

Zur Theorie strahlungsloser und strahlender
Multiphonon-Prozesse an tiefen Zentren bei
Anwesenheit eines elektrischen Feldes

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Wissenschaftlichen Rat
der Humboldt-Universität zu Berlin

von

Dipl.-Phys. Andreas Schenk
(geb. am 19. 7. 1957 in Berlin)

Gutachter:

Berlin, den

Vorwort

Die vorliegende Dissertation wurde im Rahmen einer planmäßigen Aspirantur am Bereich " Theoretische Halbleiterphysik " der Sektion Physik der Humboldt-Universität zu Berlin im Zeitraum Sept. bis Okt. 1981 und von Mai 1983 bis Mai 1986 erarbeitet. Dabei wurden Methoden und Ergebnisse meiner von Doz. Dr. K. Peuker betreuten Diplomarbeit zu Untersuchungen der Kinetik von Multiphonon-Rekombinationsprozessen verwendet.

Den Schwerpunkt der Dissertation bildet die Feldabhängigkeit dieser Prozesse, die bei der kapazitätsspektroskopischen Analyse tiefer Störstellen wichtig wird. Methodisch knüpft die Arbeit an die im Bereich gesammelten Erfahrungen zu den Problemkreisen " Halbleiter im elektrischen Feld " und " Multiphonon-Theorie " an und schafft eine Verbindung zwischen beiden.

Viele Kollegen des Bereiches standen mir mit ihrem Wissen zur Seite. Besonderen Dank schulde ich meinem Betreuer, dem Direktor der Sektion Physik der Humboldt-Universität, Prof. Dr. R. Enderlein für sein stetiges förderndes Interesse und die Übermittlung seiner wertvollen Erfahrungen zum behandelten Thema, die den Fortgang der Arbeit stimuliert haben.

Für zahlreiche fruchtbare Diskussionen möchte ich Dr. Dr. D. Suisky, Doz. Dr. F. Bechstedt, Dr. O. Ziep sowie Dr. J. Röseler meinen aufrichtigen Dank sagen.

Die Diskussionen mit Dr. K. Irmscher und Dr. K. Maass vom Bereich " Atomstoßprozesse der Festkörperphysik " der Sektion Physik der Humboldt-Universität zur Frage der feldabhängigen Emissionsraten von Defekten in Silizium waren hilfreich für das Verständnis der experimentellen Situation und führten zu gemeinsamen Publikationen. Für diese Zusammenarbeit sei ihnen herzlich gedankt. Zu Dank verpflichtet bin ich auch Dr. S. Brehme (Karl-Marx-Universität Leipzig) für Diskussionen und die Übermittlung experimenteller Ergebnisse.

Inhaltsverzeichnis

Seite

Vorwort		1
1.	Einleitung	4
2.	Tiefe Störstellen im elektrischen Feld	8
2.1.	Modell-Hamiltonian, Schrödingergleichung, Bändermodell	8
2.2.	Modellpotential zur Beschreibung tiefer Störstellen	19
2.2.1.	Diskussion der Eigenschaften des Modell- potentials	19
2.2.2.	Folgerungen für die totale elektronische Übergangsrate	26
2.3.	Feldmodifikation der Störstellenzustandsdichte	29
3.	Theorie der Emissionsrate für strahlungslose Übergänge Störstelle - Band im neutralen Modell	33
3.1.	Darstellung der Meßmethode und experimenteller Ergebnisse	33
3.2.	Berechnung der Emissionsrate im Formalismus der Greenschen Funktionen	37
3.3.	Diskussion des Ergebnisses	47
3.3.1.	Spezialfälle: Multiphonon-Ladungsträger- emission und reines Tunneln	47
3.3.2.	Verhältnis von thermisch zu feldinduzierten Übergängen	49
3.3.3.	Diskussion der Feldabhängigkeit der Emissions- rate	51
3.4.	Anisotropieeffekte der Emissionsrate infolge Bandanisotropie	55
3.5.	Emissionsrate bei Ankopplung an mehr als eine Phononmode	58
3.6.	Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Bindungsenergie	59

	Seite	
3.7.	Vergleich mit experimentellen Resultaten	62
3.7.1.	Bestimmung empirischer Zentren-Parameter durch Anpassung an feldabhängige Emissionsraten	63
3.7.2.	Numerische Auswertung für die goldkorrelierte Störstelle und das A-Zentrum in Silizium	66
3.7.3.	Anwendung auf EL2 und E3 in GaAs sowie GaP:Fe	73
4.	Elektroabsorption an tiefen Störstellen	77
4.1.	Zusammenhang des Elektroabsorptionskoeffizienten mit Linienformfunktion und elektronischer Übergangsrate im neutralen Modell	77
4.2.	Starkfeld- und Schwachfeld-Näherung	79
4.3.	Bestimmung empirischer Zentren-Parameter aus dem Elektroabsorptionsspektrum	86
4.4.	Vergleich mit dem Experiment: Ni ²⁺ in ZnSe	86
5.	Thermische Übergänge an geladenen Zentren	89
5.1.	Nullfeld-Emissionsrate an geladenen Defekten	89
5.2.	Analytische Lösung für die feldabhängige Emissionsrate an geladenen Defekten	92
5.2.1.	Diskussion der Starkfeld-Näherung	92
5.2.2.	Lösung im Starkfeld-Fall und Diskussion für typische Parameter	95
5.2.3.	Der Fall schwächerer Felder - Koinzidenzeffekte	100
5.3.	Poole-Frenkel-Effekt an tiefen Zentren	104
6.	Literaturverzeichnis	108
Anlagen		114

1. Einleitung

Das Studium von Defekten in Halbleitermaterialien gehört zu den grundlegenden Aufgabenstellungen der modernen Festkörperphysik, da die optischen und elektrischen Eigenschaften von Halbleiterbauelementen wesentlich durch sie bestimmt werden. So können Defekte und Störstellen, die tief in der verbotenen Zone liegende Energieniveaus verursachen, einerseits die Funktionsweise von Bauelementen stark stören (unerwünschte Generations-Rekombinationsströme, zu kleine Quantenausbeuten von LEDs) oder sogar zu deren Ausfall führen, andererseits ist die kontrollierte Erzeugung solcher Niveaus erst die Grundlage erwünschter Arbeitsweisen, wie im Falle schneller Schaltdioden und optoelektronischer Bauelemente.

Von Bedeutung sind in diesem Zusammenhang strahlende und besonders strahlungslose Multiphononprozesse. Bei letzteren ist die elektronische Umladung der Störstelle von der simultanen Erzeugung bzw. Vernichtung vieler (bis zu 10^2) Phononen begleitet. Die wesentlichen Grundlagen für die theoretische Erklärung des strahlungslosen Einfangs und der Emission von Ladungsträgern wurden Anfang der fünfziger Jahre in den klassischen Arbeiten von Huang und Rhys /1/, Kriwoglaz /2/ und Kubo und Toyozawa /3/ geschaffen. Die Grundidee, Multiphonon-Übergänge in einem Modell mit linearer Elektron-Gitter-Wechselwirkung durch Auswertung der Nichtorthogonalität der Schwingungswellenfunktionen, die zu verschiedenen Elektronenniveaus gehören, zu erklären, hat bis heute Bestand. Trotzdem noch bis vor wenigen Jahren Kontroversen, insbesondere im Hinblick auf die Größenordnung theoretischer Einfangquerschnitte, auftraten, erhielt die Theorie den entscheidenden Impuls erst mit der 1974 von Lang /4/ entwickelten Methode der Deep-Level Transient Spectroscopy (DLTS). Neben den "klassischen" Untersuchungsmethoden, wie Messung des Halleffektes und der Leitfähigkeit bzw. Photoleitfähigkeit und Infrarotspektroskopie, war nunmehr ein experimentelles Hilfsmittel verfügbar, mit dem unter günstigen Bedingungen alle für die Rekombination über tiefe Störstellen wichtigen Zentrenparameter bestimmt werden können /5/.

Verstärkte Bemühungen auf theoretischem Gebiet führten zur Klärung von Diskrepanzen in den Grundlagen der Theorie einerseits /6, 7, 16/ und betrafen andererseits neu entstandene Fragestellungen, wie die nach der Feldabhängigkeit bestimmter Parameter. Da das "Meßgerät" der DLTS die Raumladungszone eines Schottky- bzw. p-n-Übergangs ist, sind die Defekte elektrischen Feldern von 10^3 Vcm^{-1} bis zu einigen 10^5 Vcm^{-1} ausgesetzt. Bereits 1970 beobachteten Tasch und Sah /8/ eine bei einigen 10^4 Vcm^{-1} einsetzende Feldabhängigkeit der thermischen Emissionsrate am dominierenden Akzeptorniveau in golddotiertem Silizium. Die permanente Verbesserung der kapazitiven Meßmethoden in den letzten zehn Jahren gestattete die immer genauere Bestimmung der elektronischen Parameter tiefer Zentren, was z. B. im Falle des golddotierten Siliziums zu neuen Resultaten für die früher scheinbar sehr genau bekannte Aktivierungsenergie führte /9/. Eine starke Feldabhängigkeit der thermischen Rate wurde auch in anderen Materialien gefunden, so in GaAs am Cr-Zentrum /10/, am technologisch bedeutsamen EL2-Zentrum /11, 12/ und am E3-Zentrum /13/ sowie am System GaP:N /14/. Irmischer et al. /15/ untersuchten die Feldabhängigkeit der Emissionsrate am A-Zentrum und an der goldkorrelierten Störstelle in Silizium. Zur theoretischen Erklärung der beobachteten Feldabhängigkeit wurde die phononassistierte Tunnelemission /11/ bzw. der Poole-Frenkel-Effekt herangezogen /14/.

Die genaue Kenntnis des Feldeinflusses auf Ladungsträgeremissionsraten ist besonders für eine zuverlässige Wiedererkennung der Defekte unter anderen Meßbedingungen (Proben mit veränderter Dotierung, andere Vorspannung u. ä.) notwendig, da häufig die gemessenen thermischen Emissionsraten bzw. die daraus ermittelten Aktivierungsenergien für einen Vergleich herangezogen werden /5/. Gerade hier existieren in der Literatur erhebliche Diskrepanzen: Während z.B. Makram-Ebeid und Lannoo /11/ eine extrem starke Feldabhängigkeit der Emissionsrate am EL2-Zentrum in GaAs feststellten, beobachteten Li und Wang /17/ nur eine sehr schwache und Kaminska et al. /18/ keine Feldabhängigkeit bei höheren Temperaturen.

In der vorliegenden Arbeit wird versucht, durch eine detaillier-

te theoretische Analyse der Feld- und Temperaturabhängigkeit der Emissionsrate tiefer Störstellenelektronen Aussagen über zu erwartende Kurvenverläufe zu machen und zu zeigen, wie durch Anpassung an Meßpunkte auf mikroskopische Zentrenparameter geschlossen werden kann. Dabei wird von einem einfachen Modell für das Störstellenpotential ausgegangen, das die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für Übergänge an neutralen Störstellen im gesamten Feldstärke- und Temperaturbereich gestattet und somit nicht von vornherein an die Verwendung von WKB-Näherungen /19/ geknüpft ist. Dieses Modell und die daraus folgenden Resultate sind unter bestimmten Bedingungen auch für geladene Zentren brauchbar, die i. a. jedoch einer Erweiterung um die Coulomb-Wechselwirkung bedürfen, wodurch aber zuverlässige Aussagen auf analytischem Wege nur noch im Starkfeld-Fall möglich sind. Darauf und auf mögliche Ergebnisse für geladene Störstellen in schwachen Feldern wird ausführlich im 5. Kapitel der Arbeit eingegangen.

Es ist nicht Ziel und Gegenstand der Arbeit, Resultate über die Struktur und das Energiespektrum der Defekte abzuleiten; dies bleibt der Pseudopotential-Theorie und der empirischen tight-binding-Methode vorbehalten. Eine analytische Beschreibung der Wirkung äußerer Störungen auf bestimmte Zentrenparameter erfordert stattdessen, grundlegende Eigenschaften der Störstelle wie Bindungsenergie und Lokalisationsradius in einfachster Weise zu modellieren, da man auf die explizite Kenntnis der (gestörten) Wellenfunktionen angewiesen ist. So werden in dieser Arbeit keine komplizierteren als punktförmige Defekte behandelt. Inwieweit sich die sehr grobe Beschreibung der Störstelle auf die zu untersuchende Feld- und Temperaturabhängigkeit der Übergangsraten auswirkt, wird in den Kapiteln 2 und 3 diskutiert. Darüberhinaus wird in Kapitel 3 die Emissionsrate durch Ausdehnung der Standard-Multiphonon-Theorie auf den Fall eines zusätzlichen homogenen elektrischen Feldes in erster Ordnung der Störungstheorie bzgl. der Elektron-Feld- und der Elektron-Gitter-Wechselwirkung berechnet. Eine qualitative Diskussion des Verhältnisses der beiden auftretenden Generationskanäle zeigt die Dominanz des feldunterstützten, thermisch indu-

zierten Prozesses. Da für Übergänge an tiefen Niveaus die Modifikation der Bandzustände die wesentliche Ursache des Feldeffektes ist, muß, gerade im Hinblick auf Störstellen in Silizium, die Bandanisotropie in die Diskussion einbezogen werden. Im letzten Teil des 3. Kapitels erfolgt der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen an verschiedenen Defekten in Si, GaAs und GaP.

Neben den feldassistierten, thermisch induzierten und den phononassistierten, feldinduzierten Übergängen tritt in Form der strahlenden Übergänge ein zusätzlicher Generations-Rekombinationskanal auf, dessen Dominanz in optoelektronischen Bauelementen erwünscht ist, der aber auch im Fall ausgeprägt nichtstrahlender Rekombinationszentren bei hinreichend tiefen Temperaturen zum dominierenden Konkurrenzmechanismus werden kann /20/. Wegen der Bedeutung optischer Methoden zur Untersuchung von Defekten wird im 4. Kapitel das Elektroabsorptionsspektrum für optische Übergänge aus einem tiefen Niveau in ein Band unter Beteiligung von Multiphonon-Prozessen berechnet. Es wird erläutert, wie die Linienform zur Bestimmung der charakteristischen Zentrenparameter interpretiert werden muß. Am Ende des 4. Kapitels wird ein gemessenes Elektroabsorptionsspektrum mit der Theorie verglichen.

2. Tiefe Störstellen im elektrischen Feld

2. 1. Modell-Hamiltonian, Schrödingergleichung, Bändermodell

Sieht man von ein- und zweidimensionalen Störungen des idealen Kristalls ab, sind " tiefe " Niveaus in Halbleitern die Folge von Fremdatomen, die sich schlecht ins Wirtsgitter einpassen, von natürlichen Defekten, wie Vakanzen, antisite- oder Zwischen-gitteratomen, bzw. von Komplexen beider Typen. Stark lokalisierte Wellenfunktionen und Ionisierungsenergien von der Größenordnung der Energielücke sind typische Eigenschaften tiefer Störstellen, die die Anwendung der gewöhnlichen Effektivmasstheorie (EMT /21/) unmöglich machen. Die scharfe Lokalisation hat weiterhin eine i. a. starke Elektron-Phonon-Kopplung zur Folge, die im Unterschied zu flachen Zentren bevorzugt mit einer oder mehreren lokalen Phononmoden erfolgen kann. Tiefe Störstellen können in verschiedenen Ladungszuständen existieren und haben darüber hinaus die ungewöhnliche Eigenschaft, z. B. Donatoren zu sein, obwohl sie energetisch näher an der Valenzbandkante liegen. Überhaupt manifestieren sich die Probleme, die tiefe Störstellen hervorrufen, schon im Sprachgebrauch: " Donator " bezeichnet einen Zustand, der positiv ist, wenn das Fermi-niveau E_F unterhalb der Grundzustands-Bindungsenergie E_t liegt, und neutral im andern Fall; " Doppel-Donator " bezeichnet einen zweifach positiven Zustand für Fermi-niveau unterhalb und einen einfach positiven Zustand für Fermi-niveau oberhalb des Energieniveaus E_t . " Trap " weist auf eine Störstelle mit deutlich unterschiedlichen Einfangkoeffizienten für Elektronen und Löcher hin, während ein " Rekombinationszentrum " beide Typen von Ladungsträgern gleichermaßen stark binden kann- die Werte des Elektronen- und Löchereinfangkoeffizienten sich folglich nicht zu stark voneinander unterscheiden dürfen /22, 23/.

Die Löslichkeit tiefer Defekte verschlechtert sich mit wachsender Fehlanpassung an das Wirtsgitter. In Silizium fand man ein empirisches E_t^{-4} -Gesetz für die maximale Löslichkeit von Fremdatomen /22/. Infolge dieser Tatsache beeinflussen tiefe Niveaus die Ladungsträgerkonzentration i.a. nur unwesentlich verglichen

mit den flachen Störstellen, die Leitungstyp und -größenordnung bestimmen. Eine Ausnahme bilden III-V-Halbleiter, in denen die tiefen Niveaus von Cr oder Sauerstoff (bzw. EL2) das Fermi-niveau in die Mitte der verbotenen Zone schieben und damit semiisolierendes Verhalten erzeugen.

Die Theorie tiefer Störstellen wird erschwert durch die starke Elektron-Phonon-Wechselwirkung, die lokale Gitterverzerrung (die i. a. vom Ladungszustand des Defekts abhängen wird) und vor allem durch die Tatsache, daß die Zustände im \bar{k} -Raum ausgebreitet sind. Die Beschränkung auf ein Bandextremum bei Zugrundelegung eines abgeschirmten Coulomb-Potentials führt bereits bei flachen Störstellen zur falschen Voraussage der Bindungsenergien des 1s-bzw. 2s-Zustandes und macht komplizierte Zentralzellenkorrekturen notwendig /24, 30/. Dieses Vorgehen versagt jedoch i. a. bei tiefen Niveaus völlig /24/. Um das Energiespektrum tiefer Störstellen zu berechnen, benutzt man heute ab initio-Pseudopotential- und semiempirische (tight-binding) Methoden bzw. bestimmte Kombinationen von beiden /25-31/. Trotz enormer Fortschritte ist die Streuung der berechneten Bindungsenergien für bestimmte Defekte beträchtlich und die Genauigkeit auf einer absoluten Energieskala nicht viel besser als 0.5 eV /25/. Dessen ungeachtet kann die Theorie wertvolle Informationen über Symmetrie, chemische Trends der Niveaus, den relativen Einfluß atomarer und Wirtsgittereigenschaften u. v. a. liefern.

Ist die Lage der Energieniveaus oft die einzige experimentell zugängliche Größe, so ist sie auch Hauptgegenstand der genannten theoretischen Bemühungen. Mit dem Fortschritt in optischen und kapazitätsspektroskopischen Experimenten werden jedoch zusätzliche Defekt-Kenngrößen, wie Emissionsraten, Einfang- und Photoionisationsquerschnitte immer besser bekannt, deren Auswertung nicht ohne die Kenntnis der Störstellenwellenfunktionen möglich ist, besonders wenn zusätzliche Felder zu berücksichtigen sind.

Jaros /31/ berechnete Slater-Orbitale der Form $(1 + \gamma r)e^{-\alpha r}$ für s-artige tiefe Zustände durch Anpassung von γ, α an Pseudo-

potential-Resultate und fand für den GaAs:O - Grundzustand, daß sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung zwischen den Grenzwerten $\alpha = 0.5$, $\gamma = -0.55$ und $\alpha = 0.86$, $\gamma = -0.68$ nur unwesentlich ändert; die beste Anpassung gelang für $\alpha = 0.69$ und $\gamma = -0.56$. Durch Variation des Störstellenpotentials konnte Jaros zeigen, daß eine Änderung der Grundzustandsenergie von GaP:O von 1.15 eV auf 0.75 eV eine Verschiebung der Parameter von $\alpha = 0.83$, $\gamma = -0.68$ auf $\alpha = 0.79$, $\gamma = -0.61$ nach sich zog. Die Lokalisation änderte sich also nicht in dem Maße, wie man es für den großen Energieunterschied erwartet hatte, woraus folgt, daß eine einfache Beziehung zwischen energetischer Tiefe und Lokalisation offenbar nicht besteht. Auch die Aussage, daß eine Einbandentwicklung für die Beschreibung tiefer Niveaus völlig inadäquat ist, konnte von Jaros zumindest relativiert werden. An den oben zitierten Beispielen GaAs:O, GaP:O wurde demonstriert, daß die Beschränkung auf die beiden tiefsten Leitungsbänder zwar zu einer etwas verminderten Lokalisation führt, der globale Charakter der Wellenfunktion jedoch bewahrt wird, was die dominierende Rolle der Leitungsbänder für den Aufbau der genannten Zustände unterstreicht. Der Vergleich mit dem Quantendefekt-Modell

$$R(r) \sim r^{\alpha-1} e^{-r/r_0} \quad (2.1)$$

($r_0 = \hbar(2m^*E_t)^{-1/2}$, $\alpha^2 = R/E_t$, $R =$ effektive Rydbergenergie) /32, 33/ machte deutlich, daß die Bandmasse m^* die Lokalisation nicht richtig beschreiben kann, da ein weiter Bereich des \bar{k} -Raums für die Berechnung des Donator-Grundzustandes berücksichtigt werden muß /31/. Trotzdem kann nach Meinung von Jaros die Störstellenwellenfunktion (für tiefe Substitutionsstörstellen) in erster Näherung durch ein Produkt aus einem periodischen Anteil, der durch die Eigenschaften der dominierenden Bandzustände bestimmt wird (besonders was die Lage der Knoten betrifft), und einem scharf abklingenden Faktor beschrieben werden. In der vorliegenden Arbeit folgen wir dieser Argumentation, fassen jedoch r_0 (und damit m^*) als einen zusätzlichen Anpassparameter auf.

Klar ist, daß der ambivalente Charakter von Rekombinationszentren, die den Rekombinationsstrom ermöglichen, nicht im Rahmen einer Einbandnäherung erklärt werden kann. Wie dies jedoch schon in einem Zweibandmodell möglich ist, wurde in einer Pionierarbeit von Keldysh /34/ gezeigt. Man kann ganz allgemein die Schrödingergleichung für einen an einer Störstelle gebundenen Ladungsträger in der Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 + \frac{E}{\Delta} V_t(\vec{x}) - \frac{1}{2\Delta} V_t^2(\vec{x}) + \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{\hbar^2}{m\Delta} \nabla_{\vec{x}}^2\right)^{1/2}, V_t^t(\vec{x}) \right] - \frac{E^2 - \Delta^2}{2\Delta} \right\} \psi(\vec{x}) = 0 \quad (2.2)$$

schreiben, wenn man eine Kane-Bandstruktur /36/ der Gestalt

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \sqrt{\Delta^2 + \frac{\hbar^2 k^2 \Delta}{m}} \quad (2.3)$$

mit $1/M \equiv 1/2m_c - 1/2m_v$, $1/m \equiv 1/2m_c + 1/2m_v$, $\Delta \equiv E_g/2$

voraussetzt. ($V_t(\vec{x})$ ist das Störstellenpotential, E_g die Gapenergie, m_c und m_v die entsprechenden Bandmassen)

Aus (2.2) liest man vier Charakteristika ab:

- das Auftreten einer effektiven Energie $(E^2 - \Delta^2)/2\Delta$, die in der Umgebung der Bandkanten in die Dispersionsrelation des jeweiligen Bandes übergeht
- das Störstellenpotential $V_t(\vec{x})$ geht mit dem Faktor E/Δ ein, d. h. der Term ändert mit E das Vorzeichen; wenn er für Elektronen anziehend wirkt, wirkt er für Löcher abstoßend und umgekehrt
- das Auftreten eines in jedem Falle anziehenden Potentials $-V_t^2/2\Delta$, das für kleine Abstände dominiert und dafür sorgt, daß von ein und demselben Zentrum sowohl Elektronen als auch Löcher gebunden werden können
- der auftretende Kommutator, der eine effektive Spin-Bahn-Wechselwirkung beschreibt.

Eine genauere Analyse zeigt, daß in den Grenzfällen dominierender und verschwindender Spin-Bahn-Wechselwirkung eine Gleichung vom Typ einer Dirac-Gleichung für die mehrkomponentige

Wellenfunktion entsteht, die Energieniveaus tief im Gap zur Lösung hat.

Für den Fall verschwindender Spin-Bahn-Aufspaltung sind von Köster et al. /35/ die longitudinalen Lösungen benutzt worden, um den Interband-Tunnelstrom über tiefe Niveaus zu berechnen. Die Modifikation des WKB-Ausdrucks für die Tunnelwahrscheinlichkeit in Form einer effektiven Tunnelenergie als Konsequenz der Kane-Bandstruktur führt für Niveaus in der Mitte des Gaps zu einem Effekt von etwa 10% Energieabsenkung. Die Rechnung ist III-V-Halbleitern angepaßt, wo die kleinen Effektivmassen auch noch bei höheren Temperaturen und starker Elektron-Phonon-Kopplung dafür sorgen, daß im wesentlichen nur Zustände aus dem tiefen energetischen Ausläuferbereich beitragen und dadurch die WKB-Näherung rechtfertigen. I. a. kann die Vernachlässigung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung bei der Berechnung von Übergangsraten an tiefen Niveaus (unabhängig von der Art des Übergangs) zu völlig falschen Schlußfolgerungen führen (sh. Kap. 3 dieser Arbeit).

In welchem Maße die Stärke der Gitterkopplung mit wachsender Bindungsenergie zunimmt, zeigt Abb.1 am Beispiel des Lumineszenzspektrums verschiedener Akzeptoren in GaAs.

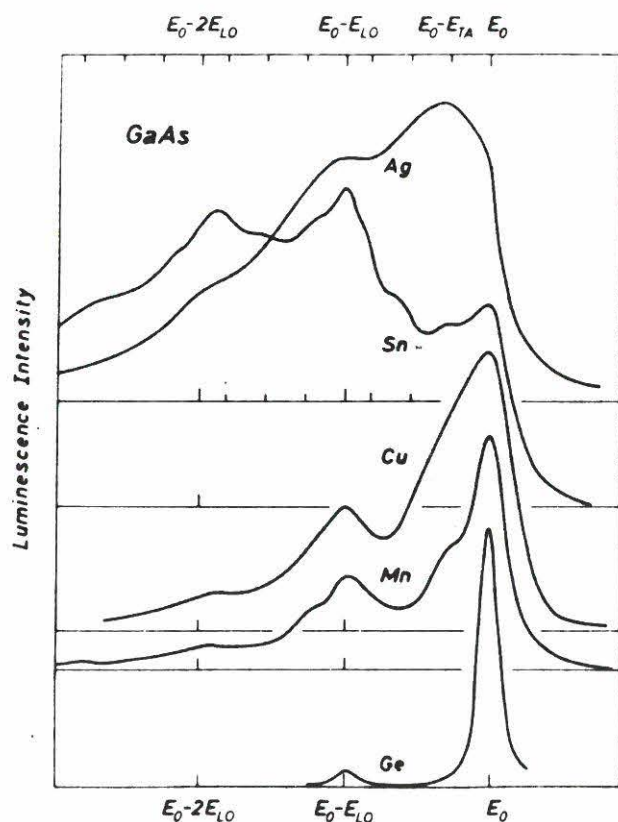


Abb.1

Lumineszenzspektrum verschiedener Akzeptoren in GaAs /22/

Die Spektren sind so verschoben, daß die Null-Phonon-Linien bei der Photonenergie E_0 zusammenfallen.

Die Traptiefe steigt von 42 meV (Ge) bis 220 meV (Ag), die Energie E_0 gibt die Lage der Null-Phonon-Rekombination an. Während beim flachsten Akzeptor Ge neben der stark ausgeprägten Null-Phonon-Linie nur ein schwacher LO-Satellit auftritt, ist die E_0 -Linie beim Ag-Zentrum kaum noch erkennbar und die Linienform völlig durch die starken Phonon-Satelliten bestimmt /22/.

Gegenstand der Untersuchung dieser Arbeit sind Generations-Rekombinationsprozesse an tiefen Störstellen im elektrischen Feld einer Raumladungsstruktur. Der Hamiltonoperator des Systems hat folglich die Gestalt

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{x}} + V_0 + V_i - eFz + H_p + H_{ep} + H_{el} \quad (2.4)$$

Dabei ist V_0 das gitterperiodische Potential, V_i das Störstellenpotential, H_p der Hamiltonian der Gitterschwingungen, H_{ep} die (lineare) Elektron-Phonon-Wechselwirkung und H_{el} die Wechselwirkung mit einem äußeren Strahlungsfeld. F ist der Betrag der Feldstärke des in z -Richtung angelegten und als homogen vorausgesetzten elektrischen Feldes. Letztere Annahme ist nicht einschneidend, da Feldstärken von 10^4 bis 10^5 Vcm $^{-1}$ einen Potentialabfall von 1 bis 1.5 V über einer Länge von 0.1 bis $1 \mu\text{m}$ bedingen, und folglich die Feldänderung über dem Störstellenradius nur etwa 1 bis 0.1 % des lokalen Wertes beträgt, wenn man als einen mittleren Lokalisationsradius 10 \AA veranschlagt.

In diesem Kapitel interessiert uns nur der elektronische Teil von (2.4), d.h. das Energiespektrum bei festem Gitter (ohne äußere Felder). Dieser Betrachtungsweise liegt eine statische Aufspaltung des Gesamt-Hamiltonians zugrunde, wie es schon durch die Formulierung (2.4) impliziert wird. Die Eigenzustände Ψ des entsprechenden Hamiltonians

$$H_e = H_0 + V_i - eFz \quad (2.5)$$

werden nach Blochfunktionen $\psi_{\vec{k}}$, den Eigenlösungen von H_0 , entwickelt:

$$\Psi_E = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\bar{k}\nu} \gamma_{\bar{k}\nu} \phi_E^\nu(\bar{k}) . \quad (2.6)$$

Wendet man (2.5) auf (2.6) an, resultieren die Gleichungen

$$\left[E_\nu(\bar{k}) - E \right] \phi_E^\nu(\bar{k}) + \sum_{\bar{k}'\nu'} \left[V_i^{\nu\nu'} - eFz^{\nu\nu'} \right] \phi_E^{\nu'}(\bar{k}') = 0 \quad (2.7)$$

für die Einhüllenden $\phi_E^\nu(\bar{k})$. $V_i^{\nu\nu'}$ und $z^{\nu\nu'}$ sind die entsprechenden Matrixelemente des Störstellenpotentials und der z-Komponente des Ortsoperators mit Blochfunktionen. Ersetzt man in (2.7) das Defektpotential durch eine platzdiagonale, deltaförmige Störung /37/, dann wird wegen $V_i^{\nu\nu'} = \text{const} \cdot \delta_{\nu\nu'}$ im feldfreien Fall

$$\phi_E^\nu(\bar{k}) = \frac{\text{const}}{E_\nu(\bar{k}) - E} . \quad (2.8)$$

Die so erzeugte Inhomogenität der Gleichung (2.7) legt den Schluß nahe, daß im für die Rekombination relevanten Energiebereich $E \in [-\mathcal{S} - E_g, \mathcal{S}]$ nur die untersten Leitungs- und obersten Valenzbänder zum Aufbau der Einhüllenden beitragen.

Keldysh /34/ hat gezeigt, daß Kriterium für die Richtigkeit dieser Behauptung die Kleinheit des Parameters $\lambda = (\Delta/W)^{1/2}$ ist ($\Delta = E_g/2$, $W =$ Bandweite). Die im Bandindex nichtdiagonalen Elemente $V_i^{\nu\nu'}$ beschreiben die Kopplung der Bänder durch das Störstellenpotential und spielen für Störstellen, die nicht eindeutig einem bestimmten Band zugeordnet werden können, eine entscheidende Rolle /34/.

Wenn im weiteren trotzdem nur eine Einbandentwicklung verwendet wird, dann aus folgenden Gründen:

- Es gibt Störstellen, für die dies eine akzeptable erste Näherung ist /31/.
- Will man den Einfluß eines starken Feldes auf die Störstellenzustände analytisch berechnen, ist die Einbandnäherung unabdingbar.
- Die bei der Untersuchung des Feldeffektes auf thermische Emissionsraten auftretenden maximalen Feldstärken bewirken Wechselwirkungsenergien, die immer noch sehr viel kleiner als

die Bindungsenergien sind. Folglich sind diese Methoden störstelleninsensitiv. (DLTS kann über die Struktur der Störstellen keine Aussagen machen)

Modifikationen, die durch die genaue Gestalt der Störstellenwellenfunktionen ins Spiel kommen, können somit als Effekt höherer Ordnung angesehen werden. Diese Aussage gilt um so eher, je lokalisierter die Defektzustände sind.

Für den Operator $-eFz$ bedeutet die Einbandnäherung, daß ausschließlich Rekombination über tiefe Niveaus und keine direkte Interband-Rekombination betrachtet wird. Damit befindet man sich automatisch im Rahmen der Houston-Näherung /41/, die die durch das elektrische Feld induzierte Kopplung der Bänder vernachlässigt.

Zur weiteren Explizierung der Gleichung (2.7) benötigt man Modelle für $V_i(x)$ und $E_v(k)$. Die Bandstruktur wird vorerst durch ein simples parabolisches, isotropes Zweibandmodell beschrieben:

$$E_c(\bar{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad , \quad E_v(k) = -E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \quad . \quad (2.9)$$

Die Leitungsbandkante definiert den Energienullpunkt. Das Störstellenpotential wird durch

$$V_i(\bar{x}) = V_t(\bar{x}) + V_c(\bar{x}) = V_0 \delta(\bar{x}) \left[1 + \bar{x} \nabla_{\bar{x}} \right] - \frac{e^2 z}{\epsilon_s |\bar{x}|} \quad (2.10)$$

definiert, wodurch sowohl der stark lokalisierende Zentralzellen-Anteil durch das Pseudo- δ -Potential $V_t(\bar{x})$ /43/ als auch verschiedene Ladungszustände durch den Coulomb-Anteil $V_c(\bar{x})$ berücksichtigt werden. Die in (2.1) angeführten Quantendefektzustände sind gerade die feldfreien asymptotischen Lösungen (für große Abstände) dieses Modells. Eine ausführlichere Diskussion erfolgt im nächsten Abschnitt.

Das Matrixelement $V_i^{\bar{y}\bar{y}'\bar{k}\bar{k}'}$ kann nun mittels Koster-Slater-Approximation für den Zentralzellen-Anteil /37, 38/ und gewöhnlicher EMT für den abgeschirmten, langreichweitigen Coulomb-Anteil genähert werden:

$$V_i^{\nu\nu} \approx \tilde{V}_0^\nu + V_c(\bar{k} - \bar{k}') \quad (2.11)$$

Bezeichnet man mit $u_{\nu\bar{k}}(\bar{x})$ die Blochfaktoren, dann hat das Matrixelement $Z_{\bar{k}\bar{k}'}$ die Gestalt

$$Z_{\bar{k}\bar{k}'}^{\nu\nu} = -i \left[\frac{\partial}{\partial k_z} + \left(\frac{\partial}{\partial k_z} u_{\nu\bar{k}} | u_{\nu\bar{k}'} \right) \right] \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \quad (2.12)$$

Der zweite Summand ist das sog. Adamssche Matrixelement /39/, das bei Verwendung von Houston-Funktionen gemäß ihrer Definition vernachlässigt werden muß. Man kann es sich jedoch auch in die Definition der Bandenergie $E_\nu(\bar{k})$ einbezogen denken /40/. Transformiert man nun nach den gemachten Näherungen das Gleichungssystem (2.7) in den Ortsraum zurück, so erhält man mit

$$\left\{ E_\nu(-i\bar{\nabla}_{\bar{x}}) - E - eFz + \tilde{V}_0^\nu \delta(\bar{x}) \left[1 + \bar{x} \bar{\nabla}_{\bar{x}} \right] - \frac{e^2 Z}{\epsilon_s |\bar{x}|} \right\} \phi_E^\nu(\bar{x}) = 0 \quad (2.13)$$

eine Wannier-Gleichung zur Bestimmung der gesuchten Einhüllenden. Da $\phi_E^\nu(\bar{x})$ keine glatte Funktion ist, ist es jedoch im Gegensatz zur EMT unzulässig, $E_\nu(\bar{k})$ durch seine Entwicklung an einem kritischen Punkt zu ersetzen. Dann wäre nämlich (setzt man einmal $F=0$ und $Z=0$) der Lokalisationsradius r_0 in der Lösung $\exp(-r/r_0)/r$ von (2.13) durch die effektive-Masse m_ν festgelegt. Wir wollen mit μ_ν eine mittlere effektive Masse einführen, die den Teil des \bar{k} -Raumes erfaßt, der wesentlich zum Aufbau des tiefen Zustandes beiträgt und die über die Relation

$$E_B^0 = \frac{\hbar^2}{2\mu_\nu} \frac{1}{r_0^2} \quad (2.14)$$

den richtigen (d.h. aus dem Experiment zu entnehmenden) Lokalisationsradius r_0 liefert. Phänomenologisch werden damit auch Beiträge der anderen Bänder erfaßt. Mit E_B^0 wird im folgenden der Betrag der (feldfreien) Grundzustandsenergie bezeichnet, der über den Koster-Slater-Parameter \tilde{V}_0^ν gemäß

$E_B^0 = (4\pi)^2 \tilde{V}_0^{-2} (\hbar^2/2\mu)^3$ angepaßt und von der jeweiligen Bandkante aus gezählt wird.

Für die ausgebreiteten Zustände spielt der Zentralzellenanteil in (2.13) keine Rolle. Er verursacht nur eine Streuung der s-Zustände des Kontinuums. Ausdruck dafür ist ein zusätzlicher Term in der Lösung infolge des δ -Potentials, der jedoch z. B. zum (feldfreien) optischen Matricelement nicht beiträgt /42, 48/ und i. a. nur ein vernachlässigbares Korrekturglied zur Übergangsrate bewirkt.

