalb die Einfangzeit wieder ab.

5.4 Elektronendichte bei 300 K

Wie schon in Kap. 5.3.3 diskutiert, findet mit steigender Temperatur die Thermalisierung der Elektronen auf immer kürzeren Zeitebenen statt. Der Einfluss der Grenzfläche auf den Thermalisierungsprozess wird deshalb im Allgemeinen bei Raumtemperatur abnehmen und nur noch für die Elektronen relevant sein, die sehr nahe der Grenzfläche erzeugt werden. Dies ist in den energetischen Verteilungen der Elektronendichte in Abb. 5.13 für 300 K dargestellt.

Gezeigt wird jeweils die Elektronendichte für eine Anfangsenergie von $E_{exc} = 234$ meV, wenn die Elektronen in einer Entfernung von 10, 75 und 750 nm von der Grenzfläche erzeugt werden. Wie zu erwarten war, ist bei einer Entfernung von 750 nm der Einfluss der Grenzfläche zu vernachlässigen [Abb. 5.13-c)]. Die Elektronendichte ist thermisch verteilt. Lediglich die Andeutung einer Abweichung ist bei hohen Energien festzustellen, die einen Anteil an der Gesamtzahl der Elektronen von $2 \cdot 10^{-4}$ ausmacht.

Werden die freien Elektronen dagegen nur 10 nm von der Grenzfläche entfernt erzeugt [Abb. 5.13-a)], so lässt der schnelle Einfang an der Grenzfläche nicht hinreichend Zeit für den Thermalisierungsvorgang. Die energetische Verteilung der Elektronendichte ist in diesem Fall nicht-thermisch. Es ist eine signifikante, breit abweichende Konzentration der Elektronen bei kinetischen Energien in der Nähe der Anfangsenergie $E_{exc} = 234$ meV festzustellen. Zusätzlich treten gehäuft Elektronen mit kinetischen Energien auf, die durch LO-Phononen in einen ganzzahligen Abstand $n \cdot \hbar\omega_0$ um E_{exc} gestreut werden. Diese Elektronen machen einen Anteil von rund 68% aus.

Für $D_z = 75$ nm ist die Elektronendichte in Abb. 5.13-b) bei niedrigen Energien weitgehend thermalisiert. Es zeigen sich jedoch noch Abweichungen im hochenergetischen Bereich der Verteilung, die allerdings nur noch rund 3,5% der Elektronen betreffen.

Zusammengefasst gilt: Auch bei Raumtemperatur beeinflusst eine Grenzfläche den Thermalisierungsprozess. Dieser Einfluss wird aber erst signifikant für Elektronen, die weniger als