Wir nehmen also an, daß der Ladungsträger im Kontinuum den Defekt nur als eine punktförmige Ladungsquelle (mit der Rumpfladung Z) spürt und sich mit der effektiven Masse m_v bewegt. In dieser Arbeit wird stets von Übergängen ins Leitungsband ausgegangen; Löcherübergänge ins Valenzband können, solange die Entartung der Valenzbänder unberücksichtigt bleibt, völlig analog behandelt werden. Folglich bestimmen sich die Endzustände beim optischen bzw. thermischen Emissionsprozeß, wenn das Zentralzellen-Potential gleich vernachlässigt wird, gemäß

$$\left[E_c(-i\tilde{V}_{\vec{x}}) - E - eFz - \frac{e^2 Z}{\epsilon_s |\vec{x}|} \right] \phi_E^c(\vec{x}) = 0 \quad (2.15)$$

In den effektiven Schrödingergleichungen (2.13) und (2.15) müssen die Vorzeichen der Potentialstärke \tilde{V}_0 und der Ladungszahl Z der jeweiligen Situation entsprechend gewählt werden, z.B. sind die Potentiale für Elektronen anziehend, wenn $\tilde{V}_0 > 0$ und $Z > 0$ gilt. Der Fall $Z \neq 0$ wird im 5. Kapitel diskutiert, in den Kapiteln 3 und 4 wird $Z = 0$ vorausgesetzt.

Für die weitere Rechnung erweist es sich als günstig, den Operator H_e in der Form der 2. Quantisierung aufzuschreiben /44/. Definiert man als Elektronenfeldoperator

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_0^{\infty} d\kappa \sum_m \Psi_{E\kappa m}^c(\vec{x}) a_{E\kappa m}^c + \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_{E00}^t a_{E00}^t, \quad (2.16)$$

wobei die Ψ^c die stationären Zustände gemäß (2.6) und (2.15) sind und Ψ_{E00}^t der feldverbreiterte "Grundzustand" ist, der entsprechend (2.6) und (2.13) entweder leitungsband-korreliert ($t \equiv c$) oder valenzband-korreliert ($t \equiv v$) sein kann, so er-

hält man

$$\begin{aligned}
 H_e^{2\text{-Qu.}} = & \int dE E \int d\mathfrak{x} \sum_m a_{E\mathfrak{x}m}^{+c} a_{E\mathfrak{x}m}^c + \int_{-\infty}^{\infty} dE E a_{E00}^{+t} a_{E00}^t \\
 - eF \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' \int_0^{\infty} d\mathfrak{x} \sum_m & \left\{ T_{E\mathfrak{x}m, E00}^{ct} a_{E\mathfrak{x}m}^{+c} a_{E00}^t + \text{adj.} \right\}. \quad (2.17)
 \end{aligned}$$

Die künstliche Aufspaltung der Zustände in Anfangs- und Endzustände in der Form (2.16) hat ihren Hintergrund in den vollzogenen Näherungen, d. h. in der Unmöglichkeit, beide Sorten von Zuständen mit ein und derselben Schrödingergleichung analytisch zu behandeln. Der Vorteil zeigt sich später in der Separierbarkeit der Zustandsdichten. Das in (2.17) auftretende Matrixelement T^{ct} hat unterschiedliche Gestalt, je nachdem ob die Störstellenzustände vom Leitungs- oder Valenzband herrühren:

$$T_{E\mathfrak{x}m, E00}^{ct} = \begin{cases} - I_{E\mathfrak{x}m, E00}^{cc}(1) & (2.18a) \\ z_{cv} I_{E\mathfrak{x}m, E00}^{cv}(0) & (2.18b) \end{cases}$$

Die Größe $I^{cv}(n)$ ist dabei das Matrixelement der Einhüllenden ϕ für dipolerlaubte ($n = 0$) und -verbotene Übergänge ($n = 1$):

$$I_{\alpha\beta}^{vv'}(n) = \int d^3\bar{x} z^n \phi_{\alpha}^{v*}(\bar{x}) \phi_{\beta}^{v'}(\bar{x}) \quad . \quad (2.19)$$

(2.18) enthält noch eine Näherung, die über das Bisherige hinausgeht. Das Blochsche Matrixelement $z_{cv}(\bar{k}) = -i(\partial/\partial k_z u_{c\bar{k}} | u_{v\bar{k}})$ wurde durch eine Konstante z_{cv} ersetzt. Dies bedeutet, daß nur Zustände mit $\bar{k} \approx \bar{0}$ Berücksichtigung finden - eine Näherung der Optik, die hier jedoch letztlich bewirkt, daß die Defektzustände die Form einfacher Produkte aus einer lokalisierten Funktion (2.1) und einem Blochfaktor $u_{v0}(\bar{x})$ annehmen.

2.2. Modellpotential zur Beschreibung tiefer Störstellen

2.2.1. Diskussion der Eigenschaften des Modellpotentials

Der Anteil $V_t(\bar{x})$ des in (2.10) definierten Potentialmodells wurde in dieser Form von Vinogradov /43/ in die Halbleiterphysik eingeführt. Die Modifikation gegenüber dem breit angewandten, älteren δ -Potential Lucovskys /45/, besteht in einem zusätzlichen Operator $\hat{f}(\bar{x}) = [1 + \bar{x} \nabla_{\bar{x}}]$, der den singulären Teil der Lösung $\varphi(r) = C \exp(-r/r_0)/r$ beseitigt; d.h. es ist

$$\hat{f}(r) \varphi(r) = -C \exp(-r/r_0)/r_0. \quad (2.20)$$

(2.20) zeigt auch, daß $\hat{f}(\bar{x})$ einen Vorzeichenwechsel bewirkt und demnach das Potential mit positivem V_0 anziehend ist.

Das Lucovsky-Modell, das bereits bei der Erklärung der Gamma-Dissoziation des Deuterons erfolgreich benutzt wurde /46/, ergab im Falle optischer Streuquerschnitte tiefer Störstellen eine hervorragende Übereinstimmung mit dem Experiment, wie in Abb.2 anhand verschiedener Akzeptoren in GaAs dargestellt ist /22/. Dem dipolverbotenen Übergang liegt die Formel /45/

$$\sigma_{\text{opt.}}(\omega) = \sigma^0 \frac{E_B^{1/2} (\hbar\omega - E_B^0)^{3/2}}{\omega^3} \quad (2.21)$$

zugrunde, die bei wurzelförmiger Kontinuumszustandsdichte die

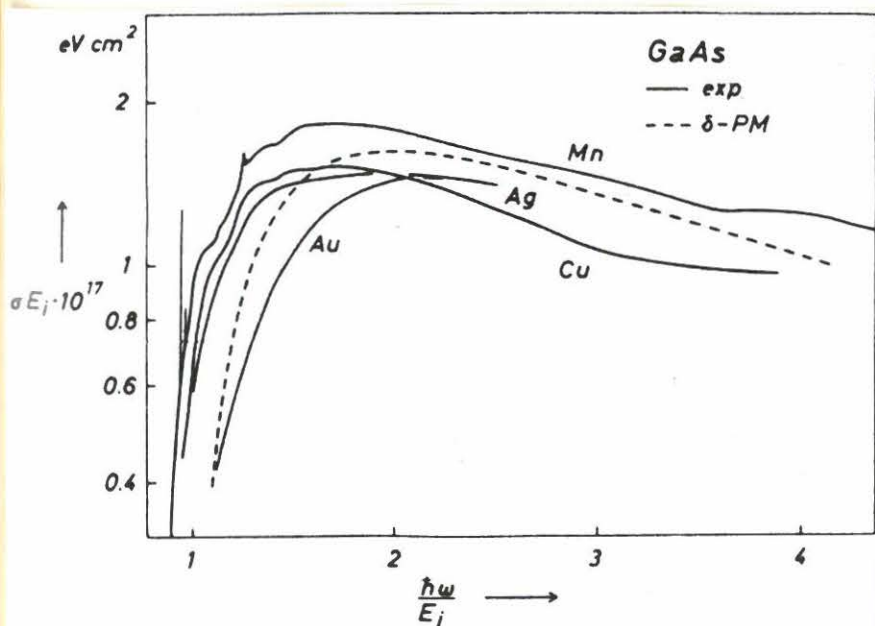


Abb.2

Infrarot-Absorptionspektrum verschiedener Akzeptoren in GaAs, mit der Ionisierungsenergie E_i ($\equiv E_B^0$) normiert.

Die gestrichelte Kurve stellt das theoretische Resultat nach dem Lucovsky-Modell dar. Abb. aus /22/.

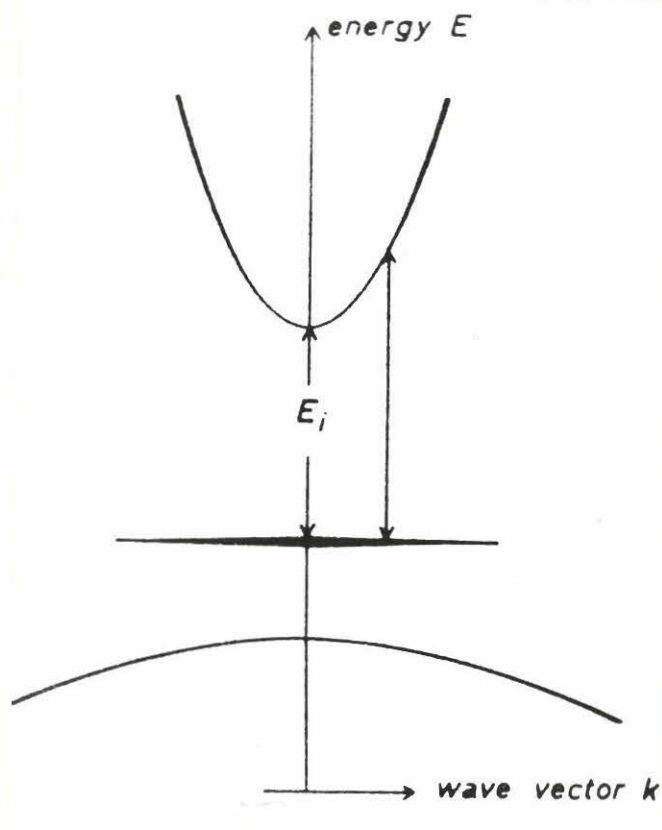


Abb.3

Schematische Darstellung des optischen Übergangs aus einem tiefen Niveau ins Leitungsband.

Die Linienstärke deutet die Zustandsdichte bzw. die Ausbreitung des tiefen Zustandes im \vec{k} -Raum an, die das Absorptionsmaximum in der Nähe von $\hbar\omega = 2E_i$ ($\equiv 2E_B^0$) bewirken.

Abb. aus /22/.

Frequenzabhängigkeit des optischen Streuquerschnitts (in 1. Ordnung der Störungstheorie) beschreibt und das Maximum von $\sigma_{\text{opt.}}(\omega)$ an der Stelle $\hbar\omega = 2E_B^0$ voraussagt, was für viele Defekte näherungsweise erfüllt ist. Eine qualitative Erklärung dieser Tatsache ergibt sich sofort, wenn man bedenkt, daß

$\sigma_{\text{opt.}}(\omega)$ im wesentlichen durch das Produkt aus Bandzustandsdichte $\rho_c(E) \sim \sqrt{E - E_c}$ und Störstellenzustandsdichte $\rho_t(E)$ gegeben ist, die durch die Dicke der Linien in Abb.3 veranschaulicht sind. Das Maximum dieses Produkts liegt in der Nähe von $2E_B^0$.

Der Formel (2.21) liegt allerdings die Voraussetzung zugrunde, daß man zur Beschreibung der Lokalisation des donatorartigen Zustandes die Bandmasse m_c benutzen darf. Geht man stattdessen von der Relation (2.14) aus, so ergibt sich mit

$$\sigma_{\text{opt.}}(\omega) = \sigma^0 \frac{E_B^0{}^{1/2} (\hbar\omega - E_B^0)^{3/2}}{\omega [E_B^0 - m_c/\mu_c (E_B^0 - \hbar\omega)]^2} \quad (2.22)$$

ein Ausdruck, der für $\mu_c = m_c$ in (2.21) übergeht. Im Fall

starker Lokalisation ($m_c < \mu_c$) verschiebt sich jedoch das Maximum des Streuquerschnitts in Richtung größerer Energie, so daß $\hbar\omega(\sigma_{\max}) > 2E_B^0$; im Fall schwacher Lokalisation ($m_c > \mu_c$) gilt das Umgekehrte. In Abb. 4 ist der Streuquerschnitt entsprechend (2.22) für verschiedene Werte $\gamma = m_c/\mu_c$ dargestellt.

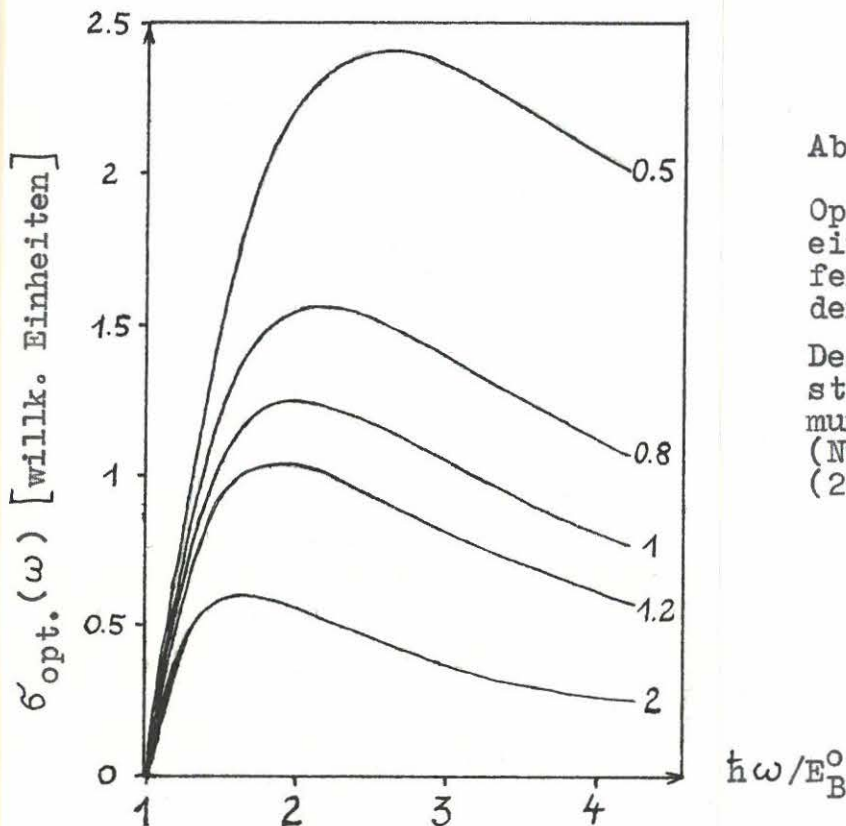


Abb.4

Optischer Streuquerschnitt eines donatorartigen tiefen Zentrums für verschiedene Werte $\gamma = m_c/\mu_c$.

Der Lokalisationsgrad bestimmt die Lage des Maximums.

(Numer. Auswertung von (2.22))

Die Verschiebung des Maximums von $\sigma_{\text{opt.}}(\omega)$ in Richtung kleinerer Photonenenergien entspricht den experimentellen Beobachtungen /45, 22/ und ist z. B. von Chantre et al. /49/ diskutiert worden. Da die Linienform empfindlich von γ (und damit vom Lokalisationsradius) abhängt, bietet die Messung von $\sigma_{\text{opt.}}$ über einem breiten Energiebereich die Möglichkeit, die beiden Modellparameter E_B^0 und r_0 anzupassen und Aussagen über den globalen Verlauf der Wellenfunktion zu machen. Allerdings hängt die Linienform von $\sigma_{\text{opt.}}(\omega)$ auch entscheidend von der korrekten Verarbeitung der Bandstruktur /47/ und vom Ladungszustand der Störstelle ab, was Rechnungen von Yartsev /48/ für repulsive Defekte belegen.

Im folgenden seien kurz Energiespektrum und Wellenfunktionen diskutiert, wie sie sich aus dem Potentialmodell (2.10) bei Abwesenheit eines Feldes und ohne Elektron-Phonon-Wechselwirkung ergeben. Da (2.10) eine δ -Funktion enthält, müssen die Lösungen proportional zur Greenschen Funktion $G_E(\bar{x})$ für das Wasserstoffproblem sein. Betrachtet man als Beispiel eine donatorartige Störstelle mit $Z > 0$, so hat die Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_c} \Delta - E - \frac{e^2 Z}{\epsilon_s |\bar{x}|} \right\} G_E(\bar{x}) = \delta(\bar{x}) \quad (2.23)$$

die Lösung (nur die Radialanteile müssen berücksichtigt werden)

$$G_E(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \frac{R_{no}(r) R_{no}(0)}{E - E_n} + \frac{\alpha_c^2}{4\pi r} \Gamma(1+i\nu_c) W_{-i\nu_c, 1/2}(2ik_c r). \quad (2.24)$$

In (2.24) ist E_n das wasserstoffähnliche Energiespektrum (R_Z - effektive Rydbergenergie)

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu_c}{2\hbar^2 \epsilon_s^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_Z}{n^2}, \quad (2.24a)$$

$R_{no}(r)$ sind die s-Orbitale

$$R_{no}(r) = 2(\alpha_c \sqrt{R_Z})^{3/2} F(1-n, 2, \frac{r\lambda_c}{n}) e^{-r\lambda_c/2n} \quad (2.24b)$$

und $W_{\nu, 1/2}(\rho)$ ist die Witthakersche Funktion /50/. Die restlichen Abkürzungen sind definiert durch $\alpha_c^2 \equiv 2\mu_c/\hbar^2$; $k_c \equiv \alpha_c \sqrt{E}$; $\nu_c \equiv \alpha_c Z e^2 / (\sqrt{E} 2\epsilon_s)$; $\lambda_c \equiv k_c \nu_c / 2$.

Das Zentralzellenpotential bewirkt eine Verschiebung und Verbreiterung der s-Zustände des wasserstoffähnlichen Energiespektrums /42/. Die Lage dieser Resonanzen wird durch die Bedingung

$$1 - \tilde{V}_0^c \operatorname{Re} (1 + r \partial/\partial r) G_E(r) \Big|_{r=0} = 0 \quad (2.25)$$

bestimmt, die nach Ausführung der Operationen auf die Gleichung

$$\frac{1}{\tilde{V}_0^c} = -\frac{\alpha_c^3}{\pi} \sqrt{R_Z} \sum_n \frac{1}{n} \frac{R_Z/|E|}{n^2 - R_Z/|E|} + \frac{\alpha_c^3}{4\pi} \sqrt{|E|} \quad (2.26)$$

führt ($E < 0$). Die neuen Energieniveaus ergeben sich aus den Schnittpunkten von $1/\tilde{V}_0^c$ mit der Funktion $g(E)$ auf der rechten Seite von (2.26), die in Abb. 5 dargestellt ist. Man erkennt, daß das 1s-Niveau auf die Grundzustandsenergie $-E_B^0$ herabgezogen wird und die angeregten s-Niveaus ebenfalls mitrutschen.

Den Zusammenhang $\tilde{V}_0^c(E_B^0)$ kann man näherungsweise analytisch angeben, wenn die Bedingung $R_Z/|E| \ll 1$ in der Umgebung $E \approx -E_B^0$ er-

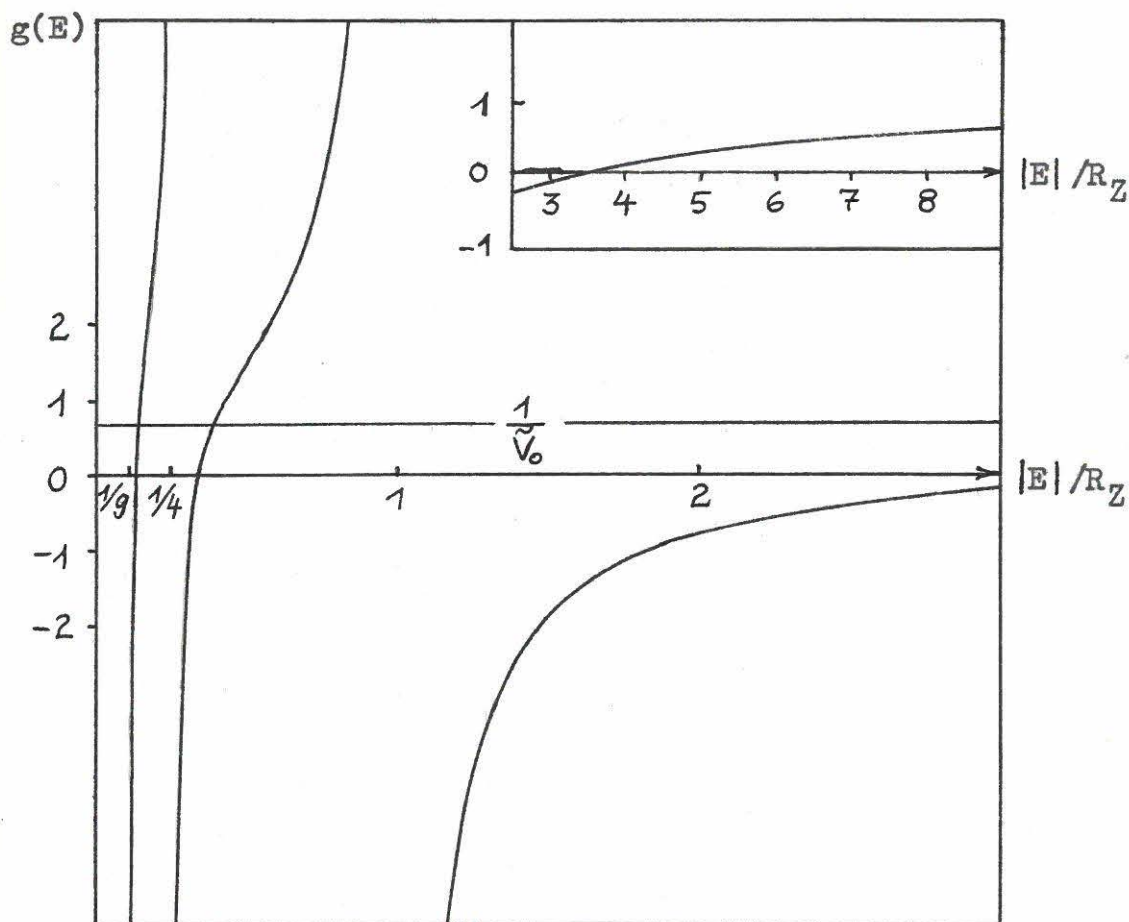


Abb. 5

Darstellung von $g(E)$ (rechte Seite von (2.26)), deren Schnittpunkte mit der Geraden $1/\tilde{V}_0^c$ die Bindungsenergien der gebundenen Zustände bestimmen.

füllt ist. Dann gewährleistet

$$\tilde{V}_0^c \approx \frac{4\pi E_B^0{}^{5/2} r_0^3}{E_B^0{}^{3/2} - 4 \zeta(3) R_Z^{3/2}}, \quad (2.27)$$

daß das tiefste gebundene Niveau (näherungsweise) den vom Experiment vorgegebenen Wert $-E_B^0$ annimmt. In (2.27) ist $\zeta(x)$ die Riemannsche Zeta-Funktion /50/.

Schaltet man den langreichweitigen Coulomb-Anteil ab, so definiert $\tilde{V}_0^c = 4\pi E_B^0 r_0^3$ den einzigen gebundenen Zustand. Das Potentialmodell bietet somit die Möglichkeit, die Ladungsaufspaltung der Grundzustandsenergie qualitativ zu diskutieren. Dazu wird der Zentralzellenanteil \tilde{V}_0^c fixiert und Z geändert; z. B. von Eins auf Null. Es ergibt sich näherungsweise der Energieunterschied

$$\Delta E \approx 8 \zeta(3) R_1 \sqrt{\frac{R_1}{E_B^0}} \approx 10 R_1 \sqrt{\frac{R_1}{E_B^0}}, \quad (2.28)$$

wobei E_B^0 die Bindungsenergie für $Z = 0$ ist. Eine Abschätzung mit $R_1 = 0.05$ eV, $E_B^0 = 0.5$ eV ergibt $\Delta E \approx 0.16$ eV. Im Prinzip steht mit der Abschirmfunktion ϵ_s noch ein dritter Parameter zur Verfügung, der, wenn er nicht als die statische Dielektrizitätskonstante des Materials verwendet wird, zur Anpassung an experimentell beobachtete Ladungsaufspaltungen herangezogen werden könnte.

Als Lösung der Schrödingergleichung für den tiefsten gebundenen Zustand erhält man

$$\phi_{100}(r) = A(r_0/r_Z) \frac{1}{4\pi r} \Gamma(1 - r_0/r_Z) W_{r_0/r_Z, 1/2}(2r/r_0). \quad (2.29)$$

Die Normierungskonstante $A(r_0/r_Z)$ hängt in komplizierter Weise vom Verhältnis des in (2.14) definierten Lokalisationsradius r_0 zum effektiven Bohrschen Radius r_Z ab und realisiert die Grenzfälle $Z \rightarrow 0$ und $\tilde{V}_0^c \rightarrow 0$ gemäß

$$\lim_{r_Z \rightarrow \infty} A\left(\frac{r_0}{r_Z}\right) = (8\pi/r_0)^{1/2}; \quad \lim_{r_0 \rightarrow r_Z} A\left(\frac{r_0}{r_Z}\right) = \frac{2}{\Gamma(0^+)} (\pi/r_Z)^{1/2}. \quad (2.30)$$

Mit Hilfe der asymptotischen Näherung für große r /50/

$$\phi_{100}(r) \rightarrow \frac{A}{4\pi} \left(\frac{2}{r_0}\right)^{r_0/r_Z} \Gamma\left(1 - \frac{r_0}{r_Z}\right) r^{r_0/r_Z - 1} e^{-r/r_0} \quad (2.31)$$

erkennt man, daß die Wellenfunktion asymptotisch in das Quantendefektmodell /33/ übergeht und der "Quantendefekt" gerade der Parameter r_0/r_Z ist. Der Unterschied zwischen (2.29) und (2.31) macht sich in der Nähe des Zentrums bemerkbar, wo $r \phi(r)$ im Falle des Quantendefekt-Zustandes verschwindet, im Falle der exakten Lösung jedoch gegen die Konstante $A/4\pi$ strebt. Man kann (2.29) also als ein durch die Coulomb-Wechselwirkung modifiziertes tiefes Niveau, (2.31) dagegen als eine stärker lokalisierte Wasserstoff-Wellenfunktion ansehen.

Für repulsives Coulomb-Potential erhält man den Grundzustand aus (2.29) durch die Transformation $r_Z \rightarrow -r_Z$. Die Normierungskonstante $A(r_0/r_Z)$ kann, wenn die Voraussetzung $r_0/r_Z \ll 1$ erfüllt ist, näherungsweise durch die Relation

$$A^2(r_0/r_Z) \approx \frac{8\pi/r_0}{1 + 2r_0/r_Z} \quad (2.32)$$

angegeben werden. (2.32) ist dann konsistent mit (2.27).

Das in (2.10) definierte Potentialmodell stellt aufgrund seiner Einfachheit eine praktikable Basis zur Beschreibung der Feld- und Temperaturabhängigkeit von Übergangsraten an tiefen Störstellen dar. Es enthält drei Parameter: Bindungsenergie, Lokalisationsradius (bzw. "effektive Masse" des gebundenen Teilchens) und Abschirmkonstante (bzw. effektive Ladungszahl). Ist $Z = 0$, wird im folgenden vom "neutralen Modell" gesprochen.

2.2.2. Folgerungen für die totale elektronische Übergangsrate

Um allgemeine Schlußfolgerungen für die totale elektronische Übergangsrate zu ziehen, betrachten wir die Schrödingergleichungen zur Bestimmung von Anfangs- und Endzuständen (vgl. (2.13) und (2.15))

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \varepsilon + U(\bar{x}) + \tilde{V}_0 \delta(\bar{x}) [1 + \bar{x}\bar{v}] \right\} \phi_{\varepsilon}^t(\bar{x}) = 0 \quad (2.33a)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_c}\Delta - E + U(\bar{x}) \right\} \phi_E^c(\bar{x}) = 0 \quad (2.33b)$$

$$\text{mit} \quad U(\bar{x}) = -eFz - e^2 Z / (\varepsilon_s |\bar{x}|) \quad (2.33c)$$

zuerst für den Spezialfall $U(\bar{x}) = 0$, d. h. für den feldfreien, neutralen Fall. In (2.33) gilt $\mu = \mu_c$ und $\varepsilon = E$ für die vom Leitungsband herrührende Störstelle, $\mu = -\mu_v$ und $\varepsilon = E + E_g \equiv \tilde{E}$ für die vom Valenzband herrührende Störstelle. Gleichung (2.33a) kann aufgrund der δ -Funktion auch in der Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \varepsilon \right\} \phi_{\varepsilon}^t(\bar{x}) = a \delta(\bar{x}) \quad (2.34)$$

mit $a = \tilde{V}_0 [(1 + \bar{x}\bar{v}) \phi_{\varepsilon}^t(\bar{x})]_{\bar{x}=0} \equiv \tilde{V}_0 (\rho_t(\varepsilon))^{1/2}$ geschrieben werden, und $\phi_{\varepsilon}^t(\bar{x})$ ist deshalb offenbar proportional zur Green'schen Funktion $G_{\varepsilon}^-(\bar{x})$ des Operators $-\hbar^2\Delta/2\mu$

$$G_{\varepsilon}^-(\bar{x}) = \int d\varepsilon' \sum_{\lambda} \frac{\varphi_{\varepsilon'\lambda}(\bar{x}) \varphi_{\varepsilon'\lambda}^*(0)}{\varepsilon' - \varepsilon - i\delta} \quad (2.35)$$

In (2.35) sind die $\varphi_{\varepsilon'\lambda}(\bar{x})$ Lösungen von

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \varepsilon \right\} \varphi_{\varepsilon\lambda}(\bar{x}) = 0 \quad (2.36)$$

Durch Vergleich von (2.36) mit (2.33b) ($U(\bar{x}) = 0$) erkennt man den Zusammenhang

$$\varphi_{\varepsilon}(\bar{x}) = \sqrt{\mu/m_c} \phi_{\varepsilon \frac{\mu}{m_c}}^c(\bar{x}), \quad (2.37)$$

der es gestattet, die Greensche Funktion $G_{\varepsilon}^{\bar{c}}(\bar{x})$ und damit den Ausgangszustand $\phi_{\varepsilon}^{\bar{t}}(\bar{x})$ durch die Endzustände $\phi_{\varepsilon}^{\bar{c}}(\bar{x})$ auszudrücken:

$$\phi_{\varepsilon}^{\bar{t}}(\bar{x}) = a \int d\varepsilon' \sum_{\lambda} \frac{\phi_{\varepsilon'\lambda}^{\bar{c}}(\bar{x}) \phi_{\varepsilon'\lambda}^{*\bar{c}}(0)}{\varepsilon' \frac{m_c}{\mu} - \varepsilon - i\delta} . \quad (2.38)$$

Der Sinn dieser Umformungen wird deutlich, wenn man (2.38) in den Ausdruck für die totale elektronische Übergangsrate $D(\varepsilon, \varepsilon')$

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \sum_{\lambda} |(\phi_{\varepsilon}^{\bar{t}} | \phi_{\varepsilon'\lambda}^{\bar{c}})|^2$$

für Übergänge aus dem Grundzustand ε in alle ausgebreiteten Zustände der Energie ε' einsetzt, die als Träger der Information über das elektronische Energiespektrum eine wesentliche Größe der Theorie ist. Unter Ausnutzung der Orthogonalitätseigenschaften für die Funktionen $\phi_{\varepsilon}^{\bar{c}}(\bar{x})$ erhält man nach kurzer Rechnung

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{|a|^2}{[\varepsilon' \frac{m_c}{\mu} - \varepsilon]^2} \sum_{\lambda} |\phi_{\varepsilon'\lambda}^{\bar{c}}(0)|^2 . \quad (2.39)$$

Folglich faktorisiert $D(\varepsilon, \varepsilon')$ in der Form

$$D(E, E') = \tilde{v}_0^2 \frac{\varrho_t(E) \varrho_c(E')}{[E' \frac{m_c}{\mu} - E]^2} \quad (2.40a)$$

$$D(E, E') = \tilde{v}_0^2 \frac{\varrho_t(\tilde{E}) \varrho_c(E')}{[E' \frac{m_c}{\mu_v} + \tilde{E}]^2} \quad (2.40b)$$

mit den lokalen Zustandsdichten (im Ursprung) $\varrho_t(\varepsilon)$ und $\varrho_c(\varepsilon')$. Die Ausdrücke (2.40) für leitungsband- (a) und valenzband-korrelierte (b) Störstellen sind exakt, wenn (2.33) mit $U(\bar{x}) = 0$ vorausgesetzt wird, und lediglich eine Konsequenz des Lucovsky-Modells. Läßt man nun die Voraussetzung $U(\bar{x}) = 0$ fallen, kann die Ableitung analog erfolgen, statt der simplen Relation (2.37) muß man jedoch jetzt die Entwicklung

$$\varphi_{\varepsilon\lambda}(\bar{x}) = \int d\varepsilon' \sum_{\lambda'} c_{\varepsilon\lambda}(\varepsilon', \lambda') \phi_{\varepsilon'\lambda'}^{\bar{c}}(\bar{x}) \quad (2.41)$$

ansetzen. Die Koeffizienten $C_{\epsilon\lambda}$ hängen vom Potential $U(\bar{x})$ und dem Parameter m_c/μ ab. Man hat sie mit Hilfe von ϕ_ϵ^0 und φ_ϵ im konkreten Fall gemäß

$$C_{\epsilon\lambda}(\epsilon', \lambda') = (\phi_{\epsilon'\lambda'} | \varphi_{\epsilon\lambda}) \quad (2.42)$$

zu berechnen. Die Übergangsrate

$$D(\epsilon, \epsilon') = |a|^2 \sum_{\lambda} \left| \int d\epsilon'' \sum_{\lambda'} \frac{1}{\epsilon'' - \epsilon - i\delta} \varphi_{\epsilon''\lambda'}^*(0) C_{\epsilon''\lambda'}(\epsilon', \lambda) \right|^2 \quad (2.43)$$

kann jetzt i. a. nicht mehr exakt faktorisiert werden, außer für einen donatorartigen Defekt mit $\mu_c \equiv m_c$. Für diesen speziellen Fall ist $C_{\epsilon\lambda}(\epsilon', \lambda') = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{\lambda\lambda'}$, da die Schrödingergleichung für φ_ϵ und ϕ_ϵ übereinstimmen.

Im neutralen Modell, d. h. wenn $Z = 0$ und dementsprechend $U(\bar{x}) = -eFz$ gilt, ist der Koeffizient $C_{\epsilon\lambda}(\epsilon', \lambda')$ gleich einem Integral zwischen verschobenen Airy-Funktionen unterschiedlicher Oszillationsweite und strebt für $F \rightarrow 0$ wieder gegen eine δ -Funktion der Energie. In (2.43) ist daher die Integration über ϵ'' i. a. nur noch näherungsweise ausführbar. Die konkrete Rechnung in Anlage 1 zeigt die Voraussetzungen, unter denen die elektronische Übergangsrate auch im (für Kapitel 3 benötigten) Fall $U(\bar{x}) = -eFz$ in der Form (2.40) mit abgespaltenem Energienenner geschrieben werden kann und wann modifizierte analytische Ausdrücke entstehen. Das Ergebnis kann wie folgt zusammengefaßt werden:

Bei starker Lokalisation, d. h. wenn $\mu \gg m_c$ erfüllt ist, gelten in guter Näherung die Darstellungen (2.40). Diese können bei Defekten, die vom Leitungsband abgespalten sind, auch im Fall $\mu \sim m_c$ verwendet werden. Akzeptorartige Störstellen bedürfen jedoch bei $\mu \sim m_c$ der Einschränkung, daß die Energie der Endzustände nicht in die Größenordnung der Bindungsenergie E_B^0 kommt. In diesem ϵ' -Gebiet kann die verbleibende ϵ'' -Integration in (2.43) nur noch numerisch ausgeführt werden. Interessiert man sich für den Störstellenparameter "Maximum des optischen Streuquerschnitts" bei Anwesenheit eines elektrischen Feldes, muß dies berücksichtigt werden, da $\sigma_{\text{opt}}^{\text{max}}$ gerade in diesem Gebiet

liegt.

Der Fall schwacher Lokalisation kann unter Benutzung von $\mu \ll m_c$ näherungsweise gelöst werden. In die elektronische Übergangsrate gehen dann die Eigenschaften der Endzustände nicht mehr ein. Da dieser Fall sehr flachen Störstellen angepaßt ist, wird in dieser Arbeit nicht näher auf ihn eingegangen. Analytische Ausdrücke findet man in /55/ und in Anlage 1.

Da auch bei Anwesenheit eines starken elektrischen Feldes die Struktur der Formel für die elektronische Übergangsrate als Produkt aus lokalen Zustandsdichten der Anfangs- und Endzustände und einem Energienenner als Konsequenz des Lucovsky-Modells im wesentlichen erhalten bleibt, kann geschlußfolgert werden, daß Informationen über die Störstelle, die nicht schon im feldfreien Fall ausgehend vom betrachteten Potentialmodell erhalten werden können, nur noch über die feldmodifizierte Störstellenzustandsdichte $\mathcal{G}_t(E)$ erreichbar sind, die Gegenstand des nächsten Abschnitts ist.

2.3. Feldmodifikation der Störstellenzustandsdichte

Vinogradov /43/ hat erstmals das vollständige System der exakten Lösungen von (2.33a) mit $U(\bar{x}) = -eFz$ angegeben. Enderlein et al. /55/ haben darauf aufbauend einen Ausdruck für die Störstellenzustandsdichte abgeleitet, mit dem sie das Absorptionsspektrum für einen Übergang Valenzband - leitungsband-korrelierte Störstelle unter Einschluß von Multiphonon-Prozessen berechnet haben.

Der Grundzustand wird im elektrischen Feld zu einem kontinuierlichen Spektrum verbreitert:

$$\phi_{\epsilon_0}^t(\bar{x}) = \frac{A}{\sqrt{\mathcal{F}(\eta)}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{F}^2(\eta) + \hat{\mathcal{G}}^2(\eta)}} \int_0^\infty d\alpha \alpha J_0(\rho \alpha) * \left\{ \hat{\mathcal{G}}(\eta) \text{Ai}[\eta(\alpha)] \text{Ai}\left[\eta(\alpha) \mp \frac{eFz}{\hbar|\theta_\mu|}\right] - \mathcal{F}(\eta) c[\eta(\alpha); z] \right\}, \quad (2.44)$$

wobei die Abkürzungen folgende Bedeutung haben:

$$A = \left[\frac{eF\hbar^2}{\pi(\hbar|\theta_\mu|)^3 2|\mu|} \right]^{1/2}, \quad \eta(\infty) = \frac{\mp \varepsilon \pm E_\mu(\infty)}{\hbar|\theta_\mu|}, \quad \eta = \frac{\mp \varepsilon}{\hbar|\theta_\mu|}$$

$$\hat{g}(\eta) = \frac{1}{\pi\hbar|\theta_\mu|} \sqrt{E_B^0} + g(\eta) \quad (2.45)$$

$$C[w; z] = \Theta(\pm z) \text{Ai}(w) \text{Bi}(w \mp \frac{eFz}{\hbar|\theta_\mu|}) + \Theta(\mp z) \text{Bi}(w) \text{Ai}(w \mp \frac{eFz}{\hbar|\theta_\mu|}).$$

Es gilt das obere Vorzeichen und $\varepsilon \equiv E$, $\mu = \mu_c$ für die vom Leitungsband abgespaltene Störstelle, das untere Vorzeichen und $\varepsilon \equiv \tilde{E}$, $\mu = -\mu_v$ für die vom Valenzband herrührende Störstelle. Desweiteren ist

$$F(\eta) = \text{Ai}'^2(\eta) - \eta \text{Ai}^2(\eta) \text{ und}$$

$$g(\eta) = \text{Ai}'(\eta) \text{Bi}'(\eta) - \eta \text{Ai}(\eta) \text{Bi}(\eta). \quad (2.46)$$

Die lokale Zustandsdichte im Punkt $\bar{x} = 0$ ergibt sich damit zu

$$\rho_t(\varepsilon) = (\sqrt{E_B^0} \hbar|\theta_\mu| 4\pi^3 r_0^3)^{-1} \frac{F(\eta)}{F^2(\eta) + \hat{g}^2(\eta)}. \quad (2.47)$$

Die Linienform von (2.47) stellt eine asymmetrisch verbreiterte δ -Funktion dar, deren Maximum nahe der Nullfeld-Energie E_B^0 liegt /55/. Die Verbreiterung nimmt mit wachsender Feldstärke zu. Im Grenzfall verschwindender Feldstärke kann mittels der asymptotischen Darstellung für die Funktionen $F(\eta)$ und $g(\eta)$ /51, 52/ gezeigt werden, daß

$$\lim_{F \rightarrow 0} \rho_t(\varepsilon) = (2\pi r_0^3)^{-1} \delta(\varepsilon - E_B^0) \quad (2.48)$$

gilt. Zur Bestimmung der Verschiebung des Maximums der energetischen Zustandsdichte hat man die Gleichung $\hat{g}(\eta) = 0$ zu lösen. Solange die Feldstärken einen bestimmten Grenzwert nicht überschreiten, der in Abhängigkeit von der Bindungsenergie 10^6 Vcm^{-1} oder mehr beträgt, kann für die Funktion $g(\eta)$ wiederum die asymptotische Darstellung benutzt werden:

$$g(\eta) \approx -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 - 0.03123/\eta^3 \right) \sqrt{\frac{\eta}{\pi}} \quad (2.49)$$

und man erhält nach näherungsweise Lösung einer kubischen Gleichung

$$\varepsilon(\max \varrho_t) \approx \mp E_B^0 \left[1 + 0.0625 \left(\frac{\hbar|\theta_{\mu}|}{E_B^0} \right)^3 \right] . \quad (2.50)$$

In (2.50) sind Terme von höherer als dritter Ordnung in $\hbar|\theta_{\mu}|/E_B^0$ nicht berücksichtigt worden. Gleichung (2.50) ist die analytische Näherung für den quadratischen Stark-Effekt /56/. Der lineare Stark-Effekt kann wegen der s-Symmetrie der Zustände nicht auftreten; die Energie wird im Lucovsky-Modell durch das elektrische Feld stets abgesenkt. Die Größenordnung des Effekts ist in Abb. 6 demonstriert. Es wurde eine Bindungsenergie von nur 0.25 eV gewählt, demgegenüber jedoch elektrooptische Energien von etwa 0.1 eV, was Feldstärken von $10^5 - 10^6 \text{ Vcm}^{-1}$ entspricht. Trotz dieser extremen Parameterwahl beträgt die Größenordnung der Energieabsenkung nur 1/1000 eV. Die Tunnelwahrscheinlichkeit wird dadurch nur um etwa 0.1 % verkleinert. Solange die Nullfeld-Bindungsenergie ein Mehrfaches der elektrooptischen Energie beträgt, kann der Feldeinfluß auf die Störstelle demnach in guter Näherung vernachlässigt werden. Dies ist zwar letztlich eine Konsequenz des Lucovsky-Modells, aber andere Potentialmodelle mit endlichem Topfradius sollten qualitativ zu derselben Aussage führen.

Die beiden letzten Abschnitte haben gezeigt, daß das zugrundegelegte einfache Potentialmodell (2.10) nicht im Widerspruch steht zur beabsichtigten Erklärung des Feldeffektes auf thermische und optische Übergangsraten, weil die experimentell realisierten Feldstärken sich primär auf die Endzustände auswirken, während Änderungen in der Störstellenzustandsdichte bzw. in der Gestalt des Ausdrucks für die Rate als Effekt höherer Ordnung angesehen werden können.

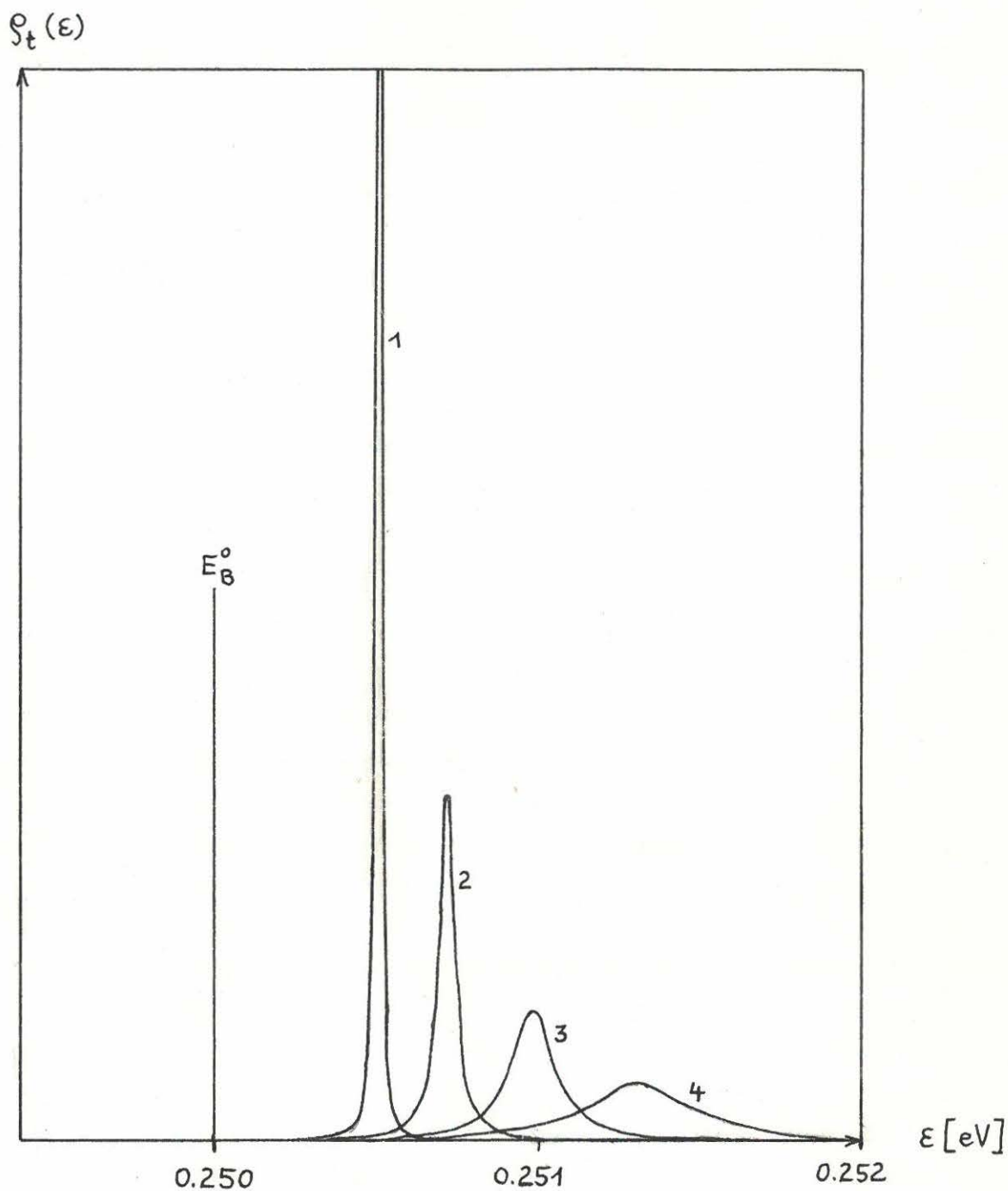


Abb.6

Abhängigkeit der Störstellenzustandsdichte $\rho_t(\epsilon)$ von der elektrischen Feldstärke.

Parameter ist die elektrooptische Energie:

- 1 $\hbar\theta = 0.08$ eV
- 2 $\hbar\theta = 0.09$ eV
- 3 $\hbar\theta = 0.10$ eV
- 4 $\hbar\theta = 0.11$ eV

3. Theorie der Emissionsrate für strahlungslose Übergänge

Störstelle - Band im neutralen Modell

3.1. Darstellung der Meßmethode und experimenteller Ergebnisse

Das DLTS-Meßprinzip und die Bestimmung der Störstellenparameter aus DLT-Spektren ist ausführlich und zusammenfassend z. B. in /5/ dargestellt. Für eine Elektronenhaftstelle ($e_n \gg c_p, p, e_p$) kann die zeitliche Änderung der Besetzungswahrscheinlichkeit der Störstellen mit Elektronen gemäß der Shockley-Hall-Read-Statistik /57/ durch die Ratengleichung

$$\frac{d}{d\tau} f_t = c_n n_c (1 - f_t) - e_n f_t, \quad (f_t = \frac{n_t}{N_t}) \quad (3.1)$$

(c_n - Einfangkoeffizient, e_n - Emissionsrate, n_c - Elektronenkonzentration im Leitungsband, N_t - Gesamtkonzentration an Störstellen) ausgedrückt werden. Einfache exponentielle Lösungen ergeben sich nur durch Vorgabe bestimmter Randbedingungen, die sich in Raumladungszonen von p-n-Übergängen, Schottky-Kontakten oder MIS-Strukturen erzeugen lassen. Die Konzentration an beweglichen Trägern kann im Raumladungsgebiet näherungsweise vernachlässigt werden; die Raumladungsweite kann durch Variation der äußeren Spannung geändert werden, was im Experiment stufenförmig erfolgt. Gilt im Falle der Elektronenhaftstelle $e_n \gg c_n, n$, d. h. sind die besetzten Störstellen ab $\tau = 0$ in einem Gebiet ohne bewegliche Ladungsträger, so nimmt die Konzentration der mit Elektronen besetzten Störstellen gemäß

$$n_t(\tau) = N_t \exp(-e_n \tau) \quad (3.2)$$

ab. Dieser Besetzungswechsel tiefer Störstellen im Raumladungsgebiet ist mit einer Änderung der Raumladungsdichte verbunden, die zur Verschiebung der Raumladungszonengrenzen führt und so kapazitiv nachgewiesen werden kann. Abb. 7 veranschaulicht den Vorgang am Beispiel eines Schottky-Kontaktes. Liegt die Vorspannung U_0 an, sind die Störstellen mit dem Energieniveau E_t

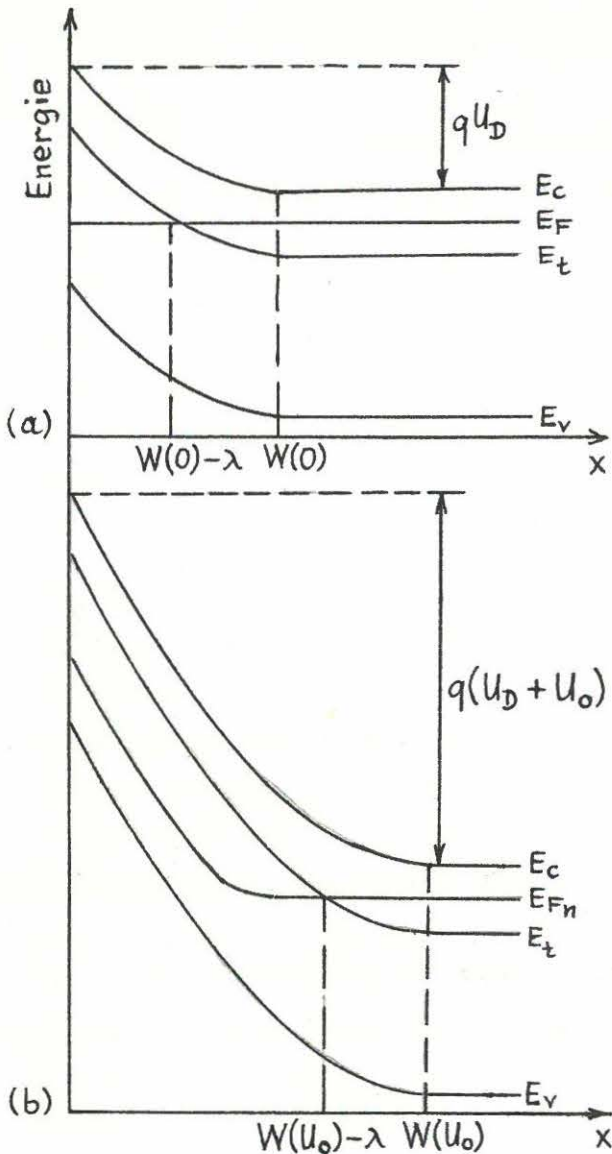


Abb.7

Energiebandschema eines Schottky-Kontaktes auf einem n-Halbleiter:

(a) ohne Sperrspannung (thermodynamisches Gleichgewicht)

(b) mit Sperrspannung U_0

im Gebiet $0 \leq x < W(U_0) - \lambda$ leer. Durch einen Majoritätsträgerfüllimpuls der Dauer t_p wird die Vorspannung auf 0 V (i. a. auf U_1) verringert. Im Gebiet $W(0) \leq x \leq W(U_0) - \lambda$, in dem die Elektronenkonzentration gleich der des neutralen Halbleiters ist, fangen die Störstellen Elektronen gemäß $n_t(\tau) = N_t [1 - \exp(-c_n n_c \tau)]$ ein. Im Gebiet $W(0) - \lambda \leq x \leq W(0)$ nimmt die Elektronenkonzentration stark mit x ab, so daß wegen $c_n n_c = f(x)$ das (integrale) exponentielle Verhalten gestört ist. Die Forderung, daß alle Haftstellen bis $x = W(0) - \lambda$ besetzt werden, erfordert Impulse mit $t_p \gg e_n^{-1} / 5$. Nach dem Füllimpuls sind nun die Niveaus im Intervall $W(0) - \lambda \leq x \leq W(U_0) - \lambda$ besetzt und folglich ist die Raumladungsdichte verringert. Durch thermische Elektronenemission aus den Haftstellen dieses Gebietes relaxiert das System in den thermodynamischen Gleichgewichtszustand gemäß Gleichung

(3.2), d. h. mit einer Zeitkonstanten, die gleich der inversen Elektronenemissionsrate ist. Dieser Prozeß ist mit einem Kapazitätstransient $\Delta C(e_n, \tau) = \Delta C_0 \exp(-e_n \tau)$ verbunden, der mit Methoden der Korrelationsmeßtechnik weiterverarbeitet wird. Durch periodische Wiederholung der Anregungsimpulse bei langsamer Änderung der Proben temperatur entsteht der DLTS-Peak $S = f(e_n(T))$, von dem aus auf die eigentlich interessierende Größe $e_n(T)$ geschlossen werden kann (genauere Darstellung in /5/).

Die Feldabhängigkeit der thermischen Emissionsrate kann mittels einer DLTS-Variante, der DDLTS, bestimmt werden, bei der die Differenz zwischen zwei zu unterschiedlich hohen Vorspannungsimpulsen gehörenden DLTS-Signalen gebildet wird. Läßt man die Vorspannungsimpulsdifferenz ΔU , die die Größe des Tiefenintervalls bestimmt, konstant und variiert nur die absolute Höhe des Füllimpulses, kann die Abhängigkeit der Emissionsrate $e_n(T)$ von der Feldstärke anhand der Temperaturverschiebung der DDLTS-Peaks bei fest vorgegebener Emissionsrate bestimmt werden. Innerhalb ΔU wird die Feldstärke als konstant angenommen. Unter der Voraussetzung $n_t \ll n_D$ kann die Feldstärke im Gebiet $0 \leq x \leq W - \lambda$ durch

$$F(x) = \frac{2(U_0 + U_D)}{W(U_0)} \left(1 - \frac{x}{W}\right) \quad (3.3)$$

angegeben werden /5/, was im wesentlichen auf eine exakte Ortsbestimmung hinausläuft. Die dazu zu benutzenden Auswerteformeln findet man in /5/ und z. B. in /58/.

Aus der wachsenden Zahl veröffentlichter Meßergebnisse seien zur Veranschaulichung der Feldabhängigkeit der Übergangsraten das goldkorrelierte Akzeptorniveau in Silizium und das EL2-Zentrum in GaAs (Abb. 8) herausgegriffen. Man erkennt im Falle Si:Au (Abb. 8a) einen Anstieg der Emissionsrate um mehrere Größenordnungen im Feldstärkebereich $1 \dots 6 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ mit steiler werdenden Anstiegen für tiefere Temperaturen und ein typisches Einlaufen der Kurven in die Nullfeld-Grenzwerte /15/.

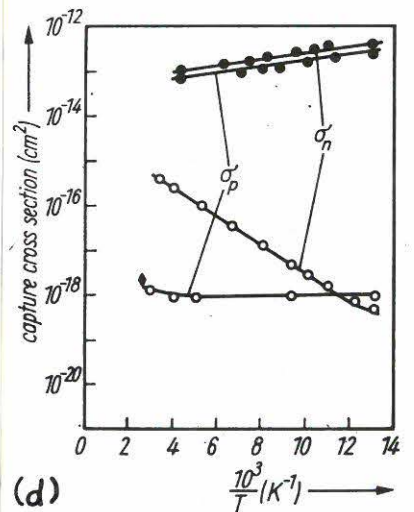
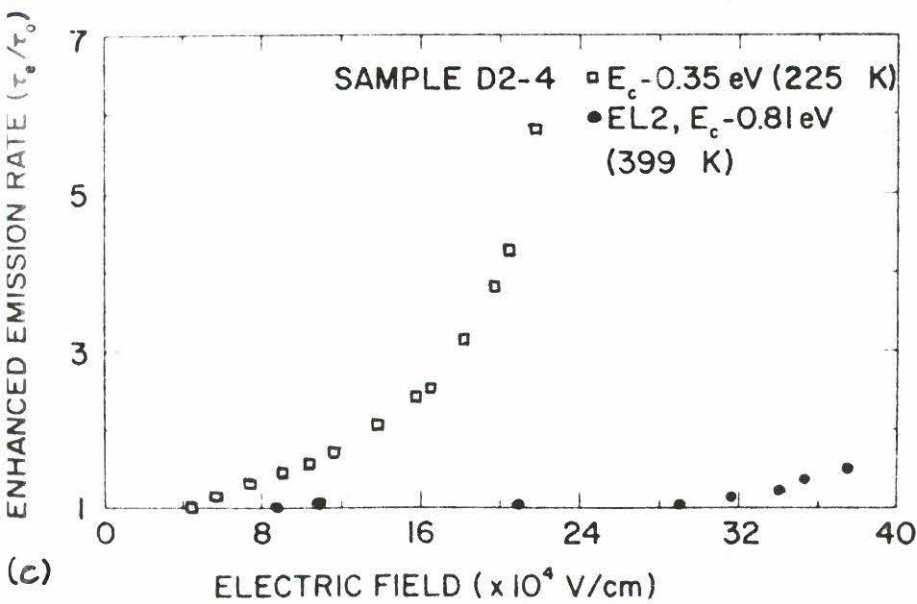
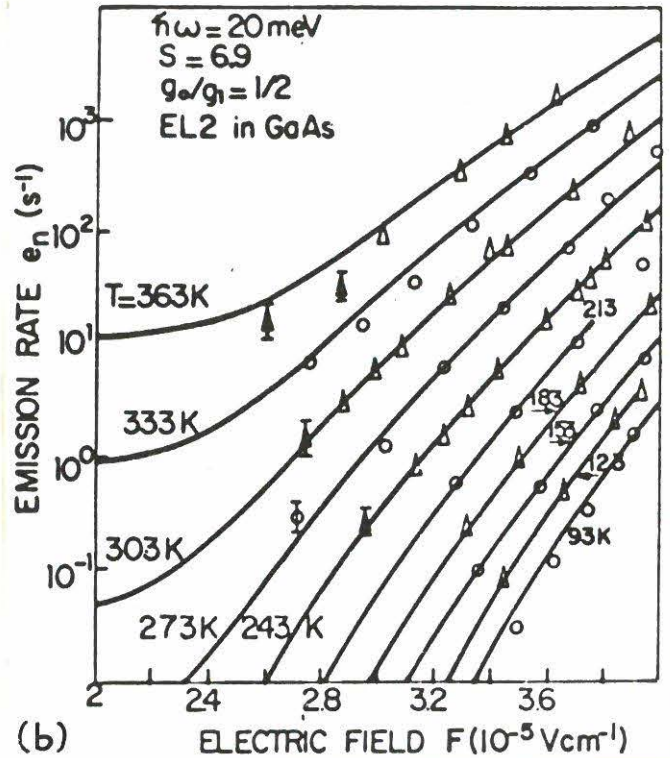
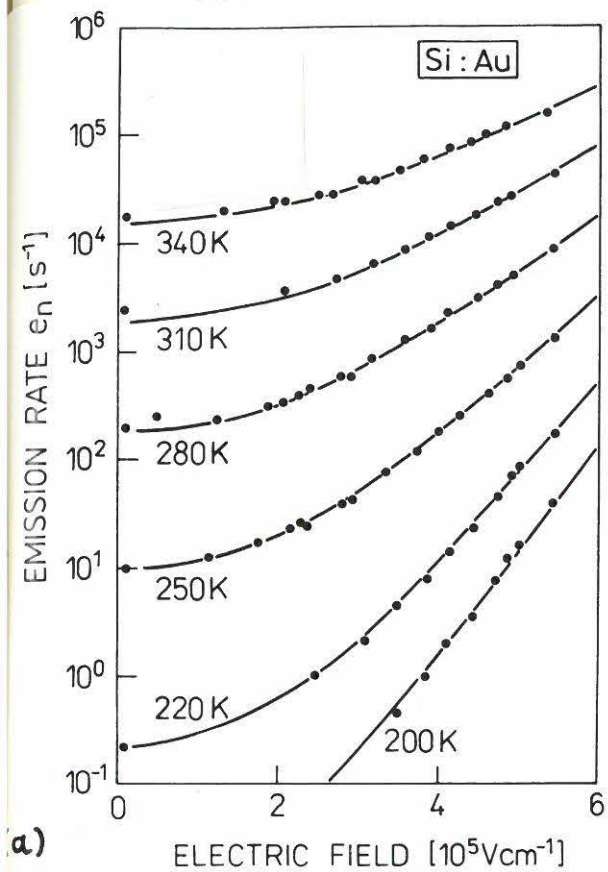


Abb.8a - 8c

Gemessene Feldabhängigkeit der thermischen Emissionsrate
 a) des goldkorrelierten Akzeptors in Silizium /15/
 b) des EL2-Zentrums in GaAs /11/
 c) des EL2-Zentrums in GaAs (Punkte) /17/

Abb.8d

Arrhenius-Darstellung des Einfangquerschnitts von EL2 in GaAs für starkes (•) und verschwindendes (◦) elektrisches Feld /12/

Für das intensiv untersuchte EL2-Zentrum in GaAs ergibt sich ein widersprüchliches Bild. Während Makram-Ebeid /11/ noch für $T = 363 \text{ K}$ eine Änderung der thermischen Emissionsrate um mehr als zwei Größenordnungen im Feldstärkebereich zwischen 2 und $4 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ feststellte (Abb. 8b), erscheint die Emissionsrate nach Li und Wang /17/ (Abb. 8c) im selben Bereich bei einer ähnlichen Temperatur als nahezu konstant. Dieses Ergebnis ist in qualitativer Übereinstimmung mit Messungen von Kaminska et al. /18/. Prinz und Rechkunov /12/ berichten eine extrem starke Feldabhängigkeit des EL2-Einfangkoeffizienten (Abb. 8d). Bei tiefen Temperaturen unterscheiden sich Nullfeld- und Starkfeldwert um 6 Größenordnungen. Auffällig ist der ansteigende Verlauf des Starkfeld-Einfangkoeffizienten über der inversen Temperatur.

Die theoretische Beschreibung sollte demnach den Ratenverlauf in Abhängigkeit von der herrschenden Feldstärke über dem gesamten Temperaturbereich liefern, d. h. bei Emission die Funktion $e_n(T, F)$, die dann nur noch von einem minimalen Satz von empirischen Anpaßparametern abhängt.

3.2. Berechnung der Emissionsrate im Formalismus der Greenschen Funktionen

Im 2. Kapitel wurde herausgestellt, daß die Elektron-Phonon-Kopplung für alle Übergangsprozesse an tiefen Störstellen von entscheidender Bedeutung ist. Wenn die Übergänge nicht thermisch induziert werden, wie im Fall der strahlungslosen Multiphonon-Rekombination, so sind sie zumindest phonon-assistiert, und die Spektren erfahren eine wesentliche Modifikation.

Erweitert man nun den Teil H_e des Einelektron-Hamiltonians (2.4) um den phononischen Teil, der die lineare Elektron-Phonon-Wechselwirkung H_{ep} enthält, so führen die Überlegungen des Abschnitts 2.1. in Analogie zu den Blochschen Matrixelementen $z_{\bar{k}\bar{k}'}$ wegen

$$H_{ep}(\bar{x}) = \sum_q g_q e^{i\bar{q}\bar{x}} (b_q \pm b_{-q}^+) \quad (3.4)$$

zu neuen Matrixelementen

$$B_{\bar{k}\bar{k}'}^{\nu\nu'}(\bar{q}) = \int d^3\bar{x} \psi_{\nu\bar{k}}^*(\bar{x}) e^{i\bar{q}\bar{x}} \psi_{\nu'\bar{k}'}(\bar{x}). \quad (3.5)$$

In (3.4) steht das untere Vorzeichen im Falle polarer Kopplung (Fröhlich-Kopplung), um zu garantieren, daß H_{ep} hermitesch ist /44/. q enthält neben dem Phononen-Wellenzahlvektor \bar{q} und dem Index des Schwingungszweiges β auch die Indizes sämtlicher Lokalmoden. Mit den Standard-Näherungen

$$B_{\bar{k}\bar{k}'}^{\nu\nu'}(\bar{q}) \approx \delta_{\bar{k}, \bar{k}'+\bar{q}}, \quad B_{\bar{k}\bar{k}'}^{cv}(\bar{q}) \approx \delta_{\bar{k}\bar{k}'} B_0^{cv}(\bar{q}) \quad (3.6)$$

ergibt sich für den Hamiltonoperator (2.4) des Systems die Form

$$\begin{aligned} H = & \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_0^{\infty} d\alpha \sum_m a_{E\alpha m}^+ a_{E\alpha m}^c \left[E + \sum_q f_q(cc)(b_q \pm b_{-q}^+) \right] + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} dE a_{E00}^+ a_{E00}^t \left[E + \sum_q f_q(tt)(b_q \pm b_{-q}^+) \right] + \sum_q \hbar\omega_q b_q^+ b_q \\ & + \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dE dE' \int_0^{\infty} d\alpha \sum_m a_{E'\alpha m}^+ a_{E00}^t \left[\sum_q f_q(ct)(b_q \pm b_{-q}^+) - \right. \right. \\ & \left. \left. - eF T_{E'\alpha m, E00}^{ct} \right] + \text{adj.} \right\}. \quad (3.7) \end{aligned}$$

In (3.7) sind neben den Abkürzungen (2.18) und (2.19) folgende neue Symbole eingeführt worden:

$$f_q(\nu\nu) \equiv g_q I_E^{\nu\nu}(\bar{q}), \quad I_E^{\nu\nu}(\bar{q}) \equiv \int d^3\bar{x} \phi_E^{\nu*}(\bar{x}) e^{i\bar{q}\bar{x}} \phi_E^{\nu}(\bar{x}) \quad (3.8)$$

und

$$f_q(cc) \equiv \begin{cases} g_q I_{E'\alpha m, E00}^{cc}(\bar{q}) & (3.9a) \end{cases}$$

$$f_q(ct) \equiv \begin{cases} g_q B_0^{cv}(\bar{q}) I_{E'\alpha m, E00}^{cv}(0). & (3.9b) \end{cases}$$

Dabei gilt wieder der obere Ausdruck für die vom Leitungsband,

der untere dagegen für die vom Valenzband abgespaltene Störstelle. Anhand von (3.7) bis (3.9) wird deutlich, daß die Kopplungskonstanten der Elektron-Phonon-Wechselwirkung f_q über die Einhüllenden ϕ eine Funktion der Feldstärke werden.

Der Nichtdiagonalanteil (geschweifte Klammer) enthält die gesamte (strahlungslose) übergangsinduzierende Wechselwirkung H^{int} unter Vernachlässigung von Intraband-Streuprozessen. Wegen $B_0^{\text{cv}}(\bar{q}) = B_0^{\text{vc}}(-\bar{q})^*$ und $f_q^*(\nu\nu') = \pm f_{-q}(\nu'\nu)$ kann der Operator der Elektron-Phonon-Wechselwirkung abkürzend in der Form

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ep}}^{\text{diag}} &= \sum_{\lambda=c,t} \sum_q \left[f_q(\lambda\lambda) b_q + f_q^*(\lambda\lambda) b_q^+ \right] \hat{n}_\lambda, \\
 H_{\text{ep}}^{\text{off}} &= \sum_{\lambda,\lambda'=c,t} \sum_q \left[f_q(\lambda\lambda') b_q + f_q^*(\lambda'\lambda) b_q^+ \right] a_\lambda^+ a_{\lambda'} \\
 & \hspace{15em} (3.10)
 \end{aligned}$$

geschrieben werden, wobei $\sum_c \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dE' \int_0^{\infty} d\omega \sum_m$, $\sum_t \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dE$ eingeführt wurde und \hat{n}_λ der Elektronen-Dichteoperator ist.

Die Berechnung der Einfang- bzw. Emissionsrate für strahlungslose Multiphonon-Übergänge ist in der Literatur mehrfach explizit angegeben worden (z. B. /1, 3, 60, 61, 62, 63/). Dabei wurde meist von der " Goldenen Regel " und einem aus dem Gesamthamiltonian abgespaltenen Störoperator ausgegangen, dessen Form von der speziellen Entkopplung des elektronischen vom vibronischen Subsystem abhing. Obwohl die Diskrepanzen bzgl. der Größenordnung des theoretischen Einfangkoeffizienten in den Arbeiten /6, 7, 16/ aufgeklärt wurden, unterscheiden sich die Ergebnisse verschiedener Autoren bzgl. der diversen Vorfaktoren, die bei der expliziten Auswertung der Goldenen Regel entstehen, was zum Teil seinen Ursprung in der Nicht-Hermizität des Wechselwirkungsoperators hat. Für die konkrete Rechnung erweist sich der alternative Zugang über die lineare Response-Theorie als bequemer /62, 64, 65/. Die Übergangsraten erscheinen hier als Fouriertransformierte von Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen in Analogie zur Kubo-Formel für die Transportkoeffizienten /44/.

Dieser Zugang liefert zudem die direkte Verbindung zum Experiment, denn unter der (im Experiment nahezu realisierten) Nebenbedingung $n_c = 0$ ist die thermische Emissionsrate gegeben durch

$$e_n = -\frac{d}{d\tau} n_t = \frac{d}{d\tau} n_c = \frac{i}{\hbar} \langle [H^{\text{int}}(0), \hat{n}_c(0)] \rangle + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \langle [[H^{\text{int}}(0), \hat{n}_c(0)], H^{\text{int}}(-\tau)] \rangle, \quad (3.11)$$

wenn man die Entwicklung beim quadratischen Term abbricht. Die großkanonische Mittelung in (3.11) erfolgt mit dem Operator $H^0 = H - H^{\text{int}}$. Der lineare Term und die "Interferenz"terme in (3.11) verschwinden wegen der Mittelung über das Phononenensemble. Somit ist (3.11) dann völlig äquivalent zur Goldenen Regel.

Anstatt die langwierige Rechnung explizit anzugeben (die man z. B. anhand von /62/ nachvollziehen kann), sei lediglich der Weg kurz skizziert: Durch kanonische Transformation wird der Hamiltonoperator auf eine Form gebracht, in der der Diagonaleil der Elektron-Phonon-Kopplung nicht mehr explizit auftaucht /66/. Nach Berechnung der Kommutatoren und thermischer Mittelung treten im Falle der feldinduzierten Übergänge neben der Linienformfunktion Zweielektronen-Korrelatoren auf, die nach RPA-Entkoppelung /44/ auf ein Produkt von Fermi-Funktionen führen. Die Linienformfunktion wird im Fall der thermisch induzierten Übergänge durch einen komplizierteren Ausdruck ersetzt. Man erhält insgesamt für die Emissionsrate

$$e_n = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE dE' \int_0^\infty d\tau \sum_m \left\{ (eF)^2 \left| T_{E' \lambda m, E 00}^{\text{ct}} \right|^2 L_{E'}^{\text{ct}}(\omega) + \sum_{qq'} f_q(\tau c) f_{q'}^*(\tau c) R_{qq'}^{\text{ct}}(\omega) \right\}. \quad (3.12)$$

In (3.12) bezeichnet $L(\omega)$ die Linienformfunktion der Multiphonon-Theorie, deren zeitliche Fouriertransformierte die Ge-

stalt

$$L_{E',E}^{ct}(\tau) = \exp \left\{ \sum_q (\hbar\omega_q)^{-2} |\Delta f_q|^2 \left[D_q^>(\tau) - (2\bar{N}_q + 1) \right] \right\} \quad (3.13)$$

hat, wobei $D_q^>(\tau)$ der Einphonon-Propagator ist (\bar{N}_q - Bosefunktion, $\Delta f_q \equiv f_q(tt) - f_q(cc)$):

$$D_q^>(\tau) = (1 + \bar{N}_q) e^{-i\omega_q \tau} + \bar{N}_q e^{i\omega_q \tau}. \quad (3.14)$$

Die Übergangsenergie $\hbar\omega$ ist um die kombinierte Gitterrelaxationsenergie renormiert, so daß in (3.12) die Übergangsfrequenz ω durch

$$\omega = \frac{E - E'}{\hbar} - \frac{1}{\hbar} \sum_q (\hbar\omega_q)^{-1} (|f_q(tt)|^2 - |f_q(cc)|^2) \quad (3.15)$$

definiert ist. Die Größe \hat{R} hängt in der Zeitdarstellung in einfacher Weise mit der Linienformfunktion zusammen:

$$\hat{R}_{qq}^{EE'}(\tau) = \left\{ D_q^>(\tau) \delta_{qq'} + Q_q^{ct}(\tau) Q_{q'}^{ct*}(-\tau) \right\} L_{E',E}^{ct}(\tau). \quad (3.16)$$

In (3.16) ist

$$Q_q^{ct}(\tau) = (\hbar\omega_q)^{-1} \left\{ 2f_q^*(tt) - \Delta f_q^* \left[\bar{N}_q (e^{i\omega_q \tau} - 1) - (\bar{N}_q + 1)(e^{-i\omega_q \tau} - 1) \right] \right\} \quad (3.17)$$

Es ist üblich, die mit den Kopplungskonstanten f_q verknüpften Größen als empirische Anpaßparameter anzusehen. So definiert man durch

$$S_q \equiv (\hbar\omega_q)^{-2} |\Delta f_q|^2, \quad \varepsilon_q^{rel} \equiv (\hbar\omega_q)^{-2} (|f_q(cc)|^2 - |f_q(tt)|^2) \quad (3.18)$$

den differentiellen Huang-Rhys-Faktor und die (auf die Phononenergie $\hbar\omega_q$) normierte Gitterrelaxationsenergie. Beide Größen

sind ein Maß für die Kopplungsstärke und gehen (bis auf das Vorzeichen) ineinander über, wenn, wie meistens getan, die Kopplung der Ladungsträger im ausgebreiteten Endzustand, verglichen mit der starken Kopplung im gebundenen Zustand, vernachlässigt wird. Dann folgt

$$\epsilon_q^{\text{rel}} = -S_q < 0 \quad \text{und} \quad \omega = \frac{E - E'}{\hbar} - \sum_q S_q \omega_q. \quad (3.19)$$

Die ausstehende Zeitintegration in (3.12) ($L(\omega)$ und $R(\omega)$ sind Fourierintegrale) erledigt sich sofort, wenn man annimmt, daß die Kopplung primär mit einer bestimmten lokalisierten Mode q_0 erfolgt, bzw. phänomenologisch durch eine effektive Phononenergie beschreibbar ist (Ein-Moden- oder Einstein-Modell). Dann ergibt sich

$$\hat{R}_{EE'}^{\text{tc}}(\omega) = \sum_{\substack{n=0 \\ \pm 1, \pm 2}} \alpha_n M_n(\omega); \quad L_{E'E}^{\text{ct}}(\omega) = M_0(\omega) \quad (3.20)$$

mit

$$M_n(\omega) = 2\pi e^{-S(2\bar{N}+1)} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\bar{N}+1}{\bar{N}} \right]^{\frac{l+n}{2}} I_{|l|+n}(2S\sqrt{\bar{N}(\bar{N}+1)}) \delta(1\omega_0 - \omega) \quad (3.21)$$

(I_ϱ - modifizierte Besselfunktion der Ordnung ϱ). Man kann leicht zeigen, daß sich die Summe über n in (3.20) in geschlossener Form ausführen läßt /67/, wenn man die explizite Gestalt der fünf Faktoren α_n beachtet:

$$\alpha_0 = [\epsilon^{\text{rel}}]^2 S^{-1} - 2S\bar{N}(\bar{N}+1) \quad \alpha_2 = S\bar{N}^2 \quad (3.22)$$

$$\alpha_1 = [1 \pm 2\epsilon^{\text{rel}}] \begin{cases} \times \bar{N} \\ \times (\bar{N}+1) \end{cases} \quad \alpha_{-2} = S(\bar{N}+1)^2$$

und die Rekursionsformeln für modifizierte Besselfunktionen anwendet /50/. Dann erhält man für den thermisch induzierten Übergang

$$\hat{R}_{EE'}^{\text{tc}}(\omega) = 2\pi \hbar e^{-S(2\bar{N}+1)} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{(|l| + \epsilon^{\text{rel}})^2}{S} \left[\frac{\bar{N}+1}{\bar{N}} \right]^{1/2} I_{|l|}(2S\sqrt{\bar{N}(\bar{N}+1)}) \times \delta[(1 - \epsilon^{\text{rel}})\hbar\omega_0 + E' - E]. \quad (3.23)$$

Da bei Emission l immer negativ ist, kann der Faktor $S^{-1}(|l| + \epsilon^{\text{rel}})^2$ unter Ausnutzung der Energieerhaltung auch in der Form $S^{-1}(E' - E)^2 / (\hbar\omega_0)^2$ geschrieben werden, so daß die Relation

$$\sum_{R_{EE'}}^{\text{tc}}(\omega) = \frac{(E - E')^2}{S(\hbar\omega_0)^2} L_{E'E}^{\text{ct}}(\omega) \quad (3.24)$$

gilt. Dieser Faktor ist gerade das Quadrat des sog. "crossing point" $|Q_c|^2$, d. h. des Schnittpunkts der adiabatischen Potentialparabeln in einem Konfigurationskoordinaten-Diagramm. (Aufgrund des kontinuierlichen Energiespektrums gibt es hier unendlich viele solcher Parabeln.) Die exakte Beziehung (3.24) ist bereits 1977 von Henry und Lang /68/ durch näherungsweise Integration erhalten worden. Nach (3.23) und (3.19) verschwindet die Wahrscheinlichkeit für thermisch induzierte Übergänge offenbar, wenn $l \approx -S$ wird, d. h. wenn der Schnittpunkt mit dem Minimum der oberen Parabel zusammenfällt (Fall starker Kopplung beim Zwei-Niveau-Problem). Dieses Verschwinden ist Ausdruck der Gültigkeitsgrenzen der Theorie /69/, konkret des Zusammenbruchs der harmonischen Näherung für Auslenkungen $Q \approx Q_c$. Störstellen, die (für $F = 0$) durch $|l| \approx S$ gekennzeichnet sind (z. B. "extrinsic self-trapped" /70/) und sehr effektiv als Zentren strahlungsloser Rekombination fungieren, scheinen daher gerade von der Anwendung der Theorie ausgeschlossen zu sein /69/.