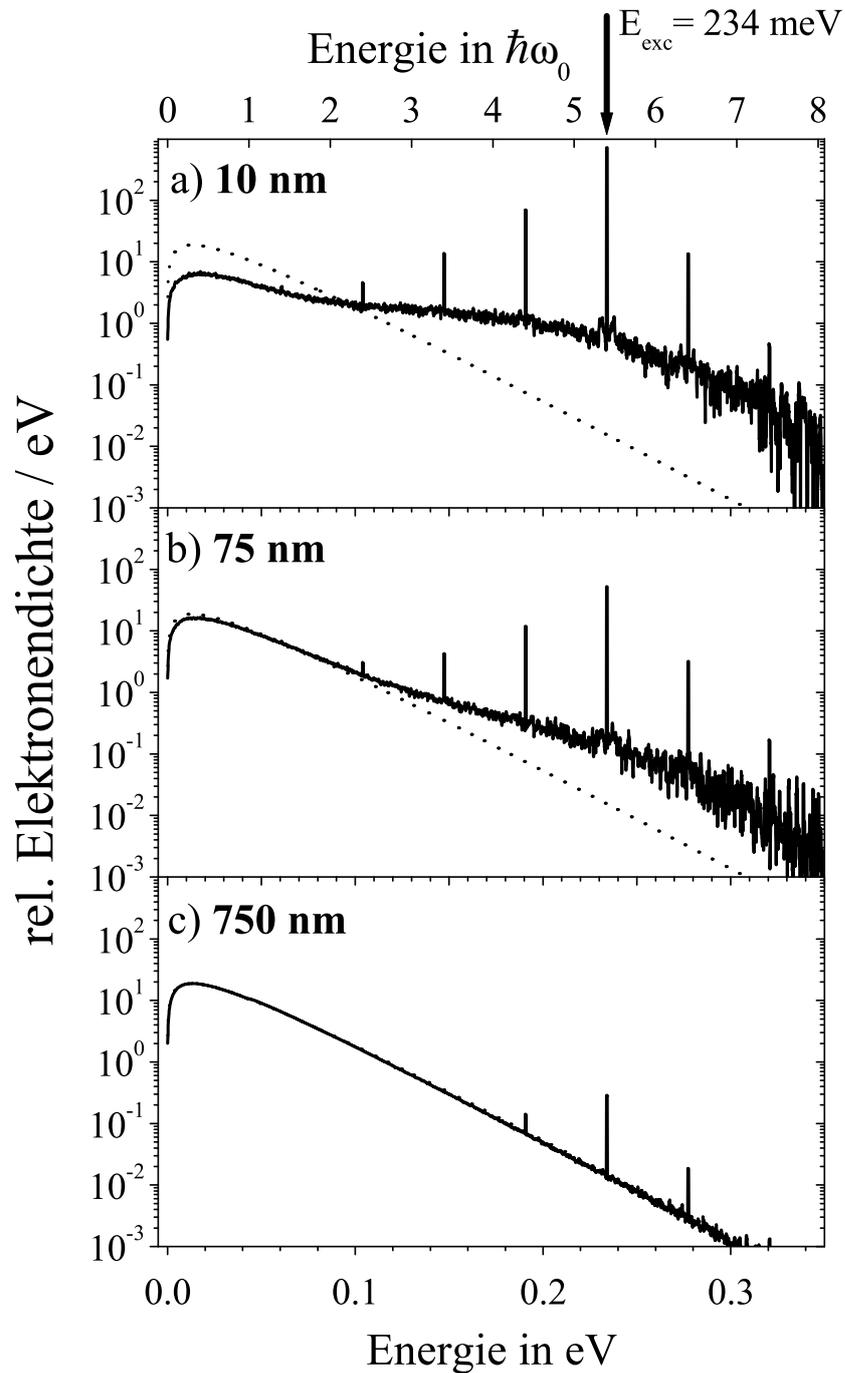


Abbildung 5.13: Simulierte Energieverteilung der Elektronendichte von Elektronen nahe der Grenzfläche für (a) $D_z = 10$ nm, (b) $D_z = 75$ nm und (c) $D_z = 750$ nm bei $T = 300$ K. Die Anfangsenergie ist $E_{exc} = 234$ meV. Zum Vergleich ist die Energieverteilung eines freien Elektronengases angegeben.

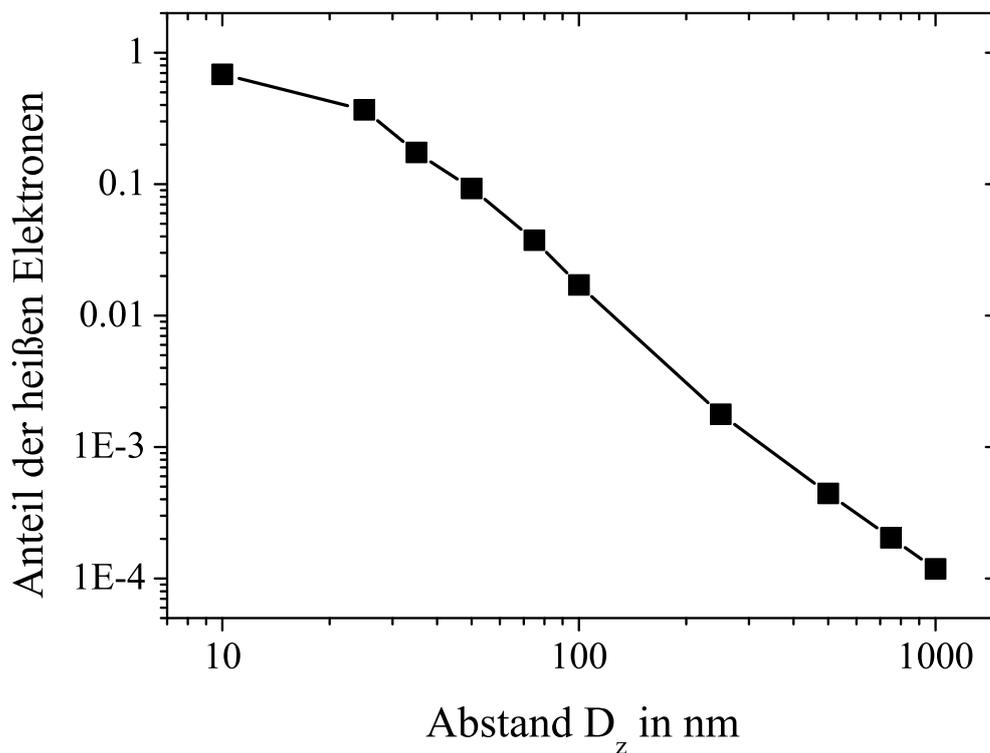


Abbildung 5.14: Anteil der heißen Elektronen in der Elektronendichte für eine Anfangsenergie $E_{exc} = 234$ meV.

100 nm von der Grenzfläche entfernt erzeugt werden. In diesem Fall verhindert die Grenzfläche eine vollständige Thermalisierung. Wie Abb. 5.14 zeigt, beträgt der Anteil an heißen Elektronen für Abstände $D_z < 100$ nm mehr als 1%.