Für tiefe Niveaus in breitlückigen Halbleitern stellt der Summand mit $l \approx -S$ in (3.23) keine Einschränkung dar, da er Übergänge in Zustände mit extrem kleiner Tunnelwahrscheinlichkeit beschreibt, deren Vernachlässigung überhaupt die Grundlage für die Ausdehnung der Standard-Multiphonontheorie auf den hier untersuchten Fall eines starken elektrischen Feldes ist. Da $|E - E'| \gg \hbar\omega_0$ gelten muß, kann wieder $\hbar\theta \ll E_B^0$ als quantitative Bedingung geltend gemacht werden. Die Multiphonon-Theorie ist demnach genau dann anwendbar, wenn der Feldeinfluß auf die Störstelle näherungsweise vernachlässigt werden kann. (Über weitere mit der Multiphonon-Theorie verbundene Einschränkungen sh. z. B. /7, 69, 71/)

Bei der Ableitung von (3.12) sind alle Effekte der Elektron-

Phonon-Kopplung auf das Energiespektrum der Phononen vernachlässigt worden, insbesondere hängt also die Frequenz der effektiven Mode q_0 nicht von der Besetzung des tiefen Niveaus ab. Eine etwaige Frequenzänderung dieser Mode hätte beträchtlichen Einfluß auf die thermische Übergangswahrscheinlichkeit, was man qualitativ bereits anhand des Konfigurationskoordinaten-Diagramms erkennt. Analytische und numerische Rechnungen von Gutsche /74/ haben gezeigt, daß der Frequenzeffekt u. U. eine Änderung der Raten um Größenordnungen bewirken kann.

Unter den hier gemachten Voraussetzungen kann der Ausdruck für die thermische Emissionsrate auf eine geschlossene Form gebracht werden. Benutzt man in (3.12) die Beziehungen (2.18) und (3.9), so wird mit (2.19) und (2.39) für die akzeptorartige Störstelle

$$e_n = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' \left\{ r_F + \frac{(E - E')^2}{S(\hbar\omega_0)^2} r_p \right\} D(E, E') L_{E', E}^{ct} \left(\frac{E - E'}{\hbar} - S\omega_0 \right), \quad (3.25)$$

$$(r_F = (eF)^2 |z_{cv}|^2; r_p = |g_{q_0}|^2 |B_0^{cv}(\bar{q}_0)|^2)$$

wobei für die elektronische Übergangsrate Formel (2.40b) und für die Linienformfunktion der Ausdruck (3.20) einzusetzen ist. Im Falle der vom Leitungsband herrührenden Störstelle ist es nicht möglich, die elektronische Übergangsrate als gemeinsamen Faktor aus beiden Übergangswahrscheinlichkeiten herauszuziehen. In Anlage 2 wird gezeigt, daß in diesem Fall in Formel (3.25) folgende Ersetzungen durchzuführen sind:

$$|z_{cv}|^2 D(E, E') \rightarrow \tilde{v}_0^2 \frac{\mathcal{S}_t(E)}{\left[\frac{m_c}{\mu_c} E' - E \right]^4} \frac{\alpha_c \left(\frac{m_c}{\mu_c} \right)^2 (\hbar\theta_c)^{3/2}}{\pi} \int_{-E/\hbar\theta_c}^{\infty} dt Ai'^2(t) \quad (3.26)$$

$$|B_0^{cv}(\bar{q}_0)|^2 D(E, E') \rightarrow \tilde{v}_0^2 \frac{\mathcal{S}_t(E) \mathcal{S}_c(E')}{\left[\frac{\hbar^2 q_{0z}^2}{2\mu_c} + \frac{m_c}{\mu_c} E' - E \right]^2} \quad (3.27)$$

Die im feldinduzierten Term (3.26) auftretende Band"zustands-

dichte" ist ähnlich der in der Elektrooptik von Tharmalingam für dipolverbotene Übergänge berechneten /72/. Zusätzlich geht der Energienenner mit der vierten Potenz ein. Da $E \approx -E_B^0$, $m_c \lesssim \mu$ ist und Energien E' mit $E' \gtrsim -\hbar\theta_c$ die wesentlichen Beiträge liefern, wird die feldinduzierte Rate um größenordnungsmäßig $(E_B^0/\hbar\theta_c)^2 \approx 10^2$ vermindert. Beim thermisch induzierten Übergang tritt wegen des Operators $\exp(i\bar{q}\bar{x})$ ein zusätzlicher Summand im Nenner auf, der für mittlere Phononen-Wellenzahlvektoren etwa $10 E_g$ ergibt, also ebenfalls zu einer Reduzierung der Rate um etwa 10^2 führt.

Übergänge aus einer leitungsband-korrelierten Störstelle ins Leitungsband sind demnach weit weniger wahrscheinlich, als solche aus einer vom Valenzband abgespaltenen Störstelle. Für alle tiefen Niveaus, zu deren Aufbau sowohl Leitungs- als auch Valenzbänder beitragen, ist demnach Gleichung (3.25) vorzuziehen. Diese vereinfacht sich weiter, wenn man den Feldeinfluß auf den Defektzustand vernachlässigt. Dann liefert $D(E, E')$ eine weitere δ -Funktion von $\xi_t(E)$, und beide Integrationen in (3.25) können ausgeführt werden. Wegen der bereits erwähnten Vernachlässigung der Kopplung der Endzustände an das Gitter sind dann auch die Elektron-Phonon-Kopplungsparameter nicht länger feldabhängig. Mit (2.40b), (2.48) und (A8) erhält man im isotropen Bändermodell

$$e_n(T, F) = \frac{\tilde{v}_0^2}{r_0^3 \hbar} e^{-S(2\bar{N}+1)} \sum_{1 \leq 0} \left[\frac{\bar{N}+1}{\bar{N}} \right]^{1/2} I_1(2S\sqrt{\bar{N}(\bar{N}+1)}) \times \quad (3.28)$$

$$\times \left\{ r_F + \frac{(1+S)^2}{S} r_P \right\} \frac{\rho_c(-E_B - \hbar\omega_0)}{\left[E_B^0 - \frac{m_c}{\mu_v} (E_B + \hbar\omega_0) \right]^2}$$

mit der vom Franz-Keldysh-Effekt /73/ bekannten feldmodifizierten Bandzustandsdichte

$$\rho_c(\mathcal{E}') = \frac{\sqrt{8m_c^3}}{4\pi\hbar^3} \sqrt{\hbar\theta_c} \left[Ai'^2\left(-\frac{\mathcal{E}'}{\hbar\theta_c}\right) + \left(\mathcal{E}'/\hbar\theta_c\right) Ai^2\left(-\frac{\mathcal{E}'}{\hbar\theta_c}\right) \right]. \quad (3.29)$$

In (3.28) bezeichnet $E_B = E_g - E_B^0 + S\hbar\omega_0$ die effektive Traptiefe, gemessen von der Leitungsbandkante.

Der Endausdruck (3.28) für die strahlungslose Emissionsrate beschreibt in einheitlicher Weise zwei Prozesse: phonon-assistiertes Tunneln und feldunterstützte thermische Emission. In /11/ ist der erste Prozeß im Rahmen der WKB-Näherung diskutiert worden, doch gerade der zweite Kanal erweist sich als weitaus effektiver (sh. nächster Abschnitt). Abb. 9 veranschaulicht das Geschehen anhand eines Konfigurationskoordinaten-Diagramms. Die exponentiell abklingende Zustandsdichte im Gap ist durch die abnehmende Linienstärke gekennzeichnet; gleichzeitig ist die kombinierte Zustandsdichte aufgetragen.

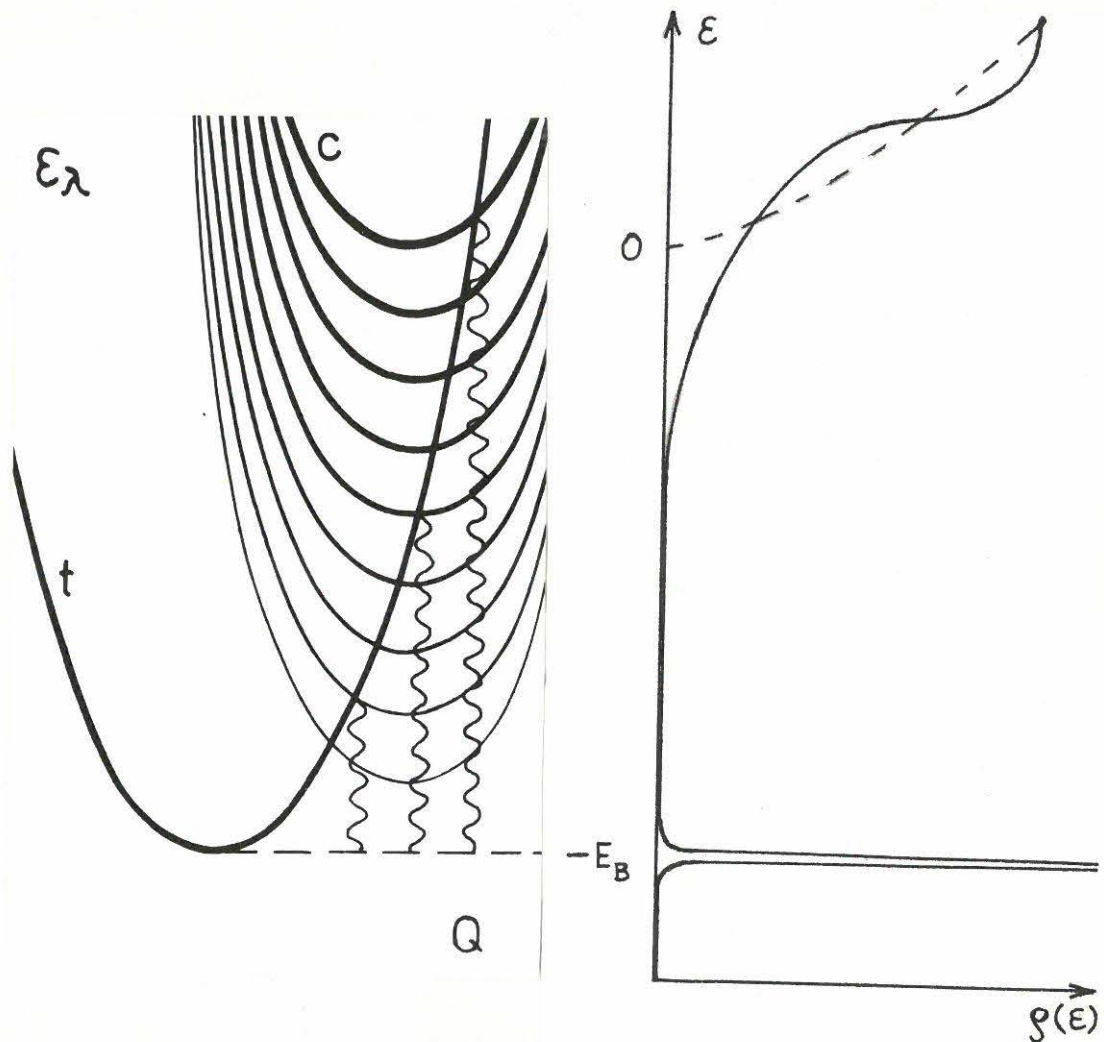


Abb.9

Konfigurationskoordinaten-Diagramm bei Anwesenheit eines elektrischen Feldes (links)
Die Potentialparabeln liegen unendlich dicht.

Schematische Darstellung der Zustandsdichte (rechts)
Das exponentielle Abklingen der Zustandsdichte im Gap ist links durch die abnehmende Linienstärke der Parabeln gekennzeichnet.

3.3. Diskussion des Ergebnisses

3.3.1. Spezialfälle: Multiphonon-Ladungsträgeremission und reines Tunneln

Für verschwindendes elektrisches Feld geht (3.28) in die Multiphonon-Elektronen-Emissionsrate über. Dazu hat man

$$\lim_{F \rightarrow 0} \mathcal{F}\left(-\frac{\mathcal{E}'}{\hbar\theta_c}\right) = \frac{\theta(\mathcal{E}')\sqrt{\mathcal{E}'}}{\pi\sqrt{\hbar\theta_c}} \quad (3.30)$$

zu beachten /51/ und erhält

$$e_n(T) = e_n^0 e^{-S(2\bar{N}+1)} \sum_{l \leq \frac{-E_B}{\hbar\omega_0}} \left[\frac{\bar{N}+1}{\bar{N}}\right]^{1/2} I_1(2S\sqrt{\bar{N}(\bar{N}+1)}) \times \quad (3.31)$$

$$\times (1+S)^2 \frac{\sqrt{-E_B - l\hbar\omega_0}}{\left[E_B^0 - \frac{m}{\mu_V}(E_B + l\hbar\omega_0)\right]^2}.$$

In der Literatur ist es oft üblich, anstelle von (3.31) Hoch- bzw. Tieftemperatur-Näherungen zu diskutieren, weil dort die modifizierten Besselfunktionen durch einfachere Funktionen ersetzbar sind. Im Falle hoher Temperaturen ($\bar{N} \gg 1$) kann die Linienformfunktion durch eine Gauss-Verteilung approximiert werden

$$L^{ct}(\omega) \approx \sqrt{\frac{\pi\hbar}{S\omega_0 kT}} \exp\left\{-\frac{(\hbar\omega - S\hbar\omega_0)^2}{4S\hbar\omega_0 kT}\right\}, \quad (3.32)$$

die im wesentlichen die Einhüllende der Delta-Peaks von $M_0(\omega)$ (Gleichung (3.21)) darstellt. Eingesetzt in den allgemeinen Ausdruck für die feldfreie Emissionsrate

$$e_n(T) = e_n^0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\theta(-E_B - \hbar\omega)\sqrt{-E_B - \hbar\omega}}{\left[E_B^0 - \frac{m}{\mu_V}(E_B + \hbar\omega)\right]^2} \left(\frac{\omega}{\omega_0} + S\right)^2 L^{ct}(\omega) \quad (3.33)$$

liefert sie das typische Aktivationsverhalten $\exp(-E_{akt}^e/kT)$

der thermischen Rate. (Aktivierungsenergie für Emission ins Leitungsbandminimum $E_{\text{akt}}^e = (E_B + \hbar\omega_0)^2/4\hbar\omega_0$)

Im Tieftemperaturgrenzfall ($\bar{N} \ll 1$) können in (3.31) die Besselfunktionen durch

$$I_p(z) = \frac{1}{p!} \left(\frac{z}{2}\right)^p \quad (p > 0) \quad (3.34)$$

ausgedrückt werden /69/. Das ergibt die einfache Reihe

$$e_n(T) = e_n^0 e^{-S} \sum_{l \geq \frac{E_B}{\hbar\omega_0}} (\bar{N})^l \frac{(1-S)^2}{l!} \frac{\sqrt{\hbar\omega_0 - E_B}}{\left[E_B^0 + \frac{m_c}{\mu_v} (\hbar\omega_0 - E_B)\right]^2} \cdot \quad (3.35)$$

($e_n^0 = \tilde{V}_0^2 r_p \alpha_c^3 / (r_0^3 \hbar S 4\pi^2)$ in (3.31) bis (3.35))

In der Summe über l (als Konsequenz der kontinuierlichen Verteilung der Endzustände) tragen wegen der schnellen Konvergenz nur sehr wenige Glieder, bei extrem tiefen Temperaturen nur das eine Glied mit dem (betragsmäßig) kleinsten l bei. Dann wird die Temperaturabhängigkeit durch den Faktor $\exp(-E_B/kT)$ bestimmt, im Gegensatz zum Einfangprozeß, bei dem \bar{N} durch $(\bar{N}+1)$ auszutauschen ist und die Einfangrate folglich temperaturunabhängig wird.

Bei $T = 0$ verschwindet die Rate der thermisch induzierten Übergänge, und nur der feldinduzierte Beitrag bleibt wirksam. Dieser folgt sofort aus (3.28), denn wegen $\bar{N} = 0$ wird $I_1(0) = \delta_{10}$ und die strahlungslose Emissionsrate nimmt die Form

$$e_n(F) = r_F^0 e^{-S} \frac{\wp_c(-E_B)}{\left[E_B^0 - \frac{m_c}{\mu_v} E_B\right]^2} \quad (3.36)$$

an ($r_F^0 = \tilde{V}_0^2 r_F / (r_0^3 \hbar)$). Nach (3.29) ist $\wp_c(-E_B) \sim \mathcal{F}(E_B/\hbar\theta_c)$; man darf die asymptotische Darstellung für die elektrooptische Funktion benutzen ($E_B \gg \hbar\theta_c$)

$$\mathcal{F}(x) \approx \frac{1}{8\pi x} \exp\left\{-\frac{4}{3} x^{3/2}\right\}, \quad (x \gg 1) \quad (3.37)$$

und erhält in guter Näherung

$$e_n(F) \sim \frac{(\hbar\theta_c)^{3/2}}{E_B} \frac{e^{-4/3(E_B/\hbar\theta_c)^{3/2}}}{\left[E_B^0 - \frac{m_c}{\mu_v} E_B\right]^2}. \quad (3.38)$$

Letzte Formel beschreibt reine Tunnelübergänge zur Energie $-E_B$ im Gap, die für tiefe Niveaus extrem unwahrscheinlich sind. Erst infolge der Phononen-Assistenz werden die Ladungsträger soweit angeregt, daß der feldinduzierte Übergang Bedeutung erlangt. Bei endlichen Temperaturen und Feldern tragen beide Prozesse zur Emissionsrate bei.

3.3.2. Verhältnis von thermisch zu feldinduzierten Übergängen

Um die wichtige Frage zu entscheiden, welcher Kanal der dominante ist, bzw. unter welchen Bedingungen überhaupt einer der beiden Emissionskanäle dominiert, ist vor allem eine Abschätzung der Bloch-Matrixelemente z_{cv} und $B_0^{cv}(\bar{q}_0)$ nötig. Benutzt man den Summensatz für die Oszillatorstärken /21/, so erhält man näherungsweise die Beziehung

$$|z_{cv}|^2 \approx \left(\frac{m}{\mu_v} + 1\right) \frac{\hbar^2}{2mE_g}, \quad (3.39)$$

die für z_{cv} auf eine Länge von der Größenordnung der Bindungslänge d des Materials führt. Erfüllt die Wellenzahl des effektiven Phonons die Bedingung $d|\bar{q}_0| \ll 1$ (langwelliges Phonon), so ist $|B_0^{cv}(\bar{q}_0)| \approx |z_{cv}|^2 q_{0z}^2$, weil man z_{cv} als die Ableitung von $B_0^{cv}(\bar{q}_0)$ nach \bar{q}_{0z} an der Stelle $q_{0z} = 0$ auffassen kann. Für das Verhältnis von feldinduzierter zu thermisch induzierter Rate ergibt sich damit

$$f = \frac{e_n^{\text{feld}}}{e_n^{\text{therm}}} \approx \left[\frac{eF\sqrt{S}\hbar\omega_0}{|g_{q_0}|q_{0z}(E-E')} \right]^2. \quad (3.40)$$

Die Energiedifferenz $E-E'$ ist für Niveaus in der Mitte des Gaps von der Größenordnung $E_g/2$ und wird erst für sehr tiefe Temperaturen wesentlich kleiner, wie im nächsten Unterabschnitt deut-

lich wird. Nimmt man einen mittleren Wert $E_g/4$ an, so folgt im Falle polarer Kopplung ($|g_{q_0}|^2 q_0^2 = 2\pi e^2 \hbar \omega_0^3 (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)/a^3$ /76/, a - Gitterabstand)

$$f = \frac{8S\hbar\omega_0 F^2 a^3}{\pi E_g^2} (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)^{-1}. \quad (3.41)$$

Betrachten wir als Beispiel das EL2-Zentrum in GaAs (Franck-Condon-Energie $S\hbar\omega_0 \approx 0.14$ eV /11/), dann wird hier das Verhältnis $f = 1.43 \times 10^{-14} F^2$ (F in Vcm^{-1}). Erst bei Feldstärken von 10^7Vcm^{-1} würde also der feldinduzierte Beitrag in die Größenordnung des thermisch induzierten kommen. Die im Experiment realisierten maximalen Felder liegen jedoch nur bei einigen 10^5Vcm^{-1} , so daß bei polarer Kopplung der thermische Kanal eindeutig dominiert. Diese Aussage gilt ebenso im Falle der akustischen Deformationspotential-Wechselwirkung ($|g_{q_0}|^2/q_0^2 = D_1^2 \hbar/M\omega_0$ /75/, D_1 - Deformationspotentialkonstante, M - Masse der Elementarzelle), wo sich für den Koeffizienten f

$$f = \frac{16 S(eF)^2 \hbar M \omega_0^3}{q_0^4 E_g^2 D_1^2} \quad (3.42)$$

ergibt. Dasselbe Beispiel ($M = 2.42 \times 10^{-26}$ g, $D_1 \approx 7$ eV) führt hier auf den Zahlenwert $f = 1.24 \times 10^{-14} F^2$ (F in Vcm^{-1}), wenn man eine mittlere Wellenzahl $q_0 \sim \pi/2a$ unterstellt. Bei optischer Deformationspotential-Wechselwirkung erhält man mit $D^{(op)} = 2 \times 10^8 \text{eVcm}^{-1}$ /77/ denselben Wert für f .

Für so tiefe Temperaturen, daß $E - E' \ll S\hbar\omega_0$, d. h. $l \ll S$ gilt, ist nach (3.28) $(E - E')^2/S(\hbar\omega_0)^2 \approx S$, und der Quotient f ist mit dem Faktor $(E_g/4S\hbar\omega_0)^2$ zu multiplizieren, der für das betrachtete Beispiel etwa 10^1 ausmacht. Damit ergibt sich für das maximal mögliche Verhältnis $\max f \approx 10^{-13} F^2$.

Der feldassistierte, thermisch induzierte Prozeß erweist sich demnach bis zu extrem starken Feldern (10^6Vcm^{-1}) als der dominante Übergang. Die betrachteten Modelle der Elektron-Phonon-Kopplung schließen natürlich keine lokalen Moden ein. Ist die "promoting mode" q_0 lokaler Natur, sollte jedoch die generelle Aussage der Dominanz des thermisch induzierten Übergangs beste-

hen bleiben.

3.3.3. Diskussion der Feldabhängigkeit der Emissionsrate

Von praktischem Interesse ist die Frage, aus welchem energetischen Bereich die wesentlichen Beiträge zur Emissionsrate kommen, da nur so der charakteristische Kurvenverlauf $e_n(F)$ über dem gesamten Feldstärkeintervall verstanden werden kann. Um das Wesentliche zu erkennen, wird in Formel (3.25) der Feldeinfluß auf die Störstelle und der feldinduzierte Beitrag vernachlässigt; für die Linienformfunktion wird die näherungsweise gültige Gauss-Verteilung (3.32) benutzt. Dann ergibt sich im isotropen Bändermodell

$$e_n(T, F) = \tilde{e}_n^0 \int_{-\infty}^{\infty} dE' \left[\frac{E' + E_B - \Delta_{FC}}{E' + \frac{\mu}{m_c} E_B^0} \right]^2 \exp \left\{ - \frac{(E' + E_B + \Delta_{FC})^2}{4 \Delta_{FC} kT} \right\} \tilde{f} \left(- \frac{E'}{\hbar \theta_c} \right). \quad (3.43)$$

Die entscheidenden Beiträge zum Integral werden durch das Produkt aus elektrooptischer und e-Funktion, d. h. durch das Produkt aus Tunnelwahrscheinlichkeit und dem wesentlichen Element der thermischen Wahrscheinlichkeit bestimmt. Dagegen ist der erste Faktor unter dem Integral für Niveaus in der Mitte des Gaps nur schwach variabel und kann, wie im vorigen Unterabschnitt getan, beim Maximum von $\varrho_c(E')$ $L(\frac{E_B - E'}{\hbar})$ aus dem Integral gezogen werden. In (3.43) ist die Größe \tilde{e}_n^0 definiert durch

$$\tilde{e}_n^0 = e_n^0 \sqrt{\hbar \theta_c} \left(\frac{\mu}{m_c} \right)^2 \frac{s^2}{\Delta_{FC}^2} \sqrt{\frac{\pi}{4kT\Delta_{FC}}}, \quad (3.44)$$

und Δ_{FC} bezeichnet die Franck-Condon-Energie $\hbar \omega_0$. In Abb. 10 bzw. 11 sind $\varrho_c(E')$ und $L(\frac{E_B - E'}{\hbar})$ sowie das resultierende Produkt für die Parameter des EL2-Zentrums in GaAs bzw. der goldkorrelierten Störstelle in Si aufgetragen (sh. Abschnitt 3.7.). Dabei wurden die im Experiment realisierten maximalen und minimalen Feldstärken berücksichtigt. Generell verschiebt abnehmende Feldstärke die Produktverteilung in Richtung Bandkante, während Abnahme von Temperatur und Kopplungsstärke das Entgege-

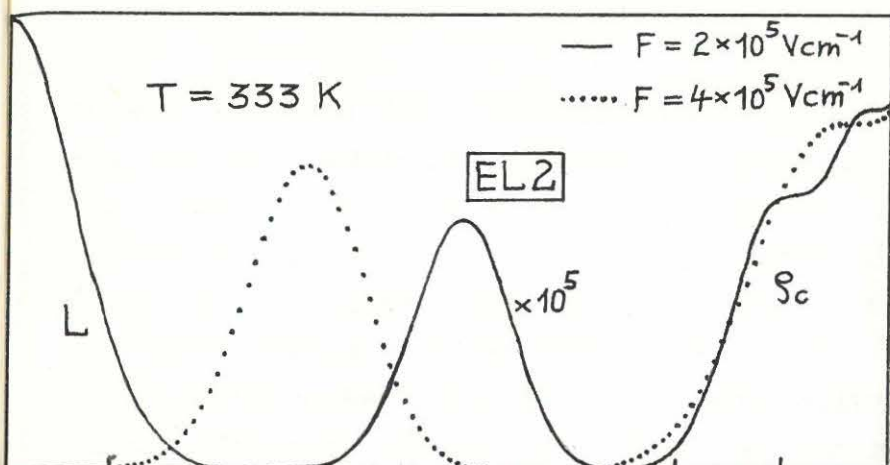
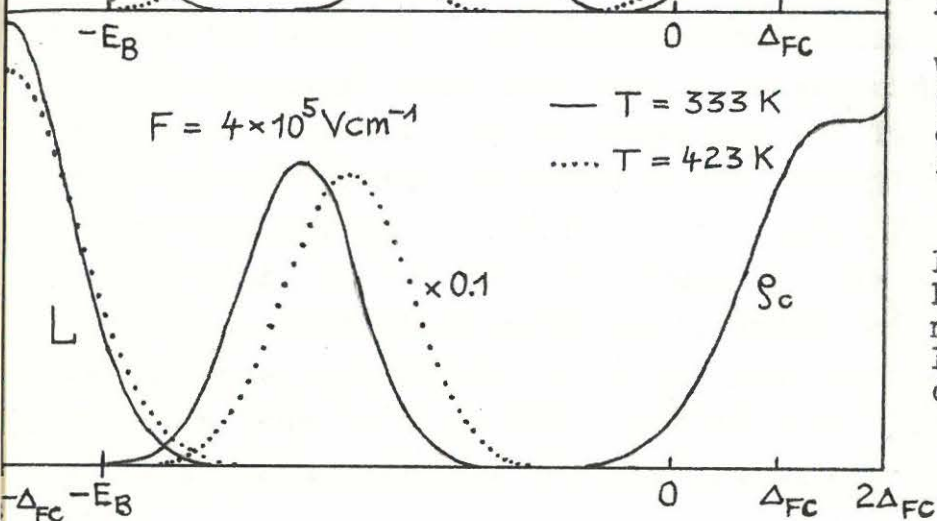


Abb.10 (links)

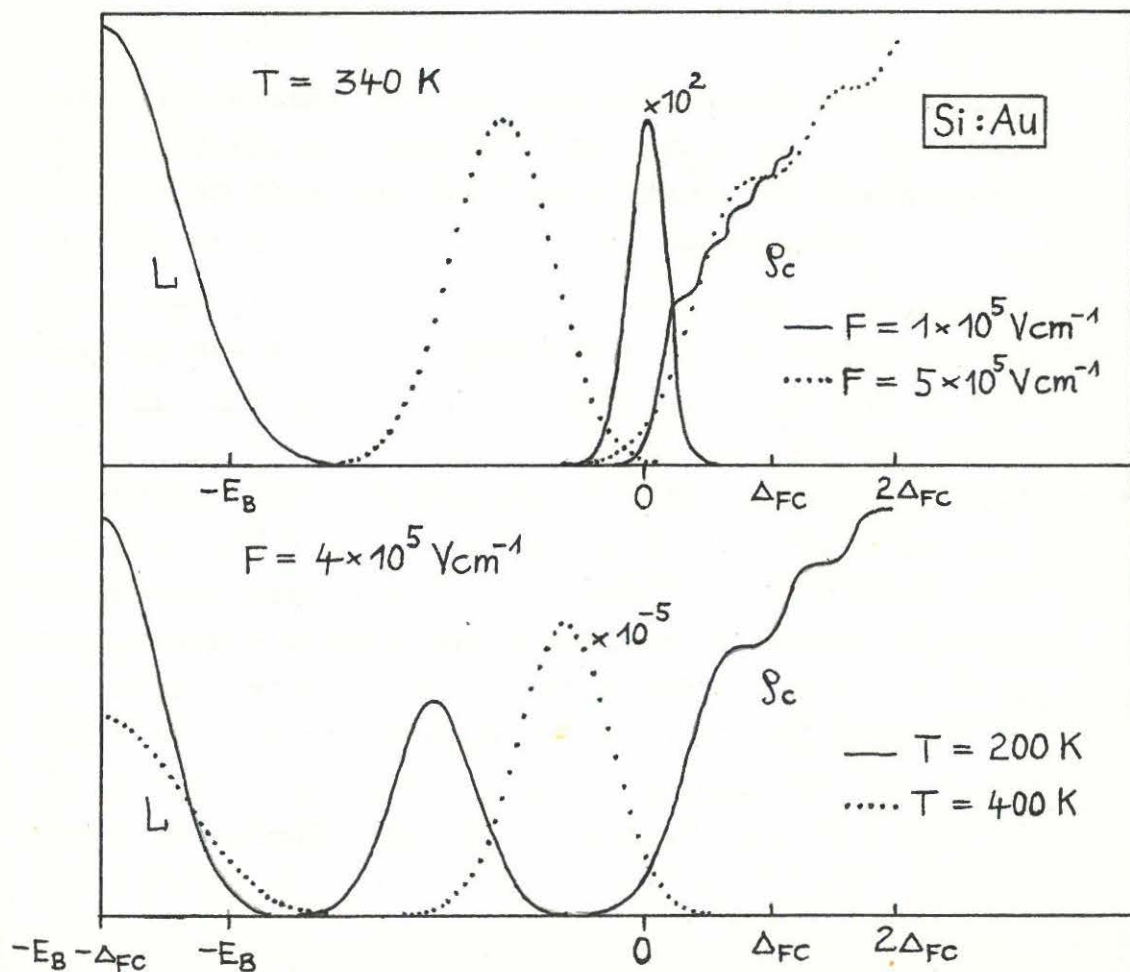
Resultierende Wahrscheinlichkeitsverteilung aus Linienformfunktion (L) und Bandzustandsdichte (ρ_c) für mögliche EL2-Parameter: $\Delta_{FC} = 0.14 \text{ eV}$, $E_B = 0.75 \text{ eV}$, $m_c = 0.066 m_0$.

Abb.11 (unten)



Wahrscheinlichkeitsverteilung für Parameter des Defektes Si:Au: $\Delta_{FC} = 0.17 \text{ eV}$, $E_B = 0.55 \text{ eV}$, $m_c = 0.32 m_0$.

Bei kleinen Feldern bzw. hohen Temperaturen kommen die wesentlichen Beiträge aus der Nähe der Bandkante.



setzte bewirkt. Beim EL2-Zentrum ist die Parameterkonstellation so, daß auch noch im schwächsten Feld (bei höchster Temperatur!) die gesamte Verteilung im energetischen Ausläuferbereich der Bandzustandsdichte liegt, folglich dort die Feldabhängigkeit durch die semiklassische Form der Tunnelwahrscheinlichkeit für die Durchdringung einer Dreiecksbarriere (Formel (3.37)) bestimmt wird. Entsprechend ist in einer Darstellung $\ln e_n(T, F)$ eine typische Krümmung $f(F) \sim -F^{-1}$ über dem gesamten Meßbereich zu erwarten. Im Falle der goldkorrelierten Störstelle in Si (Feld in $\langle 111 \rangle$ -Richtung) gilt dies vor allem wegen der größeren effektiven Masse (die wie eine Verringerung der Feldstärke wirkt) nicht. Hier ist für kleine Feldstärken die Verteilung um die Bandkante herum lokalisiert, und auch bei mittleren Feldstärken trägt dieser Bereich, in dem keine Näherung für die elektrooptische Funktion gilt, wesentlich zur Emissionsrate bei. Im Grenzfall verschwindender Feldstärke, wenn nur noch der Bereich positiver Energien eine Rolle spielt, kann mittels (3.30) leicht gezeigt werden, daß das Maximum der Verteilung auf die Stelle

$$E' = \frac{\Delta_{FC}}{(E_B + \Delta_{FC})} kT \quad (3.45)$$

rutscht. Demnach ist nur ein sehr enges Energieintervall, dessen Mitte lediglich einen Bruchteil $\Delta_{FC}/(\Delta_{FC} + E_B)$ der thermischen Energie kT über der Bandkante liegt, am Zustandekommen des Wertes für die feldfreie Emissionsrate beteiligt.

Die Verschiebung der resultierenden Wahrscheinlichkeitsverteilung im Gap in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke liefert die Erklärung für den Kurvenverlauf von $\ln e_n(F)$ über F . Dieser ist für das Beispiel Si:Au in Abb. 12a von 10^4 bis 10^6 Vcm^{-1} für verschiedene Temperaturen aufgetragen. Bei kleinen Feldstärken ($F < 10^5$ Vcm^{-1}) laufen die Kurven flach in die feldfreien Grenzwerte ein, die Feldabhängigkeit wird durch die Zustandsdichteänderung oberhalb der Bandkante bestimmt. Allerdings werden in diesem Feldstärkebereich Koinzidenzeffekte als Folge des unrealistischen Einmoden-Modells wesentlich. Konstanz von $e_n(F, T_0)$ für $F \rightarrow 0$ bedarf der Berücksichtigung der Phonondispersion, sonst ist sowohl ein erneutes Ansteigen als auch ein starkes

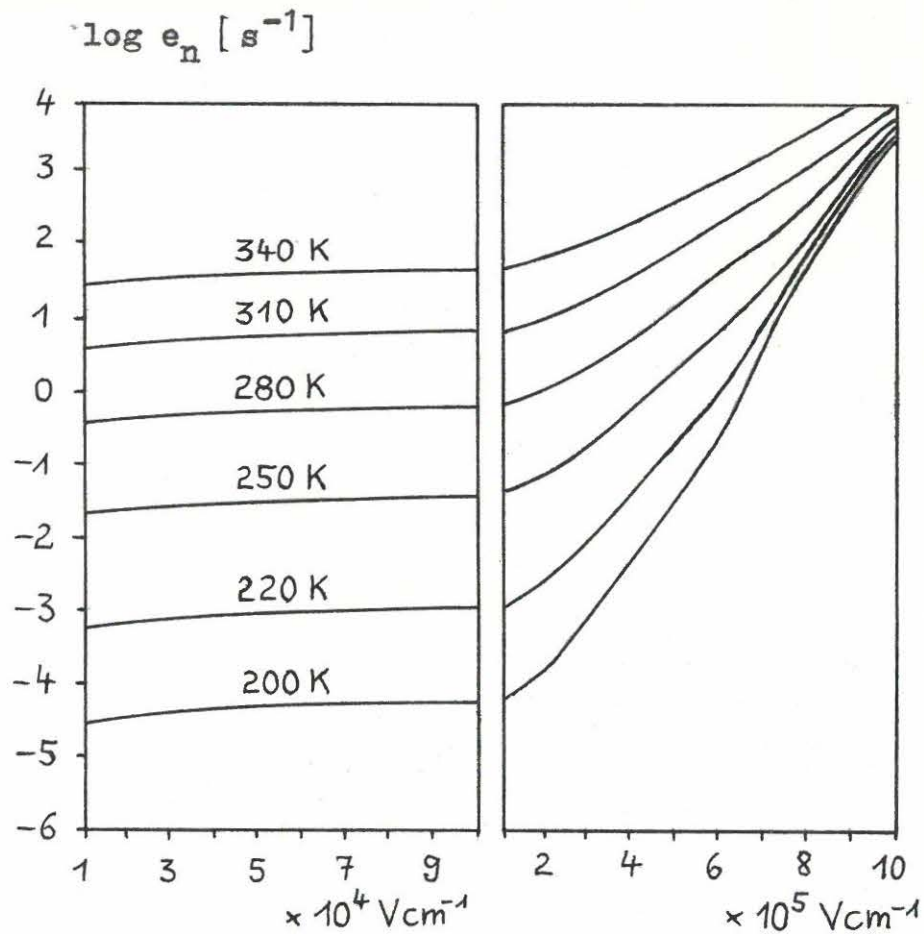


Abb. 12a

Abhängigkeit der thermischen Emissionsrate von der elektrischen Feldstärke.
Numerische Auswertung von (3.28) mit $r_F = 0$.
Benutzt wurden die Parameter von Si:Au.

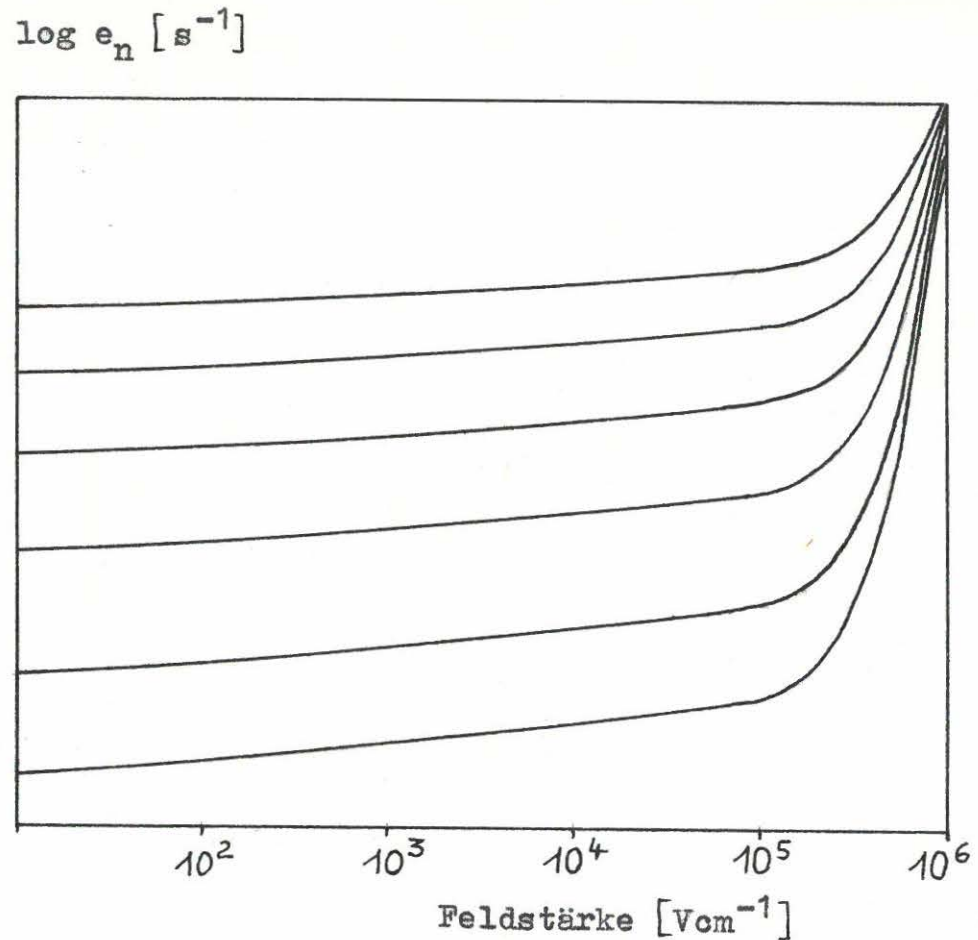


Abb. 12b

Doppeltlogarithmische Darstellung der feldabhängigen Emissionsrate mit den Parametern von Abb. 12a.

Abknicken der Kurven möglich (sh. Abschnitt 3.7.)

Zwischen $F = 1 \times 10^5$ und $F = 7 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ beobachtet man einen Übergangsbereich, der durch die Wanderung des resultierenden Wahrscheinlichkeitspeaks von der Bandkante zum exponentiellen Ausläuferbereich entsteht und durch einen schnell wachsenden Anstieg gekennzeichnet ist. Dem schließt sich der Bereich mit $\ln e_n \sim -F^{-1}$ an, d. h. ab etwa $7 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ kommen alle wesentlichen Beiträge aus dem Ausläuferbereich.

Parameteränderungen, die effektiv wie eine Erhöhung der Feldstärke wirken, können demnach den Anstieg der Kurven sowohl vergrößern als auch vermindern, in Abhängigkeit vom wirksamen Energiebereich.

Auffällig ist, daß die Kurven zu verschiedenen Temperaturen bei hohen Feldstärken eng zusammenlaufen. Auch dies wird anhand Abb. 10 bzw. 11 und Gleichung (3.33) sofort klar. Die Temperaturabhängigkeit im Integranden von (3.33) wird durch die Gauss-Verteilung, d. h. durch einen Faktor $\exp(-\alpha^2/T)$ bestimmt. Bei gegebener Temperaturdifferenz ($T_1 > T_2$) wird das Verhältnis der beiden Integranden mit den Temperaturen T_1 und T_2 gleich $\exp[\alpha^2(1/T_2 - 1/T_1)]$. Es ist um so kleiner, je kleiner die in α enthaltene Energiedifferenz, d. h. je tiefer die entscheidenden Beiträge von E' im Gap liegen, folglich je größer die elektrische Feldstärke ist.

3.4. Anisotropieeffekte der Emissionsrate infolge Bandanisotropie

Besonders im Hinblick auf Silizium ist die Frage von Bedeutung, wie sich indirektes Gap und anisotrope Bandstruktur auf die elektronische Übergangsrate auswirken und welche Modifikation die strahlungslose Emissionsrate in diesem Fall erfährt. Zu vermuten ist, daß bei langgestreckten Energie-Ellipsoiden die Emissionsrate stark von der Richtung des angelegten Feldes abhängt.

An die Stelle der Bandfunktion (A1) tritt, wenn φ den Winkel zwischen elektrischem Feldvektor und der Rotationsachse des Energie-Ellipsoids und \bar{k}_0 die Lage des betrachteten Talminimums

bezeichnet, die normierte Lösung der Gleichung (2.33b)

$$\begin{aligned} \phi_{E' k_{\perp 1} k_{\perp 2}}^c(\bar{x}) &= \frac{\sqrt{eF}}{2\pi\hbar\theta_{\parallel}} \exp\left[ixk_{\perp 1} + iy(k_{\perp 2} - k_{o\perp}) - iz\beta k_{\perp 2}\right] \times \\ &\times \text{Ai}\left(\frac{E^c - E' - eFz}{\hbar\theta_{\parallel}}\right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Dabei ist $\theta_{\parallel}^3 \sim m_{\parallel}^{-1}$ und

$$E_{\perp}^c \equiv \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{k_{\perp 1}^2}{m_t} + \frac{(k_{\perp 2} - k_{o\perp})^2}{m_{\perp}} \right\}, \quad \frac{1}{m_{\parallel}, m_{\perp}} = \frac{1}{m_{t,1}} \sin^2 \vartheta + \frac{1}{m_{1,t}} \cos^2 \vartheta, \quad (3.47a)$$

$$\beta = \frac{m(m_{\perp} - m_t) \sin \vartheta \cos \vartheta}{m_t m_{\perp}} \quad (3.47b)$$

($m_{1,t}$ - longitudinale und transversale effektive Masse). Beschränkt man sich wieder auf einen akzeptorartigen Defekt, so nimmt mit der Näherung $m_{\parallel}, m_{\perp} \ll \mu_v$ (starke Lokalisation) die elektronische Übergangsrate die Form

$$D(E, E') = \tilde{v}_o^2 \frac{\mathcal{S}_t(\tilde{E}) \mathcal{S}_c(E')}{\left[E' \frac{m_{\perp}}{\mu_v} + \tilde{E}\right]^2} \quad (3.48)$$

an. Die Änderungen, verglichen mit dem isotropen Fall, bestehen in der Ersetzung $m_c \rightarrow m_{\perp}$ im Nenner und in der Modifikation der Bandzustandsdichte (3.29), die jetzt die Gestalt

$$\mathcal{S}_c(E') = \frac{\sqrt{8m_t m_{\perp} m_{\parallel}} \sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}}{4\pi\hbar^3} \mathcal{F}\left(-\frac{E'}{\hbar\theta_{\parallel}}\right) \quad (3.49)$$

hat. Da die Abhängigkeit von \tilde{k}_o nur in der Kombination $k_{\perp 2} - k_{o\perp}$ eingeht, fällt sie wegen der Annahme unendlich ausgedehnter parabolischer Bänder und der abschließenden k_{\perp} -Integration heraus. Die Ableitung von (3.48) ist in Anlage 3 skizziert.

Der wesentliche Effekt einer anisotropen Bandstruktur ist demnach das Auftreten der Masse in Feldrichtung, die sich als Funktion des Winkels ϑ drastisch ändern und damit zu einer starken Variation der Tunnelwahrscheinlichkeit Anlaß geben kann. Die Formel (3.25) für die Emissionsrate mit dem Ausdruck (3.48) gilt jedoch nur für Übergänge in ein bestimmtes Tal; um die totale

Rate zu erhalten, hat man über alle Täler zu summieren. Allerdings werden die Beiträge der Täler mit der kleinsten wirksamen effektiven Masse die der übrigen Täler in der Regel um Größenordnungen übertreffen.

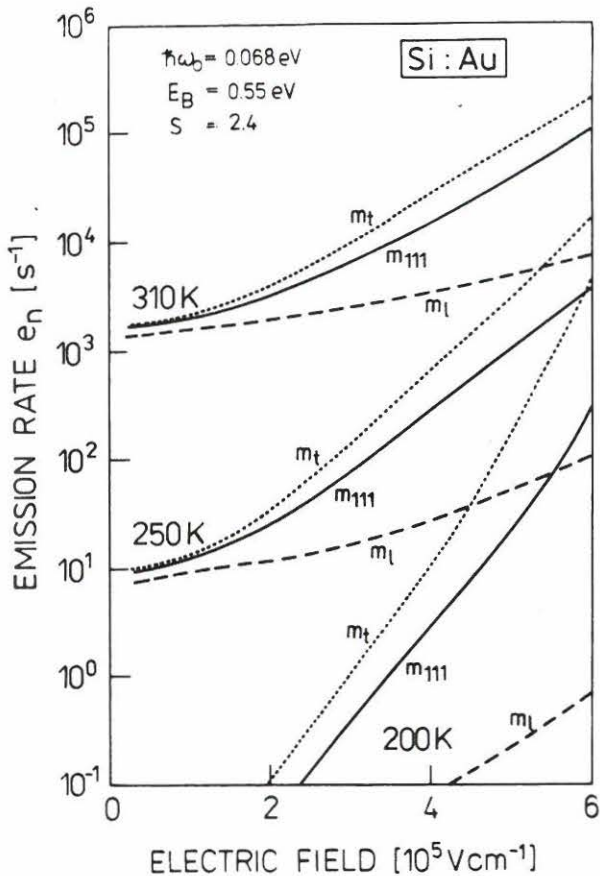


Abb. 13

Anisotropie der Emissionsrate des goldkorrelierten Akzeptorniveaus in Si

Parameter: $m_t = 0.19 m_0$
 $m_l = 0.92 m_0$
 $m_{111} = 0.258 m_0$

Abb. 13 zeigt die zu erwartende Anisotropie der Emissionsrate am Beispiel des goldkorrelierten Akzeptorniveaus in Silizium. Die transversale ($\langle 100 \rangle$), longitudinale und die Masse in $\langle 111 \rangle$ -Richtung, d. h. $m_t = 0.19 m_0$, $m_l = 0.92 m_0$ und $m_{111} = 0.258 m_0$ sind benutzt worden. Im Feldstärkebereich einiger 10⁵ Vcm⁻¹ ergeben sich starke Änderungen des Kurvenverlaufs, die natürlich für tiefe Temperaturen am ausgeprägtesten sind.

Der Anisotropieeffekt wird wiederum anhand von Abb. 11a verständlich: Um so größer die Masse, d. h. um so kleiner die elektrooptische Energie, je weiter rückt die resultierende Gesamtwahrscheinlichkeitsverteilung bei gegebener Feldstärke zur Bandkante, und um so flacher wird folglich der Kurvenverlauf.

3.5. Emissionsrate bei Ankopplung an mehr als eine Phononmode

Die in Abschnitt 3.2. benutzte Einschränkung, daß die Gitterkopplung nur mit einer effektiven Mode \bar{q}_0 erfolgt, ist in enger Korrelation zum Experiment zu sehen, stellt jedoch keine notwendige Beschränkung für die Theorie dar. Von praktischem Interesse ist besonders der Fall von zwei deutlich dominierenden Moden /47/. Die strahlungslose Emissionsrate kann jedoch auch für den allgemeinen Fall von n Moden in geschlossener Form angegeben werden. In Anlage 4 sind die wichtigsten Schritte der Rechnung für den Fall $n = 2$ dargestellt; die Verallgemeinerung für beliebiges n liegt auf der Hand. (Die Rechnung für den allg. Fall ist von D. Suisky explizit durchgeführt worden.)

Anstelle von (3.23) erhält man bei Ankopplung an zwei Moden

$$\sum_{q, q \neq 1, 2} f_q(tc) f_q^*(tc) R_{qq}^{\overline{EE}'}(\omega) = 2\pi\hbar \sum_{l_1, l_2 = -\infty}^{\infty} \left| f_1 \sqrt{S_1} \left(1 + \frac{l_1}{S_1}\right) + f_2 \sqrt{S_2} \left(1 + \frac{l_2}{S_2}\right) \right|^2 \exp\left\{-S_1(2\bar{N}_1 + 1) - S_2(2\bar{N}_2 + 1)\right\} \left[\frac{\bar{N}_1 + 1}{\bar{N}_1}\right]^{l_1/2} \times \left[\frac{\bar{N}_2 + 1}{\bar{N}_2}\right]^{l_2/2} I_{l_1}(2S_1\sqrt{\bar{N}_1(\bar{N}_1 + 1)}) I_{l_2}(2S_2\sqrt{\bar{N}_2(\bar{N}_2 + 1)}) \times \delta\left[E' - E + (S_1 + l_1)\hbar\omega_1 + (S_2 + l_2)\hbar\omega_2\right]. \quad (3.50)$$

Die Mitnahme jeder weiteren Mode ergibt drei neue Parameter f_r , S_r , $\hbar\omega_r$, so daß man allgemein $3n + 1$ Anpaßparameter zur Verfügung hat. Aus Formel (3.50) geht eindeutig hervor, wie sich der Ausdruck bei beliebiger Modenzahl modifiziert, so daß dieser nicht explizit angegeben werden muß. Benötigt werden dann allerdings neben den Dispersionsgesetzen ω_q auch Modelle für die Dispersionsgesetze der diagonalen (S_q) und nichtdiagonalen (f_q) Kopplung unter Einschluß lokaler Moden.

Praktisch realisierbar (mit vertretbarem numerischen Aufwand) ist der Fall $n = 2$. Haben die beiden Moden unterschiedliche Symmetrie, so daß z. B. ω_1 die Frequenz der promoting mode und

ω_2 die der accepting mode ist, folglich $f_2(tc) = 0$ und $S_1 = 0$ in (3.50) gesetzt werden darf, ergibt sich ein wesentlicher Unterschied zum Einmoden-Modell. Dann liefert nämlich der Grenzübergang $S_1 \rightarrow 0$ in (3.50) für den thermisch induzierten Anteil der Emissionsrate den Ausdruck

$$e_n(T, F) = \frac{\tilde{v}_v^2}{h r_0^3} e^{-S_2(2\bar{N}_2 + 1)} \sum_1 \left[\frac{\bar{N}_2 + 1}{\bar{N}_2} \right]^{1/2} I_1(2S_2 \sqrt{\bar{N}_2(\bar{N}_2 + 1)}) \times$$

$$\times \left\{ \bar{N}_1 \frac{\rho_c(\hbar\omega_1 - E_B - \hbar\omega_2)}{\left[\frac{m_c}{\mu_v}(\hbar\omega_1 - E_B - \hbar\omega_2) + E_B^0 \right]^2} + (\bar{N}_1 + 1) \frac{\rho_c(-E_B - \hbar\omega_2 - \hbar\omega_1)}{\left[\frac{m_c}{\mu_v}(-E_B - \hbar\omega_2 - \hbar\omega_1) + E_B^0 \right]^2} \right\} \quad (3.51)$$

Dieser unterscheidet sich von (3.28) durch das Fehlen des Faktors $(1 + S)^2/S$ unter der Summe. Stattdessen verursacht die promoting mode Einphonon-Prozesse: Die Bindungsenergie ist um die Energie des absorbierten Phonons abgesenkt bzw. um die Energie des emittierten Phonons vergrößert. Bei echter elektronischer Anregung ist letzter Prozeß überhaupt erst durch das Vorhandensein von mehr als einer Mode denkbar: Die Energieerhaltung wird durch einere größere Zahl von Schwingungsquanten der accepting mode realisiert. In der Regel (außer bei sehr tiefen Temperaturen bzw. sehr kleinem ω_1) wird der erste Beitrag dominieren. Als Resultat ergibt sich ein stark geänderter Kurvenverlauf der feldabhängigen Emissionsrate. Sowohl die Anstiege als auch der gegenseitige Abstand der Kurven zu verschiedenen Temperaturen unterscheiden sich beträchtlich vom Ergebnis des Einmoden-Modells. Der numerische Vergleich von (3.28) und (3.51) ist in Abb. 14 graphisch dargestellt. Als Beispiel sind mögliche Parameter des EL2-Zentrums (GaAs) verwendet worden.

3.6. Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Bindungsenergie

Die für das DLTS-Experiment generell benötigte Annahme, daß die thermisch angeregten Übergänge mit keiner zu großen Abweichung

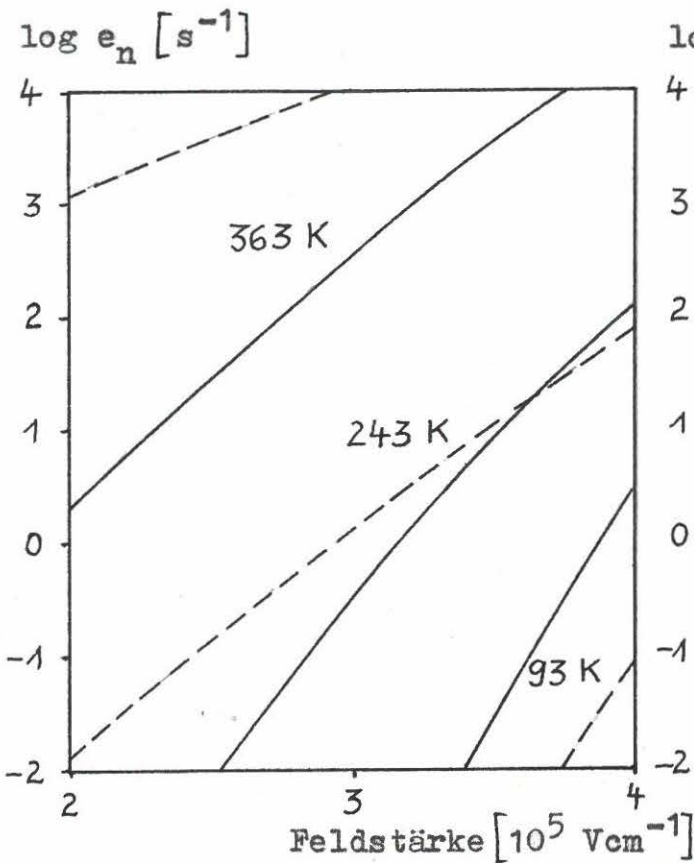


Abb. 14a

Vergleich der Emissionsrate im Ein- und Zweimoden-Modell für die Parameter $E_B = 0.82$ eV, $m_c = 0.066 m_0$.

ausgezogene Kurve: Eine Mode
 $\hbar\omega_0 = 0.033$ eV, $S = 3.6$

gestrichelte Kurve: Zwei Moden
 $\hbar\omega_1 = 0.033$ eV, $S_1 = 3.6$
 $\hbar\omega_2 = 0.048$ eV, $S_2 = 2.5$
 $f_1/f_2 = 1$

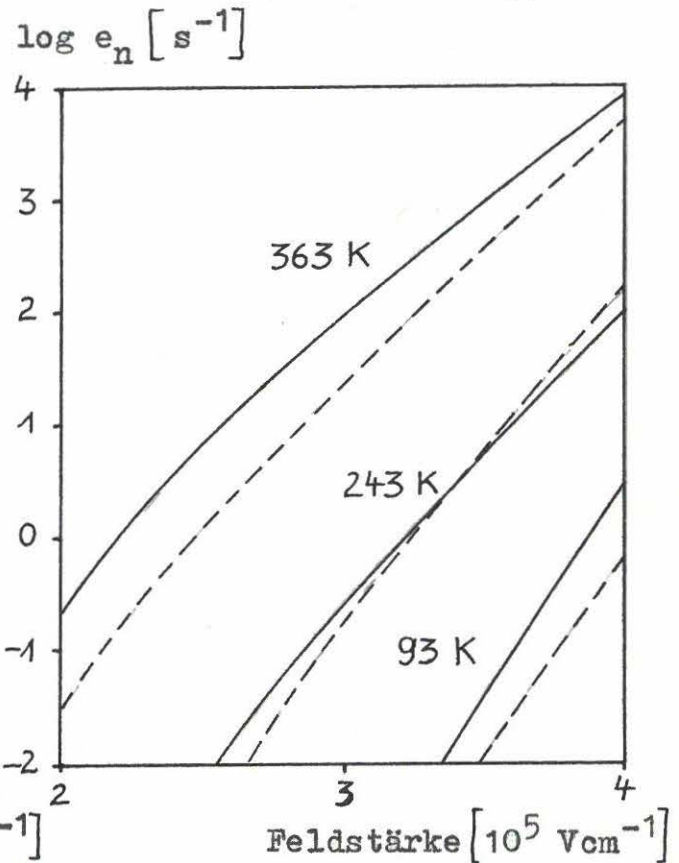


Abb. 14b

Vergleich der Emissionsrate im Einmoden-Modell und im Zweimoden-Modell mit promoting und accepting mode für die Parameter $E_B = 0.75$ eV, $m_c = 0.066 m_0$

ausgezogene Kurve: Eine Mode
 $\hbar\omega_0 = 0.02$ eV, $S = 5$

gestrichelte Kurve:
 $\hbar\omega_1 = 0.033$ eV, $S_1 = 0$ (prom.)
 $\hbar\omega_2 = 0.02$ eV, $S_2 = 5$ (acc.)

Die Anpassung erfolgte in beiden Modellen an ein und denselben Punkt.

vom thermodynamischen Gleichgewicht verbunden sind, gestattet die Verwendung der Relation der detaillierten Balance

$$e_n = c_n N_c \exp \left\{ \ln(g_0/g_1) - E_B/kT \right\}, \quad (3.52)$$

die aus der Ratengleichung (3.1) hervorgeht, wenn man sich auf nichtentartete Halbleiter beschränkt. g_0 und g_1 sind die Entartungsgrade des Energieniveaus für die unbesetzte bzw. besetzte

Störstelle, N_c ist die effektive Leitungsbandzustandsdichte ($E_c \equiv 0$). Die Bindungsenergie kann durch Auftragen von $\log e_n$ über $1/T$ bestimmt werden, falls die Temperaturabhängigkeit des Einfangkoeffizienten $c_n(T)$ und der effektiven Zustandsdichte bekannt sind. Erfolgt die Auswertung im Limes $T \rightarrow \infty$, erscheint es gerechtfertigt, für $c_n(T)$ das Hochtemperatur-Aktivationsverhalten zu benutzen, d. h. $c_n(T) \sim \sqrt{T} \exp(-E_{\text{akt}}^c/kT)$ (E_{akt}^c - Einfang-Aktivierungsenergie). Stellt man noch $N_c \sim T^{3/2}$ in Rechnung, wird $e_n(T) \sim T^2 \exp(-E_{\text{akt}}^c/kT)$, d. h. die aus dem Arrheniusplot extrapolierte Tiefe des Störstellenniveaus ist gerade die Aktivierungsenergie des Emissionsprozesses, die nur bei vernachlässigbarem E_{akt}^c mit der Traptiefe E_B identisch ist. Wie jedoch z. B. aus Formel (3.33) und der Diskussion in Abschnitt 3.3.3. hervorgeht, ist im Falle von Term-Band-Prozessen ein Aktivationsgesetz der Form (3.52) aus der dargestellten mikroskopischen Theorie analytisch nicht ableitbar, vielmehr folgt aus (3.33) und Gleichung (3.45) eine abgeschätzte effektive Aktivierungsenergie des Emissionsprozesses

$$E_{\text{akt}}^e \approx \left[E_B + \Delta_{\text{FC}} \left(1 + \frac{kT}{E_B + \Delta_{\text{FC}}} \right) \right]^2 / 4\Delta_{\text{FC}}, \quad (3.53)$$

die wegen der im Energie-Nullpunkt verschwindenden Bandzustandsdichte größer ausfällt als bei einem Intrazentren-Übergang.

Ein zweiter Aspekt, den die phänomenologische Shockley-Hall-Read-Statistik bei Verwendung von Fermi-Dirac-Verteilungsfunktionen nicht liefert, ist die Temperaturabhängigkeit der Traptiefe E_B . Bei einer konsequent thermodynamischen Betrachtung ergibt sich anstelle von (3.52) /79, 80, 81/

$$e_n = c_n N_c e^{-\frac{\Delta G_n}{kT}} = c_n N_c e^{\ln(g_0/g_1)} e^{\frac{\Delta S_{\text{np}}}{k}} e^{-\frac{\Delta H_n}{kT}}. \quad (3.54)$$

ΔG_n und ΔH_n sind die frei Enthalpie und die Enthalpie beim Ladungsträgerübergang, ΔS_{np} ist der vibronische Beitrag der dabei auftretenden Entropieänderung. Der Anstieg in der Arrhenius-Darstellung wird demnach (nach T^2 -Korrektur) durch die Summe aus Einfang-Aktivierungsenergie und Enthalpie ΔH_n bestimmt, die gemäß $\Delta H_n = \Delta G_n + \Delta S_{\text{np}} T + kT \ln(g_0/g_1)$ temperaturabhängig ist. Der Ver-

gleich von (3.52) und (3.54) zeigt, daß $E_B = \Delta G_n + kT \ln(g_0/g_1) = \Delta H_n - \Delta S_{np} T$ gilt. Das Resultat optischer Messungen ist ΔG_n (Null-Phonon-Linie); mißt man bei verschiedenen Temperaturen, kann E_B und g_0/g_1 bestimmt werden /79/. Der phononische Entropiebeitrag kann durch unabhängige thermische Messung von Einfangkoeffizient und Emissionsrate ermittelt werden, denn $\Delta S_{np}/k$ ist die Verschiebung gegenüber $\ln c_n(T)N_c(T)g_0/g_1$ am Punkt $T = \infty$.

Der für die vorliegende Theorie benötigte Parameter E_B ergibt sich also aus der im DLTS-Experiment bestimmten Enthalpie ΔH_n (die oft als "Aktivierungsenergie" bezeichnet wird) gemäß $E_B = \Delta H_n - \Delta S_{np} T$. Für den im nächsten Abschnitt diskutierten goldkorrelierten Akzeptor in Si fand man $\Delta H_n = 0.553$ eV und totale Entropieänderungen $\Delta S_n = \Delta S_{np} + k \ln(g_0/g_1)$ von $(3.0 \dots 3.87)k$ (250 K)/82/, die jedoch viel größer als die Entropie des Silizium-Gaps, d. h. die mit der direkten Bildung eines Elektron-Loch-Paares verbundene Entropieänderung $\Delta S_{cv} = 2.7k$ sind /81,82/. Auch die Frage des level-pinnings des Gold-Akzeptor-Niveaus wird in der Literatur unterschiedlich beantwortet. In der vorliegenden Arbeit gelang im Rahmen des Einmoden-Modells die beste Anpassung an Emissionsratenmessungen von Irscher et al. /15/ unter der Annahme, daß das Niveau sowohl mit Valenz- als auch mit Leitungsband korreliert ist und eine Temperaturbewegung mit $\Delta S_{np} = (1.3 \dots 2.7)k$ vollführt.

Physikalisch rührt der Entropiezuwachs des Gitters beim Emissionsprozeß von einer Verbreiterung des Phononenspektrums her (mode-softening /81/). Die Abhängigkeit der Frequenz des effektiven Phonons von der Besetzung des elektronischen Niveaus (Frequenzeffekt) wird also im Einmoden-Modell in einer effektiven Weise durch einen vibronischen Beitrag zur Entropieänderung erfaßt. Die Aufteilung der Entropieänderung ΔS_n beim Ladungsträgerübergang in einen elektronischen und einen vibronischen Anteil ist problematisch und i. a. nur im Falle schwacher Elektron-Phonon-Kopplung praktikabel /86/.

3.7. Vergleich mit experimentellen Resultaten

3.7.1. Bestimmung empirischer Zentren-Parameter durch Anpassung an feldabhängige Emissionsraten

Im Einmoden-Modell enthält der Ausdruck für die feld- und temperaturabhängige Emissionsrate $e_n(T, F)$ vier Anpassparameter, wenn nur der thermisch induzierte Anteil berücksichtigt wird: den die absolute Größe bestimmenden Vorfaktor e_n^0 ($\text{eV}^{-2}\text{sec}^{-1}$), die Traptiefe (Bindungsenergie) E_B , die effektive Phononenergie $\hbar\omega_0$ und den Huang-Rhys-Faktor S . Die mikroskopischen Zentrenparameter S , $\hbar\omega_0$, E_B dienen neben dem integralen Parameter e_n^0 und anderen (wie optischer Streuquerschnitt, Löcheremissionsrate, Einfangkoeffizient), zur Charakterisierung und Klassifikation der Defekte. Alle vier Parameter können durch Anpassung der theoretischen Kurvenschar $e_n(T, F)$ an Meßpunkte eindeutig bestimmt werden, falls Meßkurven zu verschiedenen Temperaturen vorliegen.

Die Anpassung an einen beliebigen Punkt $e_n(T_0, F_0)$ liefert e_n^0 . Vom experimentell untersuchten Feldstärke- und Temperaturintervall sowie der Bandmasse hängt es ab, wie sich die Variation der übrigen drei Parameter auf den Temperaturabstand und den lokalen Anstieg der Kurven auswirkt. In /11/ wurde im Zusammenhang mit der Interpretation der Meßergebnisse am EL2-Zentrum (GaAs) folgende Prozedur vorgeschlagen: Bei gegebener Bindungsenergie wird die Franck-Condon-Energie $\Delta_{FC} = S\hbar\omega_0$ variiert, bis der Anstieg der Kurve für eine mittlere Temperatur optimal ist; dann wird für feste Feldstärkewerte S bzw. $\hbar\omega_0$ bei konstanter Franck-Condon-Energie variiert, so daß die Temperaturabhängigkeit richtig reproduziert wird. In Abb. 15 ist am Beispiel von EL2 demonstriert, wie in der vorliegenden Arbeit vorgegangen wurde (E_B wurde mit angepaßt). E_B ist in Abb. 15 als temperaturunabhängig vorausgesetzt. Man erkennt, daß nur die Variation der Franck-Condon-Energie die richtige Wiedergabe der Temperaturabhängigkeit bewirkt (Abb. 15a). Mit dem in /11/ angegebenen Wert $\Delta_{FC} = 0.14$ eV ist auch bei Änderung von E_B keine Anpassung möglich (Abb. 15c). Als optimaler Wert ergibt sich folglich $\Delta_{FC} = (100 \pm 2)$ meV. Ändert man nun die Bindungsenergie (Abb. 15d) durch Optimierung der Anstiege der einzelnen Kurven, erhält man $E_B = (0.76 \pm 0.01)$ eV. Schließlich wird aus Abb. 15b deutlich, daß eine starke Variation von S und $\hbar\omega_0$ bei konstantem $\Delta_{FC} = 0.1$ eV nur geringfügige Ände-

$\log e_n [s^{-1}]$

64

Abb. 15a

Variation der Franck-Condon-Energie Δ_{FC} bei konstanter Bindungsenergie und Anpassung der 243-K-Kurve an den Punkt (3.6; 1.2)

— $\Delta_{FC} = 138 \text{ meV}$
 - - - $\Delta_{FC} = 118 \text{ meV}$
 - · - $\Delta_{FC} = 100 \text{ meV}$

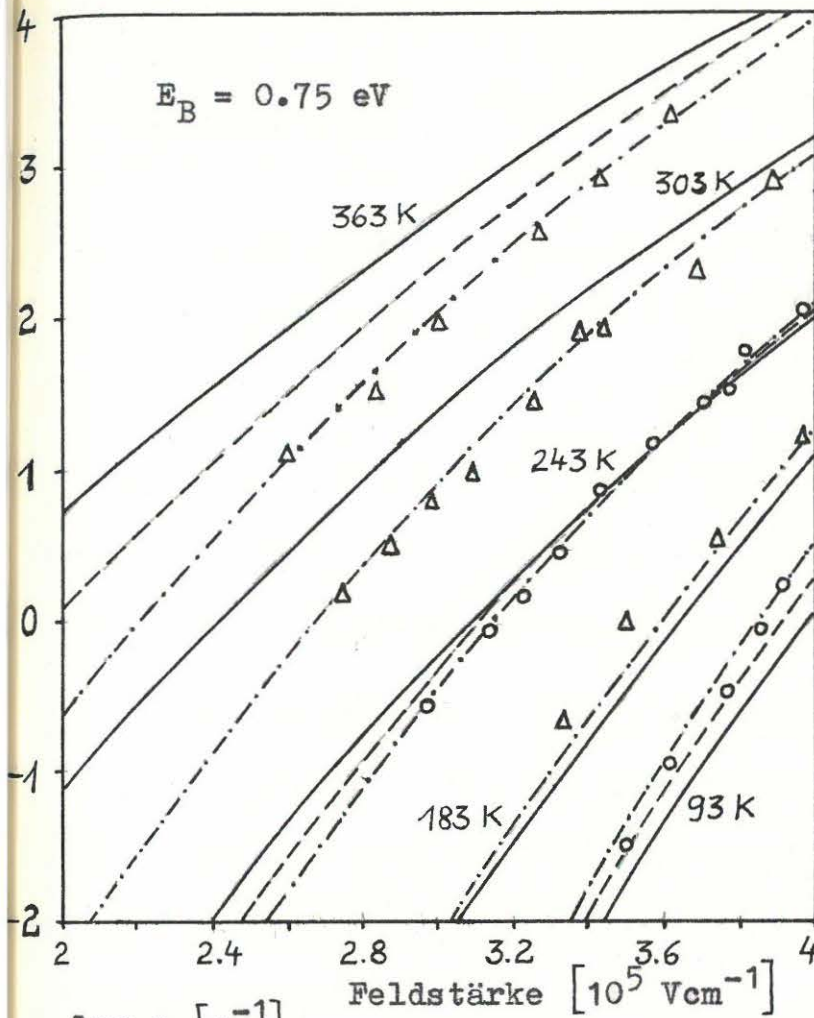


Abb. 15b

Variation der effektiven Phononenergie $\hbar\omega_0$ bei konstanter Franck-Condon-Energie und konstanter Bindungsenergie

- - - $S = 5.0, \hbar\omega_0 = 0.02 \text{ eV}$
 — $S = 6.9, \hbar\omega_0 = 0.0145$
 - · - $S = 9.1, \hbar\omega_0 = 0.011 \text{ eV}$

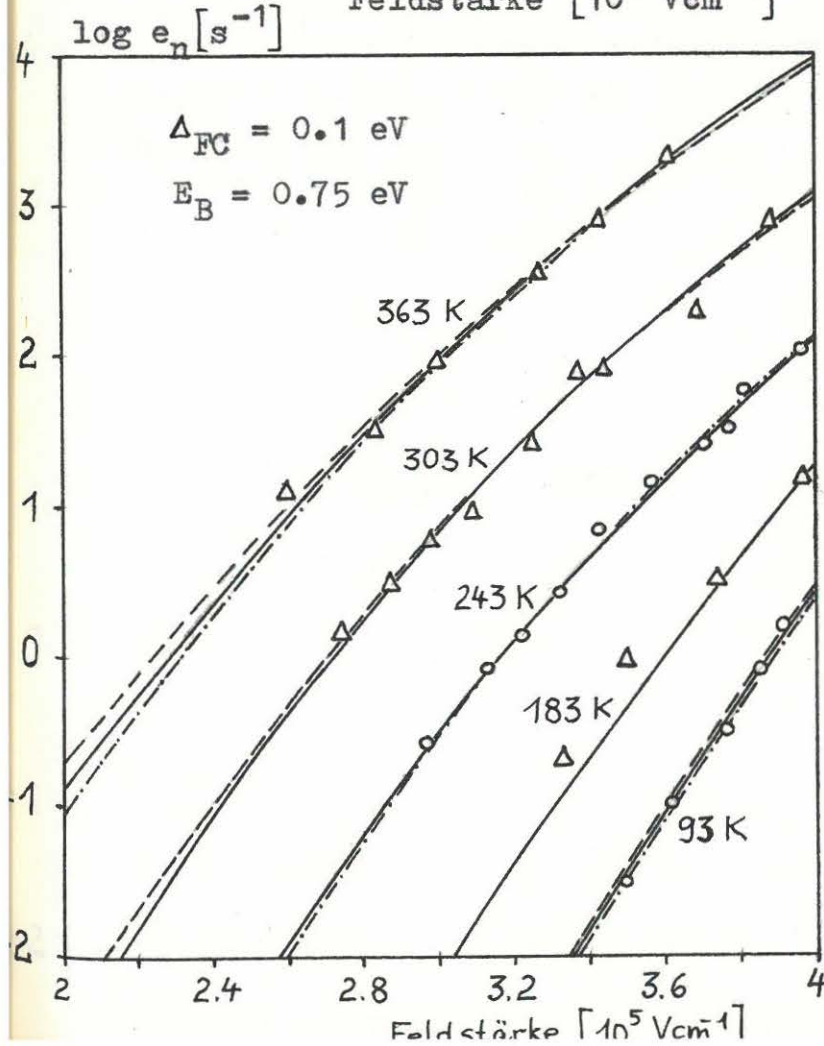


Abb. 15c

Variation der Bindungsenergie bei konstantem S und $\hbar\omega_0$

- $E_B = 0.70 \text{ eV}$
- - - $E_B = 0.75 \text{ eV}$
- · - · $E_B = 0.81 \text{ eV}$

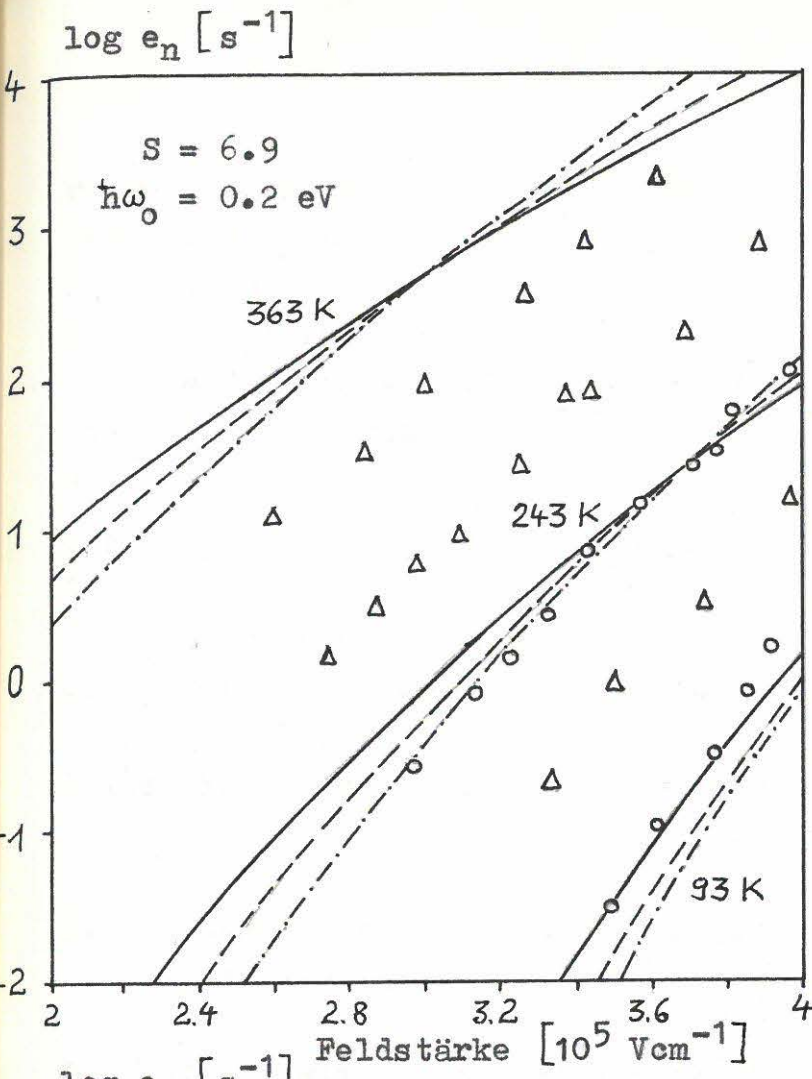
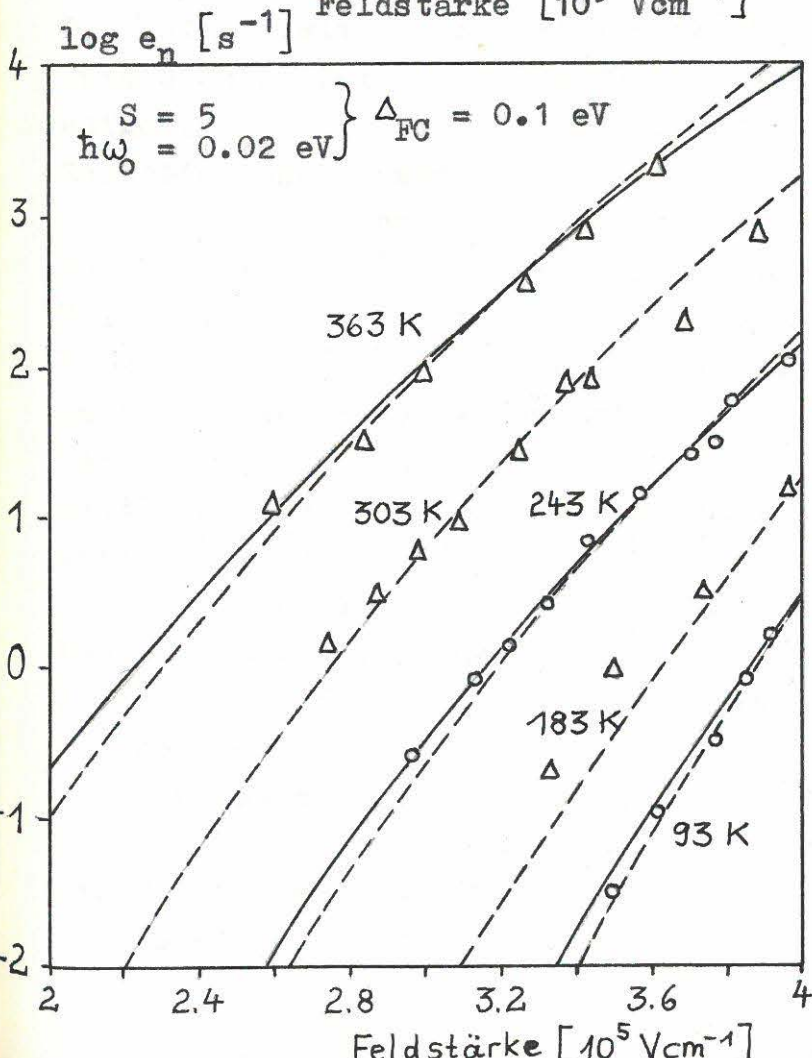


Abb. 15d

Variation der Bindungsenergie bei optimalem S und $\hbar\omega_0$

- $E_B = 0.76 \text{ eV}$
- - - $E_B = 0.80 \text{ eV}$



rungen im Anstieg der Kurven bewirkt. Dies wird sofort aus Formel (3.43) klar, denn in Gauss-Näherung für die thermische Verteilung gehen S und $\hbar\omega_0$ lediglich als Produkt Δ_{FG} ein. Eine befriedigende Anpassung ergibt sich im Bereich $S = 5$, $\hbar\omega_0 = 0.02$ eV bis $S = 10$, $\hbar\omega_0 = 0.01$ eV, wobei der letzte Parametersatz wegen der etwas besseren Anpassung der Temperaturabhängigkeit vorzuziehen ist.

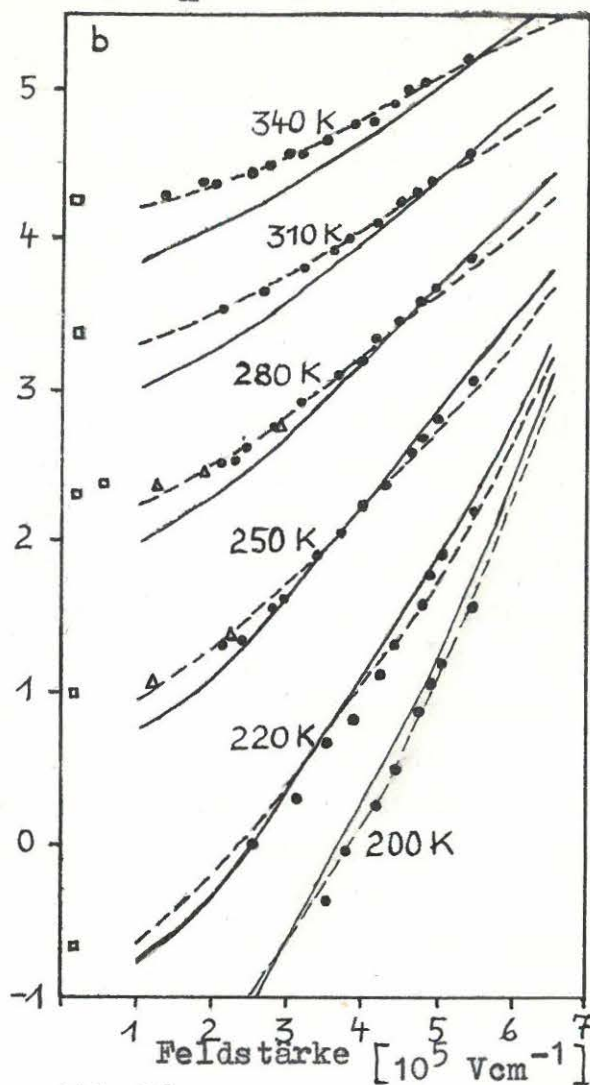
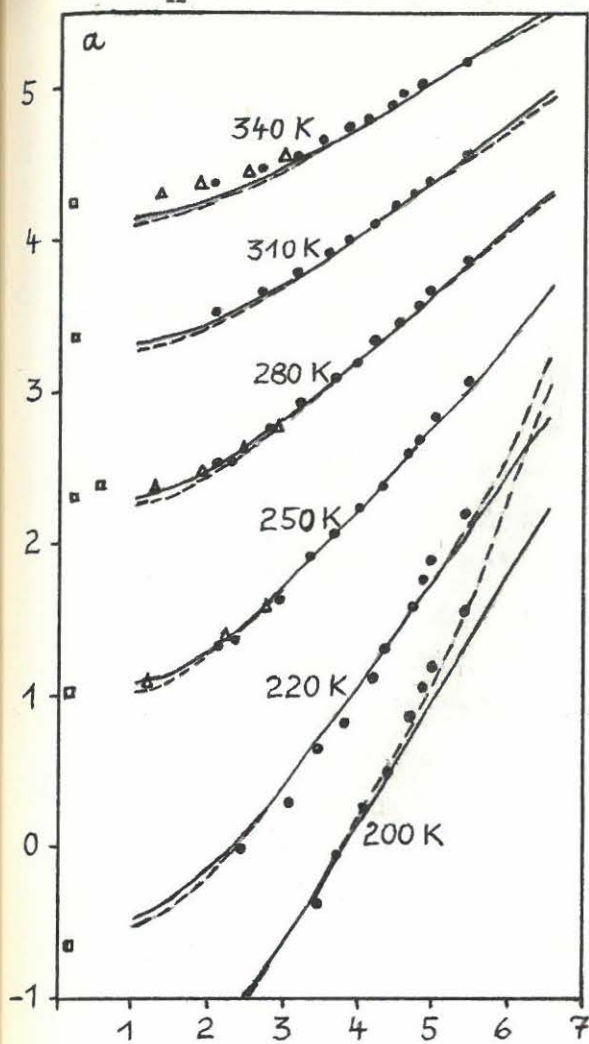
Das Gesagte bezieht sich auf eine konstante Bindungsenergie E_B . Die Zahl der Parameter erhöht sich um jeweils 1, wenn die Temperaturabhängigkeit von E_B berücksichtigt wird ($E_B \rightarrow \Delta H_n, \Delta S_{np}$) und (oder) eine zusätzliche promoting mode mit verschwindender diagonalen Kopplung angenommen wird ($\omega_0 \rightarrow \omega_1, \omega_2$). In beiden Fällen können sich die Parametersätze drastisch ändern.

3.7.2. Numerische Auswertung für die goldkorrelierte Störstelle und das A-Zentrum in Silizium

Die goldkorrelierte Störstelle in Si gehört zu den am intensivsten untersuchten Defekten. Obwohl die genaue Struktur bis heute nicht aufgeklärt werden konnte, scheint klar, daß Si:Au keine einfache Substitutionsstörstelle ist, sondern ein komplizierterer Komplex /82/. Als mögliche Ionisierungsreaktion des Akzeptorniveaus wurde $Au_i V_{Si} \rightarrow Au_i V_{Si}^- + e^+$ vorgeschlagen /82/ (i - interstitial, V - Vakanz). Der thermische Einfangquerschnitt, der die Ladungsträger-Lebensdauer sowohl im stark als auch im schwach dotierten Material bestimmt, zeigt keine Temperaturabhängigkeit /82, 5/, so daß die Temperaturabhängigkeit des Einfangkoeffizienten nur durch die der mittleren thermischen Geschwindigkeit ($\sim \sqrt{T}$) bestimmt wird /82/. Morante et al. /83/ haben durch Anpassung der Tieftemperatur-Näherung für den Einfangkoeffizienten an eigene und Messungen von Lang et al. den Huang-Rhys-Faktor von Si:Au⁻ zu 2.2 ... 2.6 bestimmt und dabei die von Mott et al. /84/ angegebene effektive Phononenergie $\hbar\omega_0 = 0.068$ eV benutzt. Die verschiedenen Varianten der vorliegenden Theorie (temperaturabhängige bzw. -unabhängige Bindungsenergie, Ein- und Zweimoden-Modell) sind zur Anpassung an die detaillierten Messungen der feldabhängigen Emissionsrate des neutralen goldkorrelierten Akzeptors und des neutralen A-Zentrums

in Si von Irmischer et al. /15/ benutzt worden. Da das Feld in $\langle 111 \rangle$ -Richtung anlag, ist $m_{\parallel} = 0.258 m_0$ zu verwenden. Der Enthalpiwert $\Delta H_{\parallel} = 0.553 \text{ eV}$ /82/ stimmt mit dem auch von den meisten anderen Autoren angegebenen Wert überein und wurde ungeändert gelassen.

In Abb. 16 ist die Anpassung im Einmoden-Modell (Formel (3.28), (3.29) mit $r_F = 0$) dargestellt. Mit $S = 2.4$ und $\hbar\omega_0 = 0.068 \text{ eV}$ ergeben sich zu steile Anstiege, die man jedoch mit $m_{\parallel} = 0.32 m_0$ berichtigen kann (Abb 16a). Jedoch stimmen dann nur die Kurven der mittleren Temperaturen gut mit dem Experiment überein- die zu große Bandmasse läßt sich kaum motivieren. Besser ist die Aufgabe des von Morante et al. vorgeschlagenen S-Parameters; schon eine Erhöhung auf $S = 2.8$ ermöglicht die Verwendung der korrekten Bandmasse (gestrichelte Kurve in Abb. 16a). Darüber hinaus wird der Verlauf der Kurven im Bereich hoher Feldstärken gut reproduziert, der Abstand der Nullfeld-Werte bleibt unbefriedigend. Dies kann auch nicht mit Koinzidenzeffekten erklärt werden, die ab etwa $F \leq 1.5 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ einsetzen. Einen ähnlichen Effekt wie die Erhöhung des Huang-Rhys-Faktors hat die Einführung einer temperaturabhängigen Bindungsenergie. Allein eine solche ist in der Lage, den Abstand der Nullfeld-Werte bei gleichzeitiger Bewahrung einer optimalen Anpassung bei höheren Feldstärken in Übereinstimmung mit dem Experiment zu bringen. Abb. 16b zeigt die Kurvenscharen für die Extremwerte der Entropieänderung $\Delta S_{np} = 0$ und $\Delta S_{np} = \Delta S_{cv} = 2.7k$. Mit $S = 2.4$, d. h. $\Delta_{FC} = 163 \text{ meV}$ kann eine gute Anpassung (im Einmoden-Modell) mit $\Delta S_{np} = (1.3 \dots 2.7)k$ erreicht werden. In Abb. 16c sind bei konstantem $\Delta_{FC} = 163 \text{ meV}$ S und $\hbar\omega_0$ leicht variiert worden, wobei $\Delta S_{np} = \Delta S_{cv}/2$ verwendet wurde. Dabei wird deutlich, wie ab etwa $1.5 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ Koinzidenzeffekte auftreten, die sogar zu einem erneuten Ansteigen der Kurven führen können. Der restliche Kurvenverlauf bleibt ungeändert. Diese Effekte bewirken auch, daß bei der Wahl $S = 2.31$, $\hbar\omega_0 = 0.0705 \text{ eV}$ und $\Delta S_{np} = 2.7k$ eine völlige Übereinstimmung der Niedrigfeld-Werte mit den experimentellen Punkten hergestellt werden kann (nicht dargestellt)- dann ergeben sich jedoch etwas stärkere Abweichungen bei höheren Feldstärken. Als Kriterium sollte demnach ein guter Fit im Bereich höherer Feldstärken angesehen werden, so daß nach Abb. 16c die Annahme einer Entropieänderung ΔS_{np} von etwa der halben Gapentropie die Meßwerte

$\log e_n [s^{-1}]$ $\log e_n [s^{-1}]$ 

68

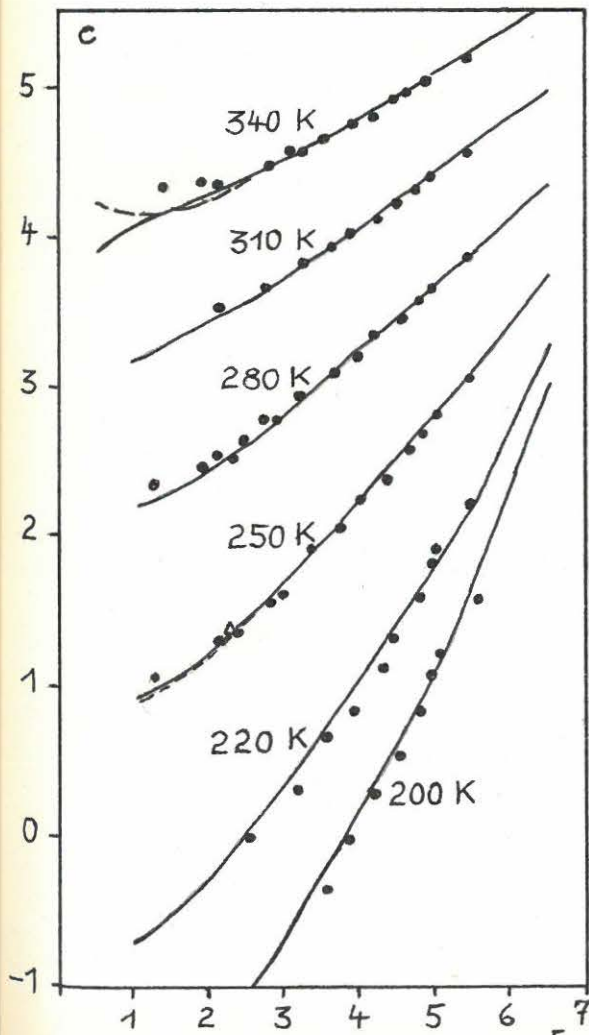


Abb. 16

Vergleich von Theorie und Experiment /15/ für die goldkorrelierte Störstelle in Si.

a) ausgezogene Kurven:
 $E_B = 0.553 \text{ eV}$, $S = 2.4$, $\hbar\omega_0 = 0.068 \text{ eV}$, $(\Delta_{FC} = 163 \text{ meV})$, $m_{||} = 0.32 m_0$

gestrichelte Kurven:
 $S = 2.8$, $(\Delta_{FC} = 190 \text{ meV})$, $m_{||} = 0.26 m_0$

b) Parameter wie in 16a (ausgezogen)
 ausgezogene Kurven: $E_B = 0.553 \text{ eV}$

gestrichelte Kurven:
 $E_B = (0.553 - T \times 2.7k) \text{ eV}$

c) $E_B = (0.553 - T \times 1.35k) \text{ eV}$, $m_{||} = 0.26 m_0$

Auftreten von Koinzidenzeffekten
 im Bereich kleiner Feldstärken

$\Delta_{FC} = 163 \text{ meV}$

ausgezogen: $S = 2.31$, $\hbar\omega_0 = 0.0705 \text{ eV}$

gestrichelt: $S = 2.45$, $\hbar\omega_0 = 0.0666 \text{ eV}$

am besten reproduziert.

Ein stark verändertes Bild ergibt sich im Zweimoden-Modell (Formel (3.51)). Besonders der Wegfall des Faktors $(S + 1)^2/S$ in (3.28) hat eine starke Ansteilung der Kurven zur Folge. Will man nicht zum Notbehelf einer unrealistisch erhöhten Bandmasse ($m_{11} \approx 0.4 m_0$) greifen, wie in /85/ getan, bleibt nur eine drastische Vergrößerung der Franck-Condon-Energie, wodurch man den Abstand und die Anstiege der Kurven bei höheren Feldstärken in sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment bringen kann. Eine optimale Anpassung im Gebiet niedrigerer Feldstärken wird jedoch wieder nur mit einer angenommenen Entropieänderung von $\Delta S_{np} \geq 1.35k$ erzielt. Die Frequenz der promoting mode ω_1 wirkt sich so aus, daß eine Erhöhung der Phononenergie $\hbar\omega_1$ zu flacheren Anstiegen führt. In Abb. 17, wo optimale Anpassungen im Ein- und Zweimoden-Modell gegenübergestellt sind, wurde $\hbar\omega_1 = 0.07$ eV benutzt - ein kleineres $\hbar\omega_1$ würde noch größere Franck-Condon-Energien bedingen als den in Abb. 17b verwendeten Wert $\Delta_{FC} = 258$ meV ($S = 3.8$, $\hbar\omega_2 \hat{=} \hbar\omega_0 = 0.068$ eV).

Vergleicht man die Abbildungen 17a und 17b, so spricht besonders der qualitative Verlauf der einzelnen Kurven im Gebiet höherer Felder für die Annahme, daß bei der Elektronenemission aus dem Defekt Si:Au^- der Übergang durch eine promoting mode $\hbar\omega_1$ mit $S_1 \approx 0$ induziert wird und folglich eine Franck-Condon-Energie von $\Delta_{FC} \geq 250$ meV wahrscheinlich ist. Solch große Δ_{FC} -Werte würden auch eine Erklärung für die gefundene Temperaturunabhängigkeit des Einfangquerschnitts bei mittleren Temperaturen liefern (die mit $\Delta_{FC} \approx 160$ meV schwer verständlich ist), denn $\Delta_{FC} = 258$ meV hat eine Aktivierungsenergie (für den Einfang) von nur 84 meV zur Folge, d. h. auf dem groben Energieraster von $\hbar\omega_0 \approx 0.07$ eV ist nur etwa ein Phonon nötig, um den Übergang thermisch zu aktivieren. Dieser Energiebetrag kann aber bereits durch die promoting mode bereitgestellt werden. Da die beste Anpassung unter der Annahme einer vibronischen Entropieänderung im Bereich von $1/2 \Delta S_{cv}$ bis ΔS_{cv} gelang, kann geschlußfolgert werden, daß das goldkorrelierte Akzeptorniveau ein ausgeprägtes pinning ans Valenzband zeigt. Dies trifft sich mit Messungen von Brotherton und Bicknell (sh. /82/), die $g_0/g_1 = 4$ fanden, was mit dem von Lang et. al. /82/ angegebenen Wert für $(g_0/g_1)\exp(\Delta S_{np}/k) = 48$ auf $\Delta S_{np} = 2.5$ führt!

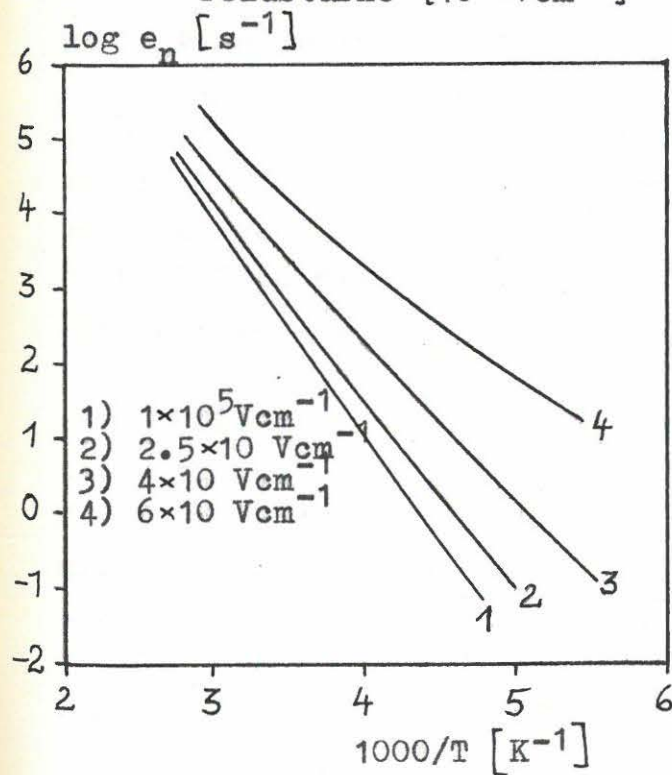
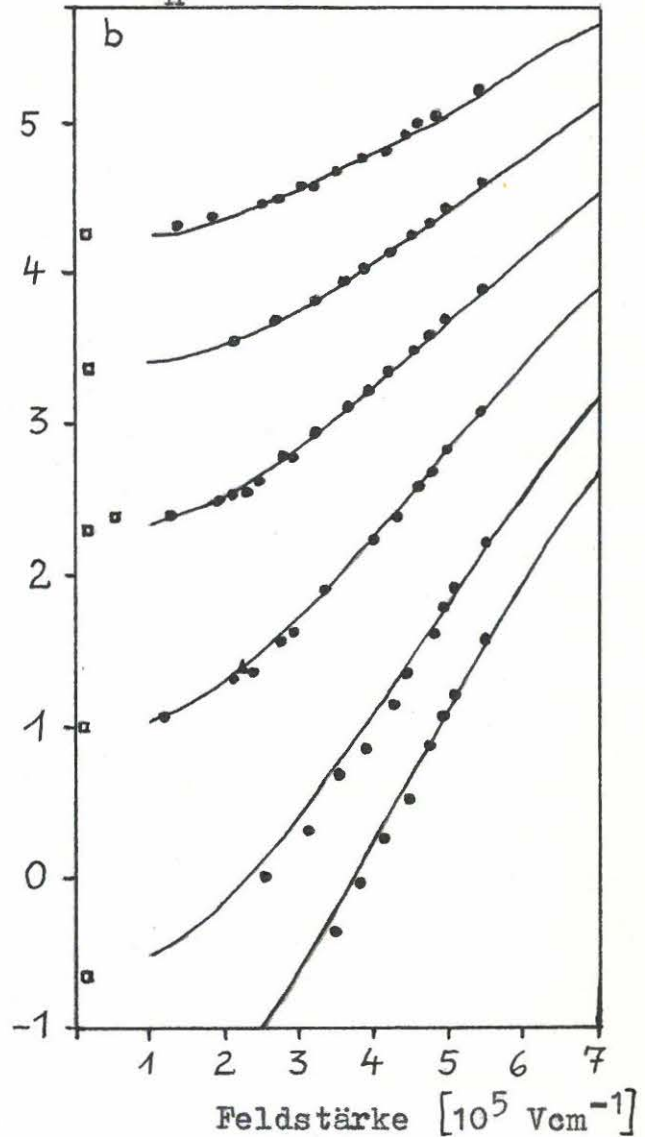
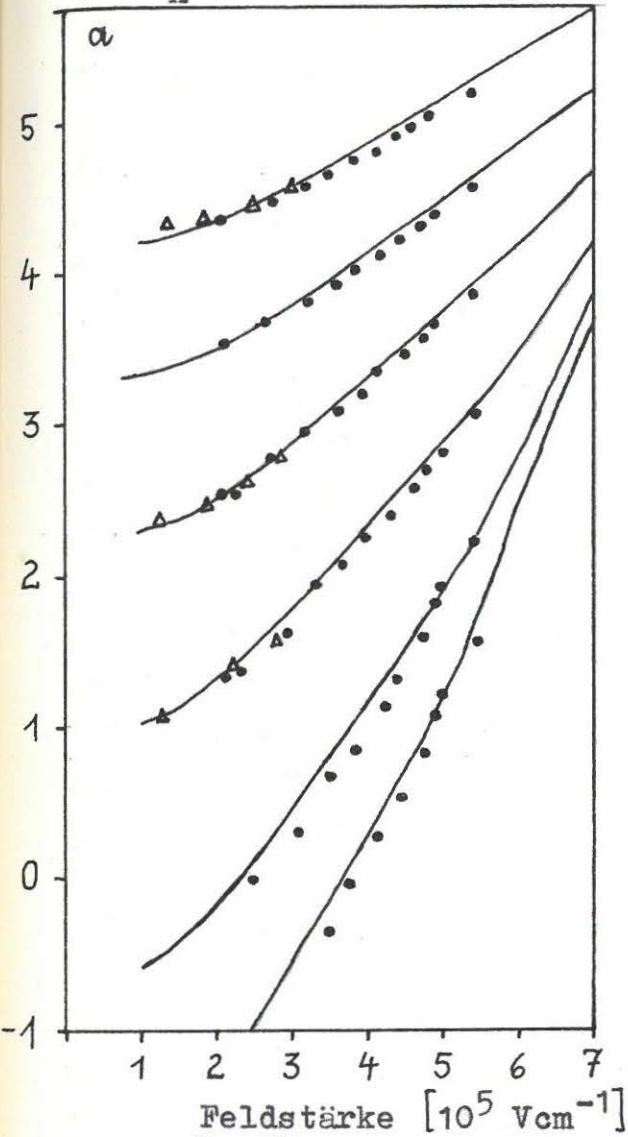
$\log e_n [s^{-1}]$ $\log e_n [s^{-1}]$ 

Abb. 17

Emissionsrate des goldkorrelieren Akzeptorniveaus
 Vergleich von Einmoden- (a) und
 Zweimoden-Modell (b)

a) $m = 0.26 m_0$, $S = 2.4$, $\hbar\omega_0 =$
 0.068 eV , $E_B = (0.553 - T \times 1.54k)$
 eV

b) $m = 0.26 m_0$, $S = 3.8$, $\hbar\omega_{\text{acc}} =$
 0.068 eV , $\hbar\omega_{\text{prom}} = 0.07 \text{ eV}$
 $E_B = (0.553 - 2.7k \times T) \text{ eV}$

Abb. 18

Emissionsrate der goldkorrelieren Störstelle in Si in Abhängigkeit von der inversen Temperatur (Arrheniusplot)

In Abb. 18 ist der Arrheniusplot nach (3.28) für das Niveau aufgetragen. Die mit wachsender Feldstärke zunehmende Nichtlinearität der sog. Signaturen reflektiert den kleiner werdenden Abstand der Kurven zu verschiedenen Temperaturen, d. h. das immer stärkere Abweichen von einem einfachen Aktivationsgesetz, was dem Experimentator Indiz für eine Feldabhängigkeit der Emissionsrate ist.

Neben dem besetzten und unbesetzten Akzeptor-Zustand manifestiert sich die goldkorrelierte Störstelle auch in einem Donatorzustand der Energie $E_B = E_g - 0.35 \text{ eV}$ /82/. Auch für diesen Zustand liegt eine Messung der feldabhängigen Emissionsrate vor /87/. Die Theorie für neutrale Zentren kann u. U. auf geladene Defekte angewandt werden, falls $R_Z \ll \hbar\theta_{||}$ gilt, da sich unter dieser Bedingung der Coulombeffekt gegenüber dem Feldeffekt nicht bemerkbar macht. So spielt es z. B. für EL2 in GaAs im erfaßten Feldstärkebereich /11/ keine Rolle, welcher Ladungszustand vorliegt, denn $R_1 \approx 0.006 \text{ eV}$ und $\hbar\theta_{||} \approx 0.1 \text{ eV}$ erfüllen die angegebene Relation (sh. Kap. 5). Die in Abb. 19 dargestellten Meßpunkte /87/ erfassen einen Feldstärkebereich von 2×10^4 bis $1.6 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$, d. h. $\hbar\theta_{||}$ variiert zwischen 8 meV und 33 meV (wenn $m_{||} = 0.26 m_0$ angenommen wird). Da $R_1 \approx 30 \text{ meV}$, ist $\hbar\theta_{||} \approx R_1$ und die Modifikation der elektronischen Zustandsdichte durch das Coulombpotential wird wesentlich. Die Anpassung im neutralen Einmoden-Modell (unter der Annahme $m_{||} = 0.26 m_0$ und $T = 200 \text{ K}$) ist möglich für $S = 2.4$ und $\hbar\omega_0 = 0.0708 \text{ eV}$. Jedoch schon eine geringfügige Änderung der effektiven Phononenergie verändert völlig den Kurvenverlauf im Bereich $F < 1 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ (Koinzidenzeffekte), wie in Abb. 19 dargestellt. Die bei kleinen Feldstärken für die Erklärung thermischer Experimente unzulässige Vernachlässigung der Phonondispersion hat also vermutlich einen weit aus größeren Einfluß auf den Kurvenverlauf als die genaue Form der Zustandsdichte.

Das A-Zentrum in Si wird dem VO-Komplex zugeordnet und wirkt als Akzeptor /5/, folglich ist das neutrale Modell zur Anpassung an Messungen von Irmscher et al. geeignet. In Abb. 20 ist der Vergleich zwischen Formel (3.28) mit temperaturabhängiger Bindungsenergie und den experimentellen Punkten dargestellt. Mit $m_{||} = 0.26 \times m_0$ ($\langle 111 \rangle$ -Richtung) ergibt sich ein befriedigendes Bild für die Parameter $S = 12.6$, $\hbar\omega_0 = 17 \text{ meV}$ ($\Delta_{FC} = 214 \text{ meV}$) und

$E_B = (0.15 - 1.5 \cdot kT)$ eV. Die Traptiefe ist in Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Koinzidenzeffekte treten wegen der kleinen Phononenergie jetzt erst ab etwa $F \leq 0.5 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ auf; entscheidend ist jedoch die gute Anpassung bei höheren Feldstärken. Da in der experimentellen Literatur keine zusätzlichen Informationen über das A-Zentrum gefunden wurden, ist auf eine detaillierte Analyse der Temperaturabhängigkeit der Bindungsenergie sowie der Unterschiede im Ein- und Zweimoden-Modell verzichtet worden. Entscheidend für die Anpassung ist die große Franck-Condon-Energie $\Delta_{FC} \approx 200 \text{ meV}$, die weit größer als die Bindungsenergie ist. Das A-Zentrum scheint demnach ein typischer Vertreter der extrem stark koppelnden Defekte zu sein.

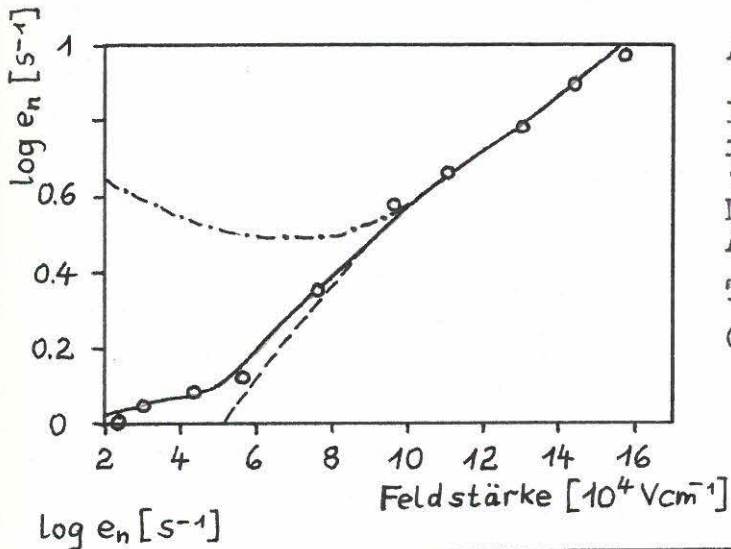


Abb.19

Feldabhängigkeit der Emissionsrate des goldkorrelierten Donators in Si

Meßwerte nach /87/

Anpassung mit $m_{||} = 0.26 m_0$,
 $T = 200 \text{ K}$, $E_B = 0.35 \text{ eV}$, $\hbar\omega_0 = 0.0708 \text{ eV}$, $S = 2.4$ (ausgezogen)

----- $\hbar\omega_0 = 0.0655 \text{ eV}$

- · - · - · $\hbar\omega_0 = 0.0685 \text{ eV}$

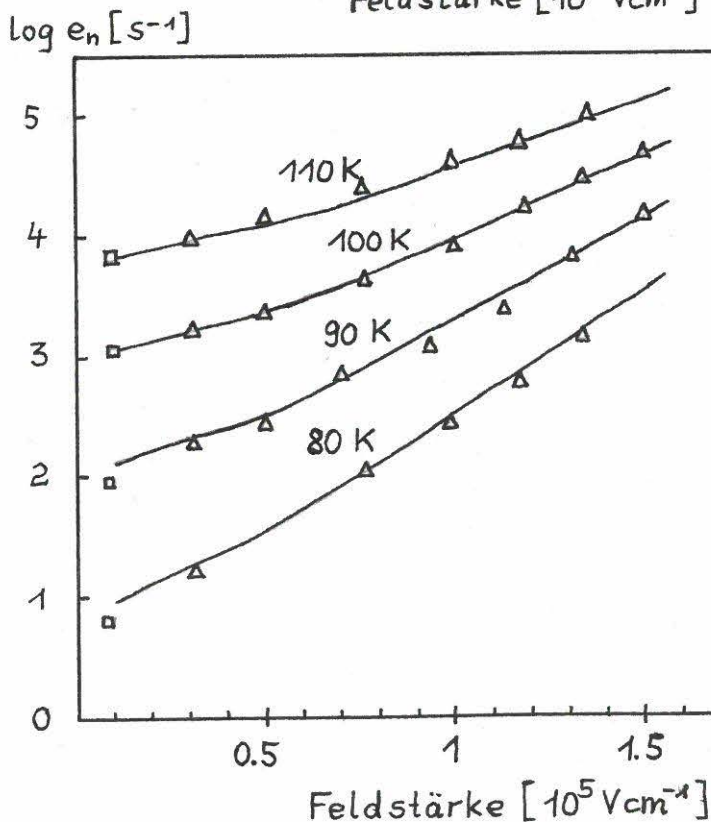


Abb.20

Feldabhängigkeit der Emissionsrate des A-Zentrums in Si

Meßwerte nach /15/

Anpassung mit $m_{||} = 0.26 m_0$
 $E_B = (0.15 - T \times 1.33 \times 10^{-4}) \text{ eV}$
 $S = 12.6$, $\hbar\omega_0 = 0.017 \text{ eV}$,
 $\Delta_{FC} = 214 \text{ meV}$

3.7.3. Anwendung auf EL2 und E3 in GaAs sowie GaP:Fe

Unter den natürlichen Punktdefekten, die in III-V-Verbindungen im Konzentrationsbereich von $10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ stets vorhanden sind, spielt das EL2-Zentrum in GaAs eine besondere Rolle. Während es früher dem Sauerstoff zugeschrieben wurde /68/, sind heute vor allem zwei Modelle in der Diskussion: der einfache As_{Ga} -antisite-Defekt /91/ und der $\text{As}_{\text{Ga}} \text{V}_{\text{As}}$ -Komplex /89/. EPR-Studien /91/ belegen den Zusammenhang von EL2 mit dem D^0/D^+ -Donatorzustand des As_{Ga} -antisite-Niveaus bei $E_{\text{V}} + 0.75 \text{ eV}$. Ein zweiter besetzter (metastabiler) Zustand mit extremer Gitterrelaxation und ein angeregter Zustand bei $E_{\text{C}} - 0.2 \text{ eV}$ sind aufgrund verschiedenster Meßresultate wahrscheinlich (zitiert in /93/).

In Tab. 1 sind einige EL2-Parameter gesammelt; unter " E_{akt} " sind die ohne weitere Spezifizierung angegebenen "Aktivierungsenergien" aufgeführt, daneben finden sich die eigentlichen Aktivierungsenergien für Einfang und Emission, soweit sie eindeutig als solche erkennbar waren. Neben der Streuung der Werte ist besonders die Inkonsistenz bzgl. der Parameter ΔH_{n} , $E_{\text{akt}}^{\text{C}}$ und Δ_{FC} auffällig: Eine Franck-Condon-Energie von $\Delta_{\text{FC}} \approx 0.12 \text{ eV}$ bedingt bei $\Delta H_{\text{n}} \approx 0.75 \text{ eV}$ eine Einfang-Aktivierungsenergie von $E_{\text{akt}}^{\text{C}} \approx 0.8 \text{ eV}$, was etwa das Zehnfache des gemessenen /68, 88/ bzw. in derselben Zeile angegebenen Wertes /88/ ist.

Lit.	$\Delta H_{\text{n}} = E_{\text{B}}$ ($T \approx 0$)	" E_{akt} "	$E_{\text{akt}}^{\text{C}}/E_{\text{akt}}^{\text{e}}$	Δ_{FC}	$S/\hbar\omega_0$	$\Delta S_{\text{np}} [\text{eVK}^{-1}]$	g_0/g_1
/88/	-	0.82	0.066/ -	0.115	5.5/0.02	$2.9 \cdot 10^{-4}$	1/2
/89/	0.759	-	- / -	-	-	$2.37 \cdot 10^{-4}$	-
/49/	0.74	0.8	0.8/ -	0.12	-	-	-
/90, 18/	-	0.815	- / -	-	13/0.011	-	-
/68/	0.75	-	0.08/0.83	-	-	-	-
/11/	-	-	- / -	0.138	6.9/0.02	-	$\frac{1}{2}$
/92/	-	-	- / -	0.125	6.5/0.02	-	-

Tabelle 1

Zusammenstellung von EL2-Parametern
(Energien in eV)

Die in 7.3.1. demonstrierte Anpassung im Einmoden-Modell ergab eine befriedigende Übereinstimmung mit den äußerst stark vom Feld abhängenden Emissionsraten-Werten von Makram-Ebeid et al. /11/. Die dabei bestimmten Parameter $E_B = 0.76$ eV, $\Delta_{FC} = (100 \pm 2)$ meV sind konsistent mit den Literaturwerten, auch S und $\hbar\omega_0$ liegen im angeführten Bereich ($\hbar\omega_0 = 11.5$ meV ist als Phononenergie des EL2-Intrazentren-Übergangs von Kaminska et. al. /18, 90/ gemessen worden). Die Annahme einer temperaturabhängigen Bindungsenergie führte zu einer Verschlechterung der Anpassung: mit $\Delta S_{np} = 2.4 \times 10^{-4}$ eVK⁻¹ mußte $\Delta H_n = 0.82$ eV gewählt werden, doch auch dann konnten nur die Kurven zu den höheren Temperaturen reproduziert werden. Eine Vergrößerung von ΔS_{np} bewirkt weitere Vergrößerung von E_B und Verschlechterung der Anpassung für tiefe Temperaturen.

Die angeblich optimalste Anpassung mit $S = 6.9$ und $\hbar\omega_0 = 0.02$ /11/eV ist nur im Zweimoden-Modell und auch dort nur im Temperaturbereich 243 K bis 363 K mit einer kleinen Phononenergie der promoting mode $\hbar\omega_1 \leq 11$ meV nachzuvollziehen. Der Grund dürfte in der in /11/ verwendeten Theorie des phonon-assistierten Tunnelns (keine Übergangsinduzierenden Moden !) liegen. Bei Annahme einer promoting mode ließ sich kein Parametersatz finden, der eine ähnlich gute Anpassung wie im Einmoden-Modell erbrachte.

Die Meßdaten von Makram-Ebeid et. al. können demnach mit $E_B = 0.76$ eV, $\Delta_{FC} = 0.1$ eV, $\hbar\omega_0 = 0.011$ eV, $S = 9$ und $\Delta S_{np} \approx 0$ angepaßt werden. Pinning ans Leitungsband und starke diagonale Kopplung der promoting mode (= accepting mode) sind wahrscheinlich. Unbefriedigend bleibt die qualitative Diskrepanz bei hohen Temperaturen und niedrigen Feldern: Die Krümmung der experimentellen Kurven scheint bei $F \approx 3 \times 10^5$ Vcm⁻¹ das Vorzeichen zu wechseln, was im Rahmen der vorliegenden Theorie nur durch eine starke Verminderung des Verhältnisses E_B/Δ_{FC} erklärbar wäre (sh. Abb. 10). Auch die von anderen Autoren /17, 18/ gefundene Unabhängigkeit der Emissionsrate vom Feld bei ähnlichen Feldstärken ist nur durch extrem kleine Bindungsenergien bzw. extrem starke Kopplung zu erklären - es ist möglich, daß dort Übergänge aus dem metastabilen Zustand gemessen wurden.

In Abb. 21 sind Messungen am E3-Zentrum in GaAs von Makram-Ebeid

/92/ mit der Theorie (Einmoden-Modell) verglichen worden. In der Literatur existierende Parameter sind z. B. " E_{akt} " = 0.31 eV, $E_B = 0.24$ eV, $\Delta_{\text{FC}} = 0.2$ eV /49/ und $S = 7.5 \pm 2.4$, $\hbar\omega_0 = (10.5 \pm 1.5)$ meV bzw. $S = 9 \pm 1.5$, $\hbar\omega_0 = (11 \pm 1)$ meV /92/. Diese konnten im wesentlichen bestätigt werden. Abb. 21 zeigt zwei Anpassungen: $E_B = 0.275$ eV, $S = 8.1$, $\hbar\omega_0 = 0.01$ eV ($\Delta_{\text{FC}} = 81$ meV) und $S = 7.5$, ($\Delta_{\text{FC}} = 75$ meV, gestrichelte Kurve).

Als Beispiel für eine Störstelle in GaP ist in Abb. 22 die feldabhängige Emissionsrate des Fe_{Ga} -Doppelakzeptors /59/ dargestellt. Das Feld lag in $\langle 100 \rangle$ -Richtung an; folglich ist $m_{\parallel} = 0.12 m_0$ ($\equiv m_t$). Die Anpassung erfolgte im neutralen Einmoden-Modell mit den Parametern $E_B = 0.31$ eV, $S = 8.76$, $\hbar\omega_0 = 0.016$ eV ($\Delta_{\text{FC}} = 0.14$ eV). Eine kleinere Bindungsenergie liefert zu enge Abstände zwischen den Kurven, was durch Änderung von S , $\hbar\omega_0$ nicht behoben werden kann. Dementsprechend ist bei Annahme einer vibronischen Entropieänderung von 4.5×10^{-4} eVK $^{-1}$ /59/ eine Enthalpie von 0.38 eV in Rechnung zu stellen, um die Anstiege zu reproduzieren. Dies führt jedoch zu einer Fehlanpassung der Temperaturabhängigkeit.

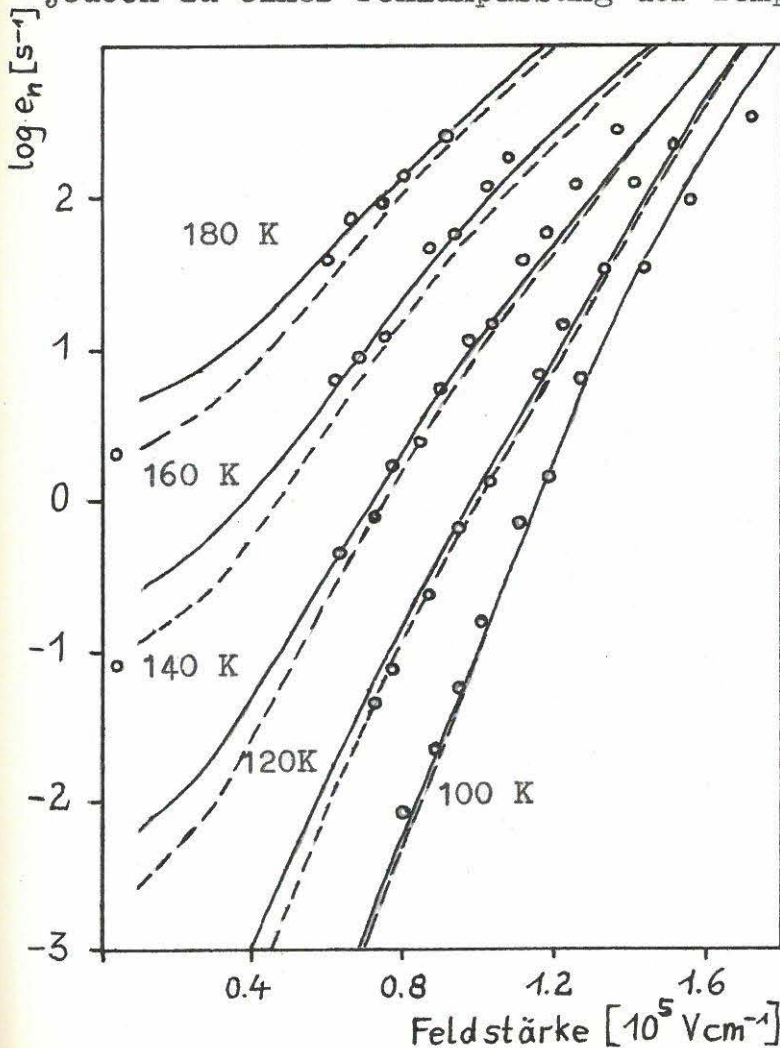


Abb.21

Feldabhängigkeit der Emissionsrate des E3-Zentrums in GaAs.

Meßwerte nach /92/.

Anpassung im Einmoden-Modell mit $E_B = 0.275$ eV, $\hbar\omega_0 = 0.0101$ eV, $S = 8.1$ (ausgezogene Kurven) und $S = 7.5$ (gestrichelte Kurven).

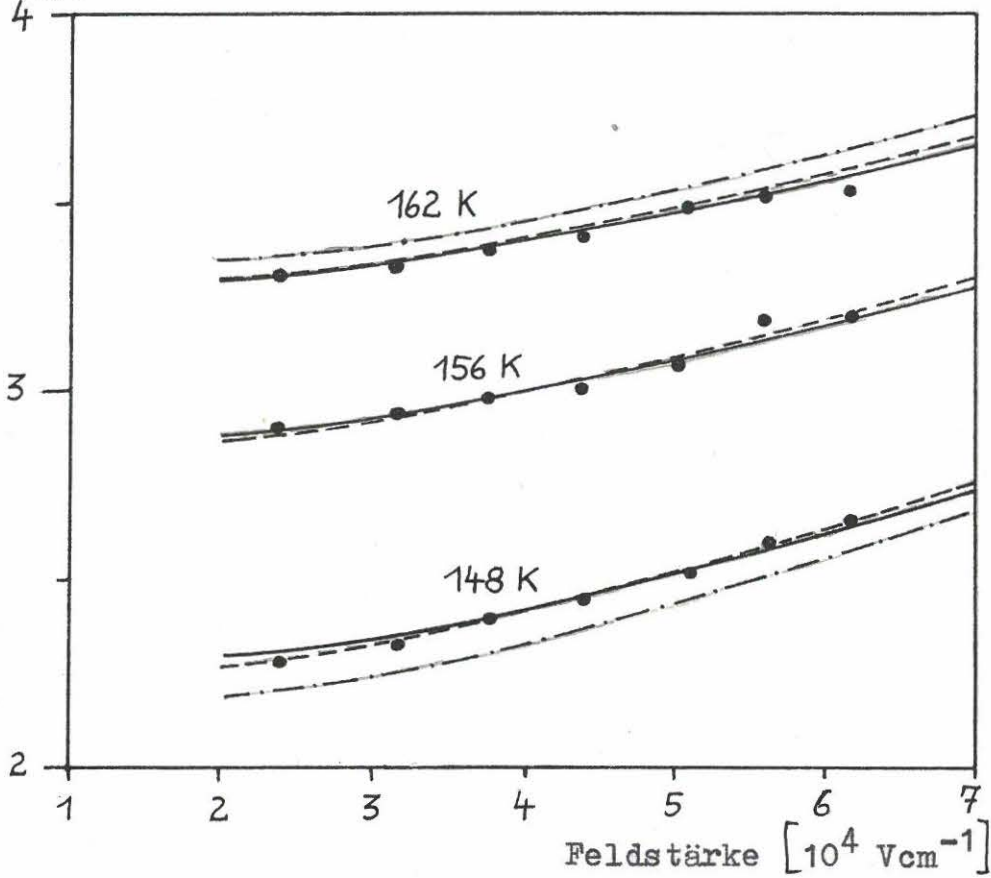


Abb.22

Feldabhängigkeit der Emissionsrate des Fe_{Ga} -Doppelakzeptors in GaP. Messung von Brehme /59/.

$$\left. \begin{aligned}
 E_B &= 0.31 \text{ eV}, S = 7, \hbar\omega_0 = 0.02 \text{ eV} \\
 E_B &= 0.31 \text{ eV}, S = 8.76, \hbar\omega_0 = 0.016 \text{ eV} \\
 E_B &= (0.38 - 4.5 \times 10^{-4} \times T) \text{ eV}, S = 8.76, \hbar\omega_0 = 0.016 \text{ eV}
 \end{aligned} \right\} \Delta_{\text{FC}} = 140 \text{ meV}$$

4. Elektroabsorption an tiefen Störstellen

4.1. Zusammenhang des Elektroabsorptionskoeffizienten mit Linienformfunktion und elektronischer Übergangsrate im neutralen Modell

Neben thermischer DLTS und EPR-Untersuchungen sind optische Methoden ein wesentliches Mittel zur Defektanalyse. Strahlende Übergänge aus einem tiefen Niveau ins Band (oder umgekehrt) sind dann von Interesse, wenn keine angeregten Zustände im Gap existieren, folglich das Band die Rolle der Sonde zur Bestimmung charakteristischer Zentrenparameter übernehmen muß. Erfolgen die optischen Übergänge in einer Raumladungsstruktur (wie z. B. im Falle der DLOS /49/), muß die Feldabhängigkeit der optischen Übergangswahrscheinlichkeit berücksichtigt werden. Zudem zeigt sich, daß gerade die Untersuchung der modulierten Spektren zu einer viel genaueren und bequemeren Erkennung der empirischen Zentrenparameter führen kann. Dies sei im folgenden am Beispiel des Elektroabsorptionsspektrums tiefer neutraler Störstellen demonstriert.

Es sollen nur dipolerlaubte Übergänge betrachtet werden. Dann tritt an die Stelle der nichtdiagonalen Elektron-Phonon-Kopplung der Operator

$$H_{el} = \alpha_{\bar{q}\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' \int_0^{\infty} d\omega \sum_m I_{E' \omega m, E00}^{ct} (0) a_{E' \omega m}^{c+} a_{E00}^t (\mathcal{L}_{\bar{q}\beta} + \mathcal{L}_{-\bar{q}\beta}^+) \quad (4.1)$$

In (4.1) hat $I_{E' \omega m, E00}^{ct}$ die in (2.19) erklärte Bedeutung und $\mathcal{L}_{\bar{q}}^+$ ist der Erzeugungsoperator eines Photons der Energie $\hbar\omega_{\bar{q}}$ und der Polarisation β . Gemäß Dipolnäherung /19/ ist

$$|\alpha_{\bar{q}\beta}|^2 = \frac{e^2}{\mu^2} \frac{2\pi\hbar}{V \omega_{\bar{q}}} |\bar{p}_{cv}(0) \mathcal{U}_{\bar{q}\beta}|^2 \quad (4.2)$$

(\mathcal{U} - Polarisationsvektor, μ - Masse des gebundenen Ladungsträgers, V - Volumen). Die Berechnung der strahlenden Emissionsrate erfolgt völlig analog zur strahlungslosen. Statt (3.12) erhält man

$$e_n^r = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE dE' \int_0^{\infty} d\omega \sum_m \mathcal{N}_{q\beta} |\alpha_{q\beta}|^2 |I_{E',E}^{ct, \omega_m, E00}(0)|^2 L_{E',E}^{ct}(\omega + \omega_q) \quad (4.3)$$

mit der Photonenbesetzungszahl $\mathcal{N}_{q\beta}$. Der Absorptionskoeffizient folgt durch Multiplikation mit der Photonen-Zustandsdichte pro Energieeinheit im Intervall $\{\omega_q, \omega_q + d\omega_q\}$ /19/. Integriert man schließlich über alle Winkel unter Beachtung, daß die Polarisation des Endzustandes beliebig ist und faßt die Vorfaktoren zu einem Anpaßparameter $\tilde{\alpha}_0$ zusammen, ergibt sich

$$\alpha(\omega) = \frac{\alpha_0}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE dE' D(E, E') L_{E',E}^{ct}(\omega_{ct} + \omega). \quad (4.4)$$

In (4.4) bezeichnet ω_{ct} jetzt die Übergangsfrequenz (3.15) und ω die Lichtfrequenz. Da nur dipolerlaubte Übergänge betrachtet werden sollen, ist für die totale elektronische Übergangsrate $D(E, E')$ der Ausdruck (2.40b) zu verwenden. Andernfalls ist $D(E, E')$ gemäß (3.26) und (B5) durch die für dipolverbotene Übergänge gültige Größe zu ersetzen. Wenn die Feldabhängigkeit der thermischen Parameter wieder vernachlässigt wird, trägt allein $D(E, E')$ die Information über die Feldabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten $\alpha(\omega, \bar{F})$. Die für die Elektrooptik relevante Größe ist die Differenz zwischen feldabhängigem und Nullfeld-Absorptionskoeffizienten

$$\Delta\alpha(\omega) = \alpha(\omega, \bar{F}) - \alpha(\omega, \bar{0}). \quad (4.5)$$

Somit ist gemäß (3.29) und (3.30) $\Delta\alpha(\omega)$ der elektrooptischen Funktion 1. Art

$$F(\eta) = \pi \mathcal{F}(\eta) - \theta(-\eta) \sqrt{-\eta} \quad (4.6)$$

proportional. Im Ergebnis der in Anlage 1 diskutierten Näherungen ist die darin auftretende Masse gleich der Bandmasse in Feldrichtung (halbseitiger Franz-Keldysh-Effekt). Jedoch hat die Differenzbildung den Vorteil, daß die näherungsweise Integration (sh. Formeln (C3) und (C4) in Anlage 3) des Energienenners, der die Linienform des optischen Streuquerschnitts wesentlich bestimmt, viel unproblematischer wird, als bei den thermischen Übergängen. Dies ist jetzt auch nötig, da das Spektrum über einem Energieinter-

vall von der Größenordnung einiger Phononenenergien oberhalb der (Nullfeld-) Bandkante ausgewertet werden muß, um die Zentrenparameter S und $\hbar\omega_0$ zu bestimmen.

Setzt man die Linienformfunktion des Einmoden-Modells (3.20) in (4.4) ein und benutzt (2.40b), (3.29), (3.30) und (4.6), so erhält man folgenden Ausdruck für den Elektroabsorptionskoeffizienten:

$$\Delta\alpha(\omega) = \alpha_0 e^{-S(2\bar{N}+1)} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\bar{N}+1}{\bar{N}} \right]^{1/2} I_1(2S\sqrt{\bar{N}(\bar{N}+1)}) \times \quad (4.7)$$

$$\times \frac{\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}} F[(E_B + l\hbar\omega_0 - \hbar\omega)(\hbar\theta_{\parallel})^{-1}]}{\omega \left[E_B^0 - \frac{m_{\perp}}{\mu_v} (E_B + l\hbar\omega_0 - \hbar\omega) \right]^2} .$$

Abb. 23a-d verdeutlicht das Elektroabsorptionsspektrum (4.7) für verschiedene Feldstärken und Elektron-Phonon-Kopplungsstärken. Die Linienform hängt empfindlich vom Verhältnis $\hbar\theta_{\parallel}/\hbar\omega_0$ ab. Bei hohen Feldstärken wird sie durch die elektrooptische Funktion F selbst bestimmt; eine nur leichte Modifikation tritt infolge des Energienenners auf. Mit wachsendem S wird das Spektrum zunehmend verbreitert. Die erste Nullstelle liegt um die Franck-Condon-Energie Δ_{FC} verschoben. Die Phononenstruktur, die bei hohen Feldstärken nur schwach ausgeprägt ist, dominiert im Fall schwacher Felder. Wird die elektrooptische Energie kleiner als die effektive Phononenenergie, prägen sich neue Substrukturen zwischen den einzelnen Phonon-Satelliten aus (Abb. 23d). Die Höhe der Oszillationen wird dann wesentlich durch Koinzidenzeffekte bestimmt, so daß sich insbesondere die Höhe der Hauptmaxima mit steigender Feldstärke verringern kann, was auch experimentell nachgewiesen wurde /94/. Da diese Messungen bei sehr tiefen Temperaturen erfolgen, führt das Einmoden-Modell hier i. a. nicht zu unrealistischen Koinzidenzen wie im Falle der feldabhängigen thermischen Emissionsrate. Um besser zu verstehen, wie die in Abb. 23 dargestellten Spektren entstehen, werden im folgenden die Stark- und Schwachfeld-Näherung untersucht.

4.2. Starkfeld- und Schwachfeld-Näherung

Läßt man in (4.4) die Linienformfunktion un spezifiziert, so wird

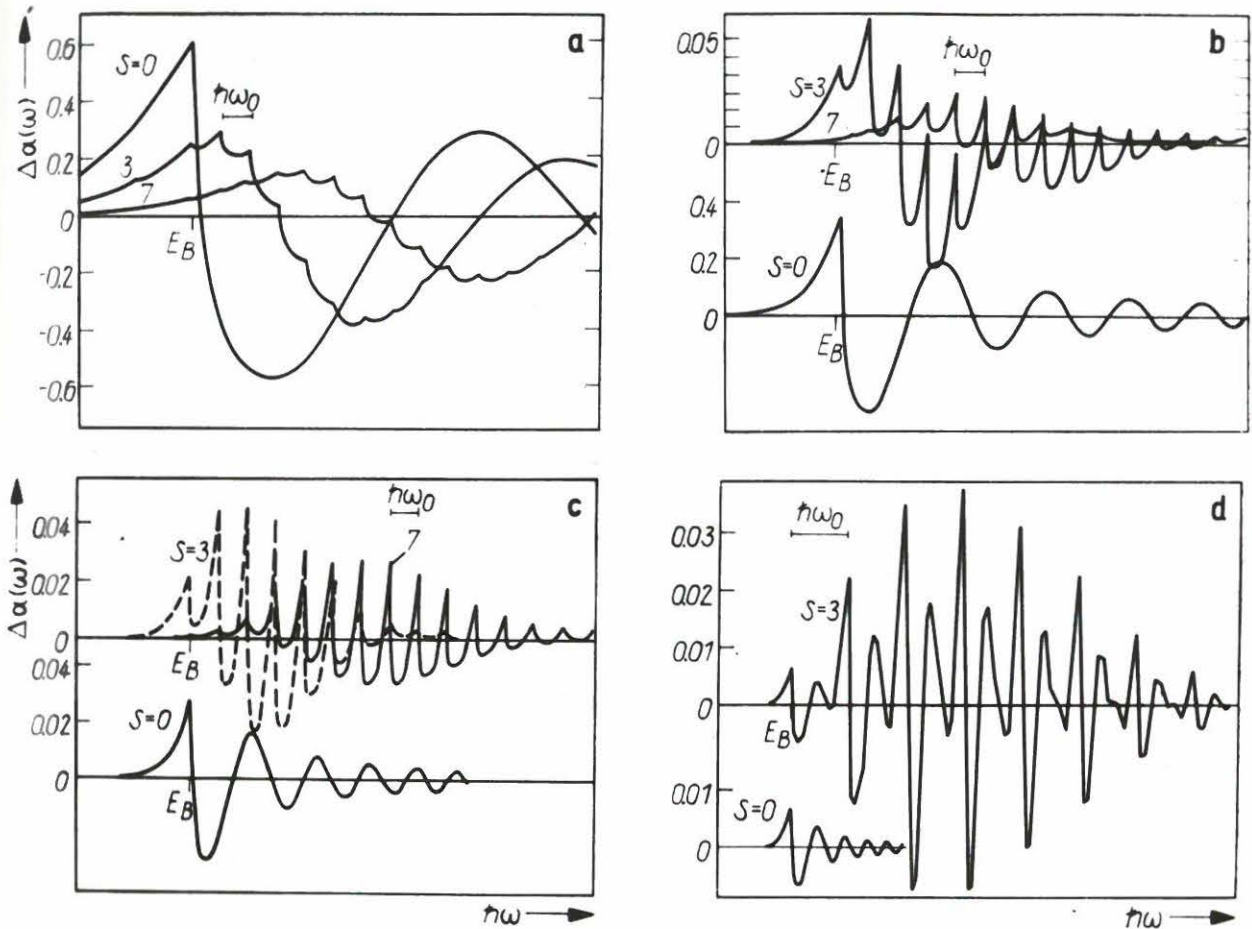


Abb. 23

Elektroabsorptionsspektrum $\Delta\alpha(\omega)$ für verschiedene Huang-Rhys-Faktoren $S = 0, S = 3, S = 7$. Folgende Parameter sind benutzt worden: a) $\hbar\theta_{\parallel} = 113$, b) 39, c) 24 und d) 5 meV. (In Abb. 23d ist die Kurve mit $S = 7$ der Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt)

$\hbar\omega_0 = 20$ meV, $E_B/\hbar\omega_0 = 30$, $T = 10$ K.

Die Energieskala ist in Einheiten der effektiven Phononenergie $\hbar\omega_0$. E_B bezeichnet die Traptiefe.

$$\Delta\alpha(\omega) = \frac{C\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{F(E'/\hbar\theta_{\parallel})}{\left[E_B^0 - \frac{m_{\perp}E'}{\mu\nu}\right]^2} L^{ct}(\hbar\omega - E_B - E')$$

mit $C \equiv \frac{\alpha_0 \sqrt{8m_{\parallel}m_{\perp}m_t}}{4\pi^2\hbar^3}$. (4.8)

Um Näherungen im starken elektrischen Feld zu erhalten, wird die Linienformfunktion in (4.8) durch ihre Integraldarstellung ausge-

drückt (vgl. (3.13)). Setzt man $g(\tau) \equiv D_{q_0}^>(\tau) - (2\bar{N}+1)$, so folgt

$$\Delta\alpha(\omega) = \frac{C\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{F(E')}{\left[E_B^0 - \frac{m_{\perp}\hbar\theta_{\parallel}}{\mu_{\nu}} E'\right]^2} \times \quad (4.9)$$

$$\times \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp\left\{-i\tau\left[\frac{\omega}{\theta_{\parallel}} - \frac{E_B}{\hbar\theta_{\parallel}} + E'\right] + Sg(\omega_0/\theta_{\parallel} * \tau)\right\} .$$

Die Funktion $g(\frac{\omega_0}{\theta_{\parallel}} \tau)$ wird nun bis zur zweiten Ordnung in den Phasenfaktoren entwickelt. Dies ergibt

$$g\left(\frac{\omega_0}{\theta_{\parallel}} \tau\right) \approx i\tau \frac{\omega_0}{\theta_{\parallel}} - \frac{\tau^2}{2S} \frac{\Gamma^2}{\theta_{\parallel}^2} \quad (4.10)$$

mit der für Multiphonon-Prozesse charakteristischen Dämpfungskonstanten $\Gamma = \omega_0 \sqrt{S(2\bar{N}+1)}$. Der Abbruch der Entwicklung (4.10) ist gerechtfertigt, wenn die Bedingung $\omega_0/\theta_{\parallel} \ll 2\bar{N}+1$ erfüllt ist (Kriterium für Starkfeld-Fall). Der in τ lineare Term in (4.10) führt zur bekannten Franck-Condon-Verschiebung des Null-Phonon-Ausdrucks

$$\Delta\alpha^{(1)}(\omega) = \frac{C\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}}{\omega} \frac{F\left(\frac{E_B + \Delta_{FC} - \hbar\omega}{\hbar\theta_{\parallel}}\right)}{\left[E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\nu}}(\hbar\omega - E_B - \Delta_{FC})\right]^2} \quad (4.11)$$

und gibt damit die Erklärung der veränderten Nullstellen des Spektrums in Abb. 23a. Berücksichtigt man noch den quadratischen Term in (4.10), so wird das Spektrum $\Delta\alpha^{(1)}(\omega)$ zusätzlich gaussförmig verbreitert:

$$\Delta\alpha^{(2)}(\omega) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \Delta\alpha^{(1)}(\omega - \omega') e^{-\frac{\omega'^2}{2\Gamma^2}} . \quad (4.12)$$

Die resultierende Linienform ist somit im wesentlichen durch eine verschobene und gedämpfte elektrooptische Funktion F bestimmt. Das Integral in (4.12) muß numerisch berechnet werden. Wie aus Abb. 24 zu entnehmen ist, liefert der Näherungsausdruck (4.12) eine qualitative Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Formel (4.7): die generelle Form des Spektrums wird bewahrt; Phononen-Wiederholungen können jetzt allerdings nicht auftreten. (4.12) entspricht damit voll der Hochtemperatur-Näherung für die thermischen Übergangsraten (vgl. (3.32)).

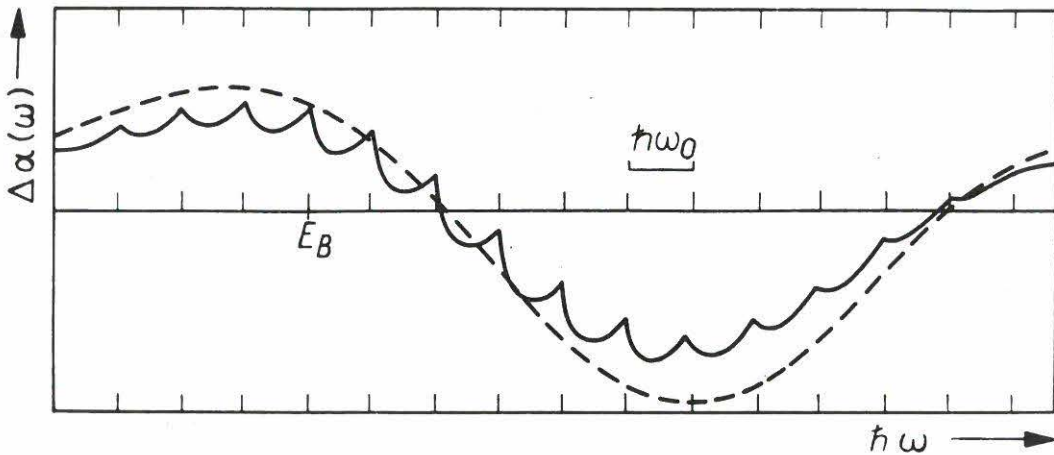


Abb. 24

Vergleich der Starkfeld-Näherung (4.12) mit der allgemeinen Form des Spektrums nach (4.7) (ausgezogene Kurve)
 Parameter: $\hbar\theta_{\parallel} = 113$ meV, $\hbar\omega_0 = 20$ meV, $S = 3$, $T = 400$ K
 Die Gauss-Verbreiterung beschreibt lediglich die Einhüllende annähernd. Befriedigende Übereinstimmung wird erst im (unrealistischen) Hochtemperatur-Grenzfall ($T \gg 300$ K) erreicht.

Ist die elektrische Feldstärke hinreichend klein, kann der Elektroabsorptionskoeffizient $\Delta\alpha(\omega)$ durch den ersten nichtverschwindenden Term einer Reihenentwicklung bzgl. der Feldstärke approximiert werden. Dazu wird der Ausdruck (4.8) identisch umgeschrieben:

$$\Delta\alpha(\omega) = \frac{c}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \left\{ \frac{\text{Ai}\left(\frac{\omega' - \omega}{\Omega_{\parallel}}\right)}{\Omega_{\parallel}} - \delta(\omega' - \omega) \right\} \times \int_{-\infty}^{\infty} dE' \Theta(E') \sqrt{E'} \frac{L^{\text{ct}}(\hbar\omega' - E' - E_B)}{\left[E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\nu}}(E' - (\hbar\omega' - \hbar\omega))\right]^2} \quad (4.13)$$

In (4.13) ist $\Omega_{\parallel} = \theta_{\parallel}/\kappa$ ($\kappa = 2^{2/3}$) /95/. Da für kleine Felder $\text{Ai}((\omega' - \omega)/\Omega_{\parallel})$ stark an der Stelle $\omega' = \omega$ lokalisiert ist, kann der Nennernenner in guter Näherung an dieser Stelle aus dem ω' -Integral gezogen werden. Dadurch ist es möglich, $\alpha(\omega, \bar{F})$ durch Faltung des Nullfeld-Absorptionskoeffizienten mit $\text{Ai}((\omega' - \omega)/\Omega_{\parallel})$ zu erzeugen:

$$\alpha(\omega, \bar{F}) = \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \omega' \frac{\text{Ai}((\omega' - \omega)/\Omega_{\parallel})}{\Omega_{\parallel}} \alpha(\omega'; \bar{0}). \quad (4.14)$$

Entwickelt man nun $Ai\left[\frac{\omega' - \omega}{\beta(F)}\right] / \beta(F)$ bis zur zweiten Ordnung in \bar{F}

$$Ai\left[\frac{\omega' - \omega}{\beta}\right] / \beta \approx \delta(\omega' - \omega) + \frac{\beta^3}{3} \frac{d^3}{d\omega^3} \delta(\omega' - \omega), \quad (4.15)$$

so erhält man die von der feldabhängigen Interband-DK bekannte Darstellung /95/

$$\Delta\alpha(\omega) \approx \frac{\Omega_{II}^3}{3\omega} \frac{d^3}{d\omega^3} [\omega\alpha(\omega, \bar{0})]. \quad (4.16)$$

Der effektive Entwicklungsparameter β in (4.15) kann durch Vergleich von (4.13) mit der konkreten Form der Linienformfunktion als das Verhältnis von Ω_{II} zu $\sqrt{2}\Gamma$ bestimmt werden. Somit ist (4.16) dann eine gute Näherung, wenn die charakteristische elektrooptische Frequenz Ω_{II} klein ist verglichen mit der Multiphonon-Dämpfungskonstanten Γ , d. h. genauer

$$\frac{\Omega_{II}}{\omega_0} \ll \sqrt{2S(2\bar{N}+1)}. \quad (4.17)$$

Die Schwachfeld-Näherung (4.16) ist identisch mit der von Aspnes /95/ abgeleiteten Formel für Interbandübergänge an kritischen Punkten der BZ. Dort muß $\hbar\Omega$ jedoch klein sein gegenüber einer typischen Lebensdauer-Verbreiterung $\hbar\gamma$ der Übergänge infolge von Elektron-Phonon-Stößen. Die Rolle von γ übernimmt im Falle tiefer Störstellen gerade die Multiphonon-Dämpfungskonstante Γ , da $\hbar\Gamma$ die relevante Energie des ungestörten (feldfreien) Systems ist.

Die praktische Anwendung des Schwachfeld-Näherungsausdrucks (4.16) bringt das Problem starker Divergenzen an den Stellen $E_B + n\hbar\omega_0$ als Konsequenz des Einmoden-Modells mit sich. Dies kann dadurch gelöst werden, daß der Realität durch Einführung einer zusätzlichen Lebensdauer-Verbreiterung (Phonon-Phonon-Wechselwirkung und elektronische Streumechanismen) besser Rechnung getragen wird. Damit werden phänomenologisch auch Effekte der Phonondispersion mit erfaßt.

In Abb. 25 ist das Nullfeld-Absorptionsspektrum $\alpha(\omega)$ für verschiedene Werte der Lorentz-Dämpfungskonstante γ dargestellt. Als Beispiel für die Wirkung der Näherungsformel (4.16) ist mit $\gamma = 0.04$

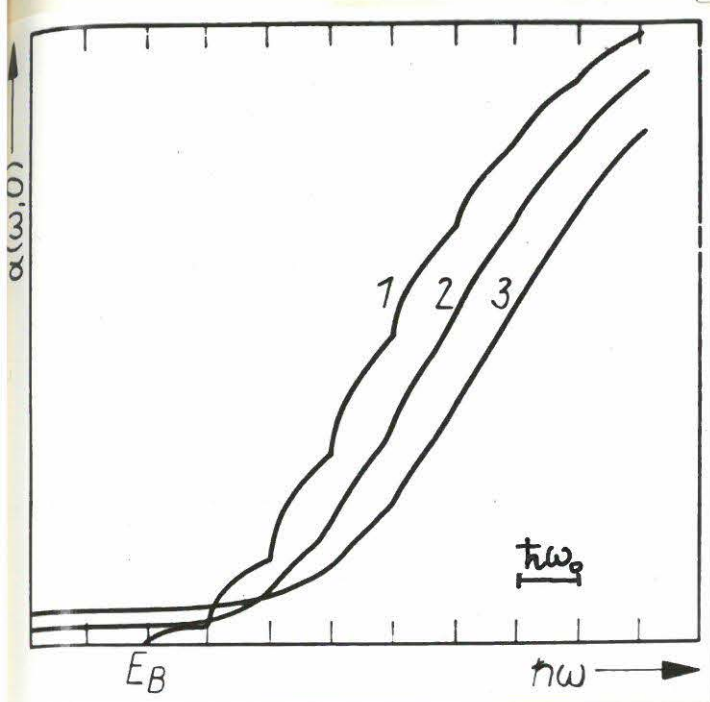


Abb.25

Nullfeld-Absorptionsspektrum
für verschiedene Lorentz-
Dämpfungskonstanten

(1) $\gamma = 0$, (2) $\gamma = 0.005$

(3) $\gamma = 0.01$

Zur besseren Übersicht sind die
Kurven um jeweils $\hbar\omega_0$ verscho-
ben worden.

Parameter: $S = 3$, $E_B/\hbar\omega_0 = 30$,
 $T = 10$ K.

das Elektroabsorptionsspektrum in Abb. 26 aufgetragen worden. Der Vergleich der Linienform mit Abb. 23d läßt erkennen, daß die wesentliche Form des Spektrums bewahrt wird. Oszillationen zwischen den Phonon-Satelliten können infolge der Schwachfeld-Näherung nicht auftreten.

Neben den Spektren zu sehr tiefen Temperaturen, für die der allgemeine Ausdruck (4.7) (mit oder ohne Lorentz-Dämpfung) benutzt werden kann, ist besonders der Fall von Interesse, wenn die Multiphonon-Feinstruktur der Spektren völlig verschwunden ist, wie es bei höheren Temperaturen i. a. beobachtet wird. Dies kann numerisch einfach dadurch simuliert werden, daß die Einhüllende von $\alpha(\omega, \bar{0})$ benutzt wird, um $\Delta\alpha(\omega)$ gemäß (4.16) zu berechnen. Es entstehen Kurven, die ähnlich zu den aus der Elektrooptik bekannten Schwach-

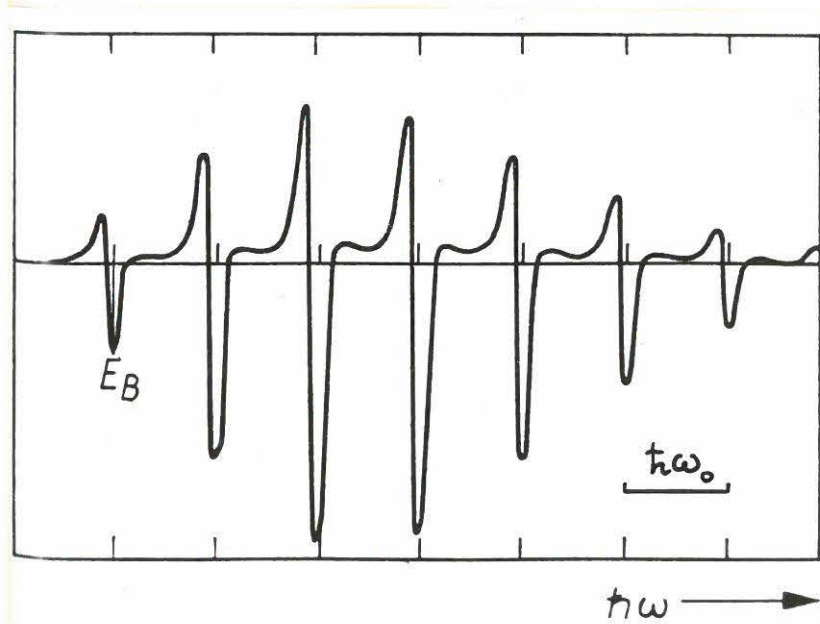


Abb.26

Schwachfeld-Näherung nach
(4.16) mit Lorentz-Ver-
breiterung $\gamma = 0.04$.

Parameter: $S = 2.5$, $T = 10$ K
 $E_B/\hbar\omega_0 = 30$

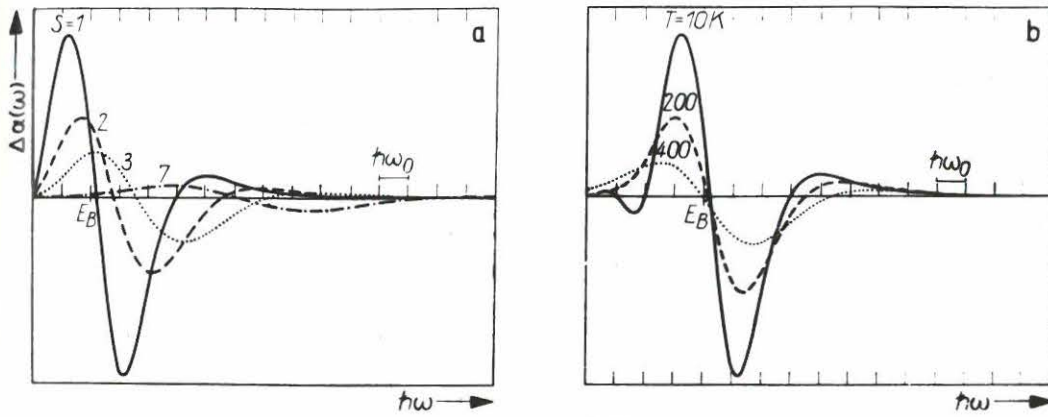


Abb.27 Schwachfeld-Spektrum ohne Lorentz-Verbreiterung für a) verschiedene Elektron-Phonon-Kopplungsstärken ($E_B/\hbar\omega_0 = 30$, $T = 10$ K); b) verschiedene Temperaturen ($E_B/\hbar\omega_0 = 30$, $S = 1$)

feld-Spektren einer gedämpften Wurzelkante verlaufen /96/. Sie sind für verschiedene Kopplungsstärken S und Temperaturen T in Abb. 27 dargestellt. Um die Güte der Schwachfeld-Näherung zu charakterisieren, hat man diese Kurven mit den scharf strukturierten nach Gleichung (4.7) zu vergleichen, nachdem letztere über dem Energieintervall der effektiven Phononenergie $\hbar\omega_0$ gemittelt wurden, um hier ebenfalls die Situation höherer Temperaturen zu simulieren. Der Vergleich der Formeln (4.16), (4.7) und der Mittlung von (4.7) ist in Abb. 28 sichtbar gemacht. Es ist das Parameterverhältnis $\sqrt{2}\Gamma/\theta_{||} = 1.3$ verwendet worden, für das bereits eine annähernde Übereinstimmung von (4.16) und dem gemittelten Spektrum (4.7) besteht. Eine weitergehende Analyse zeigt, daß im Falle

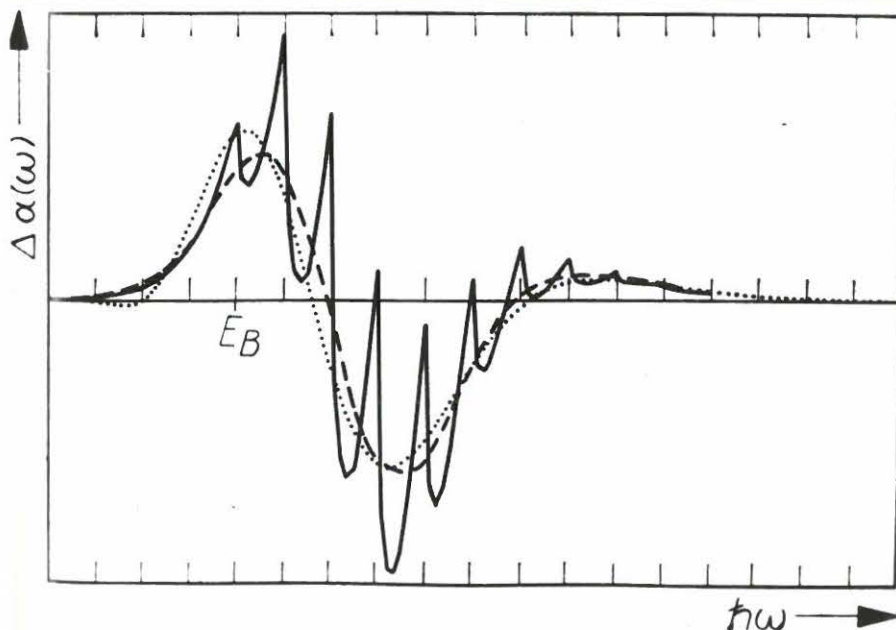


Abb.28

Vergleich von Schwachfeld-Näherung (4.16) (gepunktet) mit dem gemittelten Spektrum nach (4.7) (gestrichelt) mit den Parametern $\hbar\theta_{||} = 39$ meV, $\hbar\omega_0 = 20$ meV, $T = 10$ K, $S = 3$, $\sqrt{2}\Gamma/\theta_{||} = 1.3$.

Für die gepunktete Kurve wurde die Einhüllende des Spektrums $\alpha(\omega, \bar{0})$ benutzt. Die ausgezogene Kurve entspricht der Linienform nach (4.7).

$\sqrt{2}\Gamma/\Omega_{\parallel} \geq 3$ die Kurven praktisch nicht mehr zu unterscheiden sind.

4.3. Bestimmung empirischer Zentrenparameter aus dem Elektroabsorptionsspektrum

Elektroabsorptionsmessungen im starken Feld ($\omega_0/\theta_{\parallel} \ll 2\bar{N}+1$) liefern die Information über die energetische Lage von $E_B + \Delta_{FC}$ (\approx erster Nulldurchgang) und bei tiefen Temperaturen die Energie des effektiven Phonons $\hbar\omega_0$ durch die Feinstruktur des Spektrums. (Bei Kopplung an zwei Moden ist die für optische Übergänge modifizierte Formel (3.50) heranzuziehen.)

Bei Anwendung schwacher Felder kann bereits im Falle hoher Temperaturen eine zusätzliche Information gewonnen werden, denn wie aus Abb. 27 deutlich wird, zeigen die Spektren zwei charakteristische Eigenschaften: Das Minimum liegt nahe $E_B + \Delta_{FC}$ (der Fehler ist von derselben Größenordnung wie bei starken Feldern) und die Halbwertsbreite des negativen Peaks beträgt etwa $w \approx \sqrt{2} \hbar\Gamma$, d. h.

$$w \approx \sqrt{2S} \hbar\omega_0 \sqrt{2\bar{N}+1} \quad . \quad (4.18)$$

Eine vollständige Information liefern dagegen Messungen im schwachen Feld bei sehr tiefen Temperaturen. Der erste Peak (Null-Phonon-Linie) gibt sehr genau die Position der Traptiefe E_B an. Das Maximum der Einhüllenden des Spektrums liegt bei $E_B + \Delta_{FC}$. Aus dem äquidistanten Abstand der Hauptmaxima liest man die effektive Phononenergie $\hbar\omega_0$ ab. Schließlich kann noch durch Anpassung an die Oszillationsweite $\hbar\theta_{\parallel}$ bestimmt werden, woraus bei bekannter Feldstärke auf die Bandmasse in Feldrichtung geschlossen werden kann.

4.4. Vergleich mit dem Experiment: Ni^{2+} in ZnSe

In Abb. 29 ist der Vergleich des Elektroabsorptionsspektrums des an Ni^{2+} in ZnSe gebundenen Exzitons /97/ mit der theoretischen Linienform nach Formel (4.7) dargestellt. Die benötigten Parameter

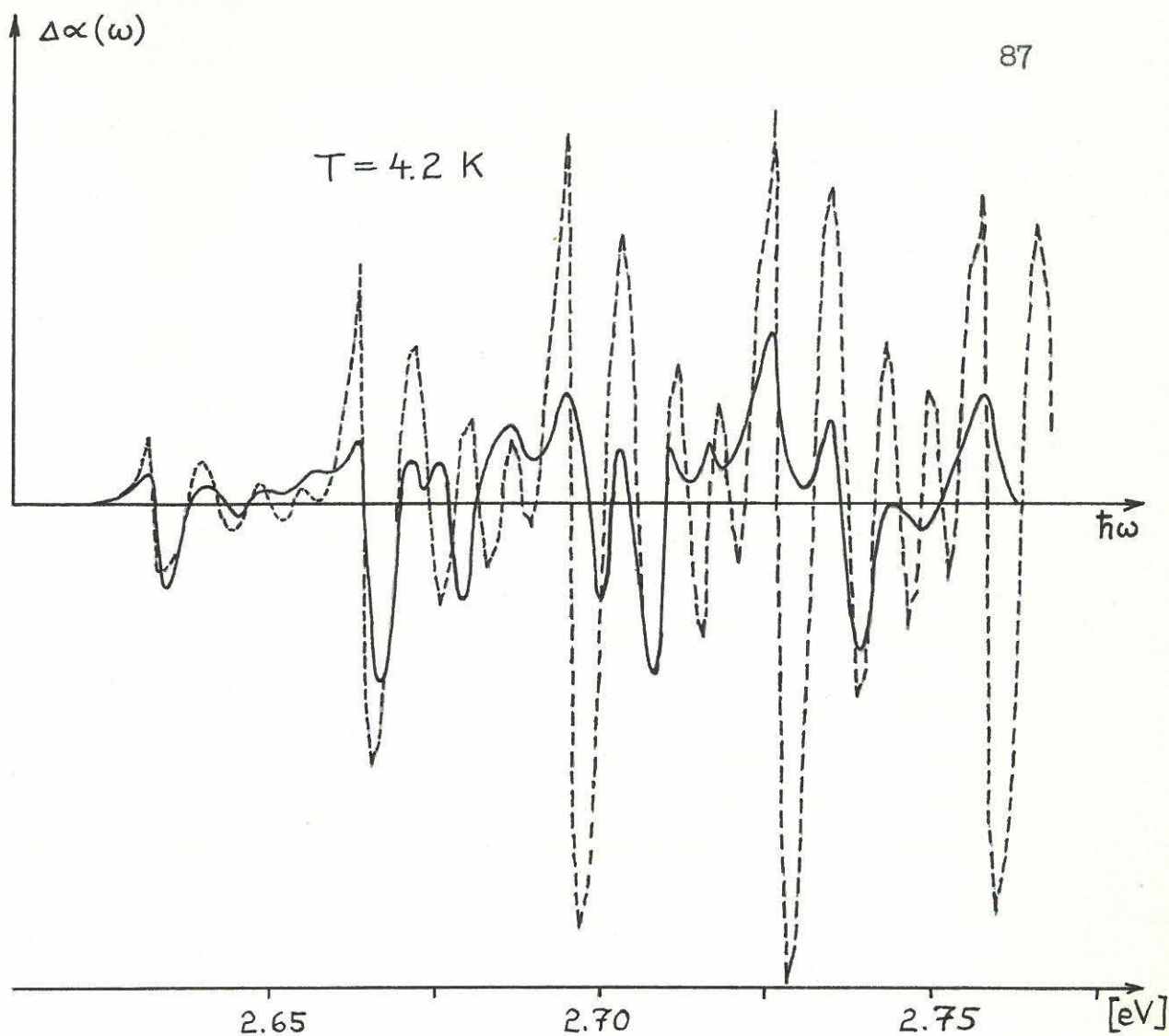


Abb.29 Vergleich von (4.7) (gestrichelte Kurve) mit dem gemessenen Elektroabsorptionsspektrum des an Ni^{2+} in ZnSe gebundenen Exzitons /97/. Parameter: $E_B = 2.637$ eV, $\hbar\omega_0 = 22.1$ meV, $S = 3.5$, $\hbar\theta_{||} = 3.5$ meV.

können der experimentellen Kurve wie folgt entnommen werden: Lage des ersten Maximums = thermische Bindungsenergie $E_V + 2.637$ eV; Oszillationsweite \Rightarrow elektrooptische Energie $\hbar\theta = 3.5$ meV; Abstand der Hauptmaxima = effektive Phononenergie $\hbar\omega_0 = 22.1$ meV; Maximum der Einhüllenden $\Rightarrow E_B + S\hbar\omega_0 \Rightarrow S = 3.5$.

Alle wesentlichen Peaks des Spektrums können im Rahmen der einfachen Theorie erklärt werden. Die hauptsächlichen Ursachen für die auftretenden Abweichungen sind folgende:

- Die unberücksichtigt gelassene Lebensdauererweiterung führt zur Glättung der Kurve, insbesondere der 3. und 4. Oszillationen (vgl. Abb. 26).
- Offenbar ist dem Spektrum ein zweites mit $E_B = E_V + 2.670 \text{ eV}$ überlagert.
- Wenn es sich bei $E_B = E_V + 2.637 \text{ eV}$ um die Energie des 1s-Exziton-Niveaus handelt, können Coulombeffekte dominant werden. Dann ist einerseits der Feldeinfluß auf den gebundenen Zustand nicht mehr zu vernachlässigen, andererseits ist die Kontinuumszustandsdichte nicht mehr durch die elektrooptische Funktion F beschreibbar.
- Da es sich um einen Löcherübergang Störstelle - Valenzband handelt, ist zu erwarten, daß die Entartung an der Valenzbandoberkante die Form der Null-Phonon-Linie wesentlich ändert- auch dann ist die Funktion F nicht mehr verwendbar /98/.
- Im Energiebereich $E > E_B + \Delta_{FC}$ führt sowohl die Nichtparabolizität des Bandes als auch die Überlagerung des Spektrums mit dem Bandausläufer ($E_g = 2.8 \text{ eV}$) zu Modifikationen.

5. Thermische Übergänge an geladenen Zentren

5.1. Nullfeld-Emissionsrate an geladenen Defekten

Von großem Interesse ist die Frage, ob und wie sich die Feldabhängigkeit der Raten auch zur Interpretation des Ladungszustandes der Störstelle heranziehen läßt. Die Berücksichtigung eines Coulombanteils im Potential $U(\bar{x})$ bedeutet eine drastische Verkomplizierung des Problems, so daß eine analytische Diskussion nur noch unter stark vereinfachenden Annahmen möglich ist. Bekanntlich ist schon das quantenmechanische Problem "Wasserstoffatom im elektrischen Feld" nicht geschlossen lösbar /99/, so daß für Gleichung (2.33b) Näherungslösungen gefunden werden müssen. Hinzu kommt, daß eine Darstellung der elektronischen Übergangsrate in der Form (2.40) nur exakt ist, wenn die "effektive Masse" des gebundenen Elektrons μ gleich m_c ist. Wie man anhand von Formel (2.43) erkennt, treten sonst schon im feldfreien Fall nichtintegrierbare Ausdrücke mit konfluenten hypergeometrischen Funktionen auf. Im Falle starker Lokalisation ($|\mu| \gg m_c$), was jetzt $r_0 \ll r_z$ impliziert, kann analog zur Rechnung in Anlage 1 die Form (2.40) erreicht werden; andernfalls muß jedoch wieder der als Konsequenz des δ -Potentials auftretende Energienenner approximativ behandelt werden. Zieht man ihn in (2.43) aus dem Integral, entsteht sofort die gewünschte Faktorisierung in Defekt- und Kontinuumszustandsdichte - eine Näherung, die für Niveaus in der Mitte des Gaps in breitlückigen Halbleitern wegen $\epsilon \sim -E_g/2$ unproblematisch ist. Bei flacheren Niveaus, insbesondere wenn der Feldeinfluß auf den coulombartigen Defekt einen nicht zu vernachlässigenden Effekt darstellt, kann zwar die totale elektronische Übergangsrate unter Benutzung von analytischen Näherungen für Anfangs- und Endzustände direkt berechnet werden, doch nicht ohne Approximationen, die der genannten äquivalent sind. Deshalb und wegen der noch zu diskutierenden Möglichkeit, feldabhängige Zustandsdichten durch Konvolution von feldfreien Zustandsdichten mit bestimmten Airy-Funktionen darzustellen, soll auf die Produktdarstellung (2.40) nicht verzichtet werden. Diese ist solange praktikabel, wie der Ausgangszustand hinreichend stark lokalisiert ist, d. h. seine Überlappung mit dem Kontinuum nur in einer kleinen Umgebung von $\bar{x} = 0$ wesentlich ist.

Im Rahmen der Darstellung (2.40) ist das feldfreie Problem analytisch lösbar. Die Dichte des Grundzustandes ergibt sich mit (2.29) und (2.32) zu

$$\rho_t(\varepsilon) = A^2(r_0) \frac{1}{(4\pi r_0)^2} \delta(E_B^0 + \varepsilon). \quad (5.1)$$

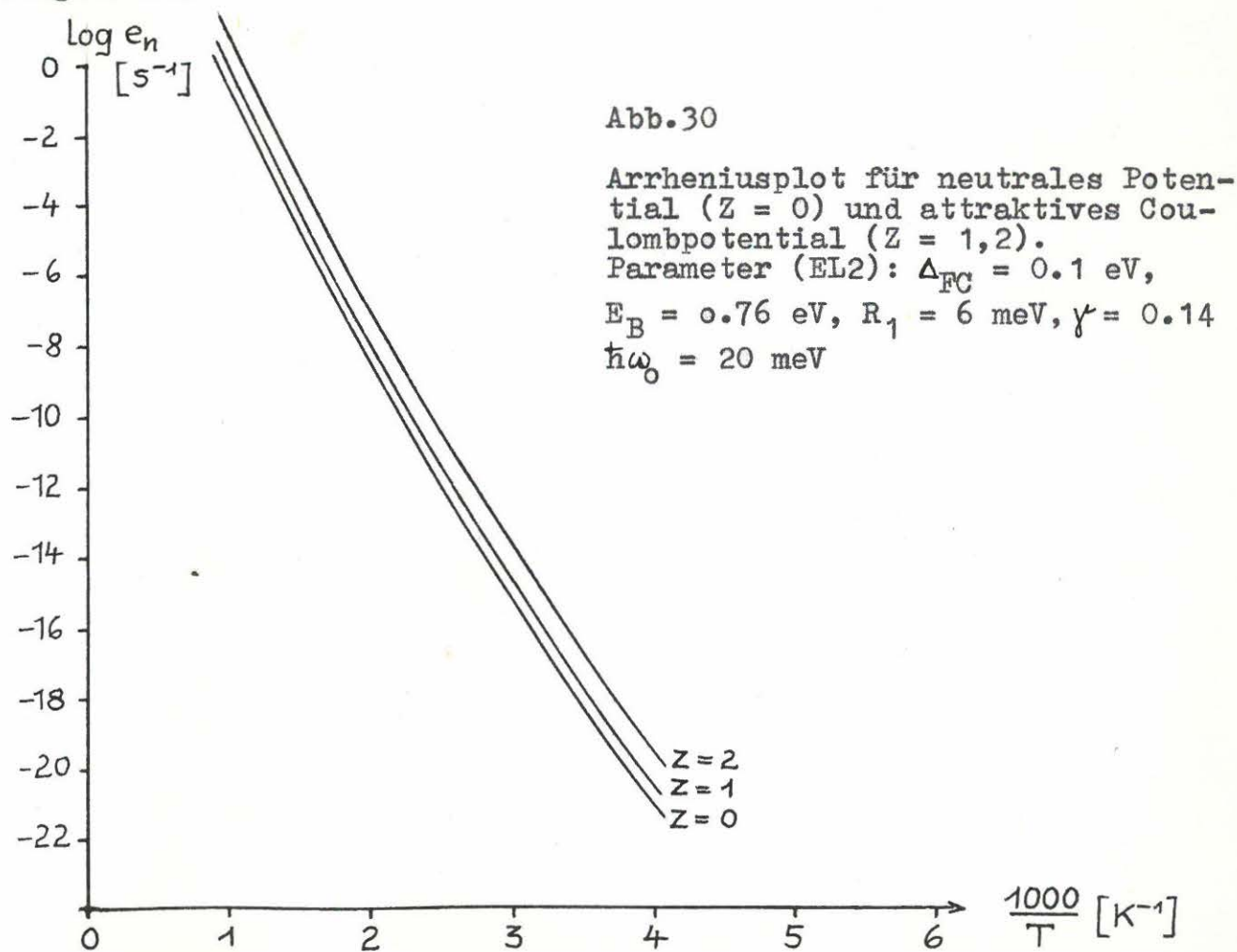
Dabei tritt in $A(r_0)$ (genau wie im Koster-Slater-Parameter \tilde{V}_0) neben dem Lokalisationsradius r_0 ($r_0^2 = \hbar^2 / (2\mu E_B^0)$) der effektive Bohrsche Radius r_Z als Funktion der Masse μ auf ($r_Z^2 = \hbar^2 / (2\mu R_Z)$). Nach (2.24a) ist die effektive Rydbergenergie R_Z ebenfalls eine Funktion von μ . Im weiteren sei sowohl r_Z als auch R_Z eine Funktion der Bandmasse m_c . Für die Kontinuumszustandsdichte ergibt sich die bekannte Form /56/

$$\rho_c(E') = \frac{m_c}{\hbar^2 \pi r_Z} \frac{\pm 1}{1 - e^{\mp (2\pi / r_Z \alpha_c \sqrt{E'})}}, \quad (5.2)$$

wobei das obere Vorzeichen für attraktives Coulombpotential, das untere für repulsives gilt. Betrachtet man nun einen donatorartigen (leitungsband-abgespaltenen) Defekt mit attraktivem Coulombpotential für Elektronen, dann kann mittels (5.1), (5.2), (2.27), (2.32) und (3.27) die elektronische Übergangsrate durch die Beziehungen

$$D(E, E') = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{|B_0^{cv}(\bar{q}_0)|^2} \sqrt{\frac{E_B^0}{\gamma_c}} \left[1 - 4\zeta(3) \left(\frac{R_Z}{E_B^0 \gamma_c} \right)^{3/2} \right]^{-2} \left[E' + \frac{E_B^0}{\gamma_c} + \frac{\hbar^2 q_{0z}^2}{2m_c} \right]^{-2} \times \\ \times \frac{1}{1 + 2 \sqrt{\frac{R_Z E_B^0}{\gamma_c}}} \frac{2}{\pi} \delta(E + E_B^0) \frac{2\pi \sqrt{R_Z} \theta(E')}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{\frac{R_Z}{E'}})} \quad (5.3a) \\ \\ \sqrt{\frac{E_B^0}{\gamma_v}} \left[1 + 4\zeta(3) \left(\frac{R_Z}{E_B^0 \gamma_v} \right)^{3/2} \right]^{-2} \left[E' + \frac{E_B^0}{\gamma_v} \right]^{-2} \frac{1}{1 - 2 \sqrt{\frac{R_Z E_B^0}{\gamma_v}}} \frac{2}{\pi} \times \\ \times \delta(E + E_g - E_B^0) \frac{2\pi \sqrt{R_Z} \theta(E')}{\exp(2\pi \sqrt{\frac{R_Z}{E'}}) - 1} \quad (5.3b) \end{array} \right.$$

ausgedrückt werden. In (5.3) ist $\gamma_v = m_c/\mu_v$, der die Lokalisation des gebundenen Elektrons modellierende Parameter. Der Grenzfall der neutralen Störstelle folgt aus (5.3) unmittelbar durch $R_Z \rightarrow 0$ und $r_Z \rightarrow \infty$. Der analytische Ausdruck für die Koster-Slater-Parameter und Normierungskonstanten in (5.3) basiert auf der Voraussetzung $R_Z \ll E_B^0$ (sh. (2.27)). Den entscheidenden Effekt auf die Emissionsrate hat die veränderte Kontinuumszustandsdichte: Läßt man die Lage des Niveaus konstant und variiert den Ladungszustand, so stehen bei attraktiver werdendem Coulombpotential immer mehr Endzustände zur Verfügung; für repulsives Potential gilt das Gegenteil. Entsprechend liegen die Arrhenius-Kurven verschoben, ohne ihre Form wesentlich zu ändern, wie in Abb. 30 dargestellt. Lediglich eine leichte Vergrößerung der Abstände zu tiefen Temperaturen hin ist zu beobachten. Diese erklärt sich aus der Tatsache, daß mit sinkender Temperatur nur ein immer kleiner werdender Bereich oberhalb der Kontinuumschwelle zur Rate beiträgt, wo die Unterschiede zwischen den Zustandsdichten zu verschiedenem Z maximal werden. Zur Auswertung im Einmoden-Modell wurde (5.3) in (3.25) eingesetzt.



5.2. Analytische Lösung für die feldabhängige Emissionsrate an geladenen Defekten

5.2.1. Diskussion der Starkfeld-Näherung

Von Mitte der 60er bis Mitte der 70er Jahre gab es im Zusammenhang mit Untersuchungen zu Exzitonen-Effekten in der Elektroabsorption intensive Bemühungen, den Feldeinfluß auf Wannier-Mott-Exzitonen numerisch und analytisch zu berechnen (/99/ bis /105/). Neben sehr aufwendigen numerischen Verfahren, mit denen die Greensche Funktion des Problems erhalten wurde /104/, sind auch teilweise analytisch lösbare Modelle /99/ und Kombinationen von WKB-Näherungen und numerischen Rechnungen /105/ diskutiert worden.

Im Falle thermischer Raten an tiefen Störstellen werden solche Methoden wegen des zusätzlichen stark bindenden Potentials, der Elektron-Phonon-Kopplung und der beabsichtigten Untersuchung der Änderung der Raten mit der Feldstärke völlig unpraktikabel. Benötigt werden analytische Ausdrücke, die die numerische Auswertung auf ein Minimum reduzieren und physikalisch einfach interpretierbar sind. Eine solche analytische Lösung ist von Enderlein /100/ für den Fall starker elektrischer Felder angegeben worden, der jetzt durch die Bedingung $\hbar\theta \gg R_Z$ zu charakterisieren ist.

Es ist gezeigt worden, daß diese Lösung im Bereich der Störungstheorie versagt /101/. Im folgenden soll untersucht werden, ob der Gültigkeitsbereich über die Relation $\hbar\theta \gg R_Z$ hinaus erweitert werden kann. Dazu wird die Gleichung (2.33b) als Anfangswertproblem formuliert /100/. Dann ist die Startlösung von

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi_E = \left\{ \hbar^{-1} H_H + \theta_c^3 t^2 + \lambda t \hat{p}_z \right\} \phi_E \quad (5.4)$$

$\bar{\lambda} (= 0, \lambda)$

mit

$$\bar{\lambda} = e\bar{F}/m_c, \quad H_H = \frac{\bar{p}^2}{2m_c} - \frac{e^2 Z}{\epsilon_s |\bar{x}|} \quad \text{und} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} = \hat{p}_z$$

gleich der gewöhnlichen Wasserstoff-Wellenfunktion $\phi_E(t=0) = \varphi_{Elm}(\mathbf{x})$. Der Ansatz

$$\phi_E(\bar{x}, t) = \exp\left\{-i\theta_c^3 t^3/3\right\} \exp\left\{-i\hbar^{-1} H_H t\right\} \mathcal{F}_E(\bar{x}, t) \quad (5.5)$$

führt nach Transformation auf natürliche Einheiten ($\bar{x} = \bar{x}' r_Z$; $\bar{p} = \bar{p}' \hbar / r_Z$; $t = t' \sqrt{r_Z / \lambda}$) auf eine Bestimmungsgleichung für die gesuchte Funktion $\xi_E(\bar{x}, t)$ in der Form

$$-i \frac{\partial}{\partial t'} \xi_E(\bar{x}; t') + t' \hat{p}'_Z (\sqrt{r_Z / \lambda} t') \xi_E(\bar{x}; t') = 0. \quad (5.6)$$

Eine Näherungslösung von (5.6), die die Anfangsbedingung erfüllt und für $r_Z / \lambda \rightarrow 0$ exakt wird, ist

$$\xi_E^{(0)}(\bar{x}; t') = \varphi_{Elm}(r_Z \bar{x}' - r_Z \omega_Z t'^2 / 2). \quad (5.7)$$

Stellt man die Gleichung (5.6) in der Basis der Wasserstoff-Wellenfunktionen dar und setzt die Näherungslösung (5.7) ein, so wird der dadurch entstehende Fehler gleich

$$t' \sum_{lm'} \langle Elm | p'_Z | E' l' m' \rangle \left\{ \exp \left[-i \hbar^{-1} (E - E') t' \sqrt{\frac{r_Z}{\lambda}} \right] - 1 \right\} \eta_{E' l' m'}(E, t'). \quad (5.8)$$

In (5.8) sind $\eta_{E' l' m'}(E, t')$ die Entwicklungsfunktionen der gesuchten Zustände ξ nach Wasserstoff-Wellenfunktionen. Offenbar geht der Fehler (5.8) für verschwindendes Coulomb-Potential ($r_Z \rightarrow 0$) gegen Null (Franz-Keldysh-Grenzfall). Auch bei Abwesenheit eines Feldes ($\lambda \equiv 0$) ist (5.7) exakt, da dann die geschweifte Klammer in (5.8) ebenfalls verschwindet.

Aufgrund des Faktors $\exp(-i \theta_c^3 t^3 / 3)$ in (5.5) tragen nur Zeiten $t' \sim (R_Z / eFr_Z)^{1/3}$ wesentlich zum Aufbau der Zustände ϕ_E bei. Dies bedeutet für die geschweifte Klammer in (5.8)

$$\left\{ e^{-i \hbar^{-1} (E - E') t' \sqrt{\frac{r_Z}{\lambda}}} - 1 \right\} \approx \left\{ e^{-i (R_Z / eFr_Z)^{2/3} (E - E') / R_Z} - 1 \right\} \equiv \left\{ e^{-i (E - E') / \hbar \theta_c} - 1 \right\}. \quad (5.9)$$

Anhand von (5.9) erkennt man, daß, solange Matrixelemente mit $E - E' \sim R_Z$ wesentlich beitragen, nur die Starkfeld-Bedingung $R_Z \ll eFr_Z$ die Näherungslösungen (5.7) rechtfertigt. Sollten jedoch Matrixelemente $\langle Elm | p'_Z | E' l' m' \rangle$ mit $E - E' \ll R_Z$ die wesentli-

chen Beiträge liefern, würde die Starkfeld-Bedingung entscheidend abgeschwächt werden.

Durch direkte Berechnung von $(Elm|p_z'|E'l'm')$ kann man zeigen, daß für Energien $E < 0$ und $E' > 0$ das Gegenteil gilt. In Abb. 31a ist das Matrixelement $(100|\partial/\partial z|E'10)$ des 1s-Grundzustandes mit Kontinuumszuständen E' dargestellt (berechnet mit Hilfe von /106/).

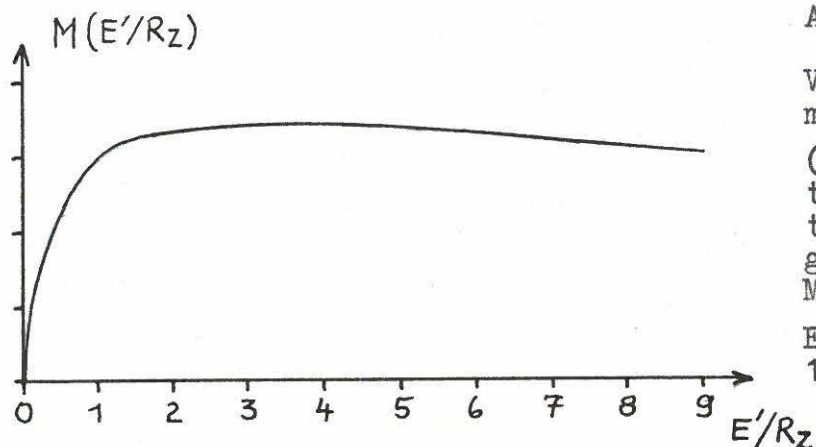


Abb.31a

Verlauf des Matrixelements $M(E'/R_Z) = (100|\partial/\partial z|E'10)$ als Funktion von E' : (E' in Einheiten der eff. Rydbergenergie)
 M strebt für $E' \rightarrow 0$ wie $E'^{3/4}$ und für $E' \rightarrow \infty$ wie $1/\sqrt{E'}$ gegen Null.

Daß hier trotz der schwachen Konvergenz für $E' \gg R_Z$ die Starkfeld-Näherung noch brauchbar ist, liegt an den Entwicklungsfunktionen $\psi_{E'l'm'}(E, t')$, die scharf um $E = E'$ lokalisiert sind, denn in der kleinen Zeit $t' \sim (R_Z/eFr_Z)^{1/3}$ hat sich der Zustand $\psi_E(\bar{x}; t')$ noch nicht weit von seinem Anfangswert $|Elm\rangle$ entfernt. Ist E die Energie eines Kontinuumszustandes, dann sind aufgrund dieses Umstandes besonders die Streumatrixelemente mit $E > 0$, $E' > 0$ wichtig. Diese Matrixelemente $(E|\partial/\partial z|E')$ kann man allgemein durch hypergeometrische Funktionen ausdrücken (/106/, Seite 518) und näherungsweise durch

$$|(E|\partial/\partial z|E')| \sim \frac{(R_Z/E)^2}{\left| \left(\frac{E'}{E} \right)^2 - 1 \right|} \frac{1}{1 - \exp(-2\pi\sqrt{\frac{R_Z}{E}})} \quad (5.10)$$

angeben. Wie aus Abb. 31b zu ersehen ist, muß in der Nähe der Kontinuums-kante das relevante Energieintervall, in dem das Matrixelement die wesentlichen Beiträge liefert, durch $\Delta E \sim R_Z$ charakterisiert werden. Erst weit im Kontinuum strebt ΔE gegen Null, d. h., für freie Teilchen ist jedes elektrische Feld ein starkes Feld. Somit bleibt auch für Kontinuumszustände $\Delta E/R_Z \sim 1$, d. h. auch hier kann die Starkfeld-Bedingung nicht abgeschwächt werden.

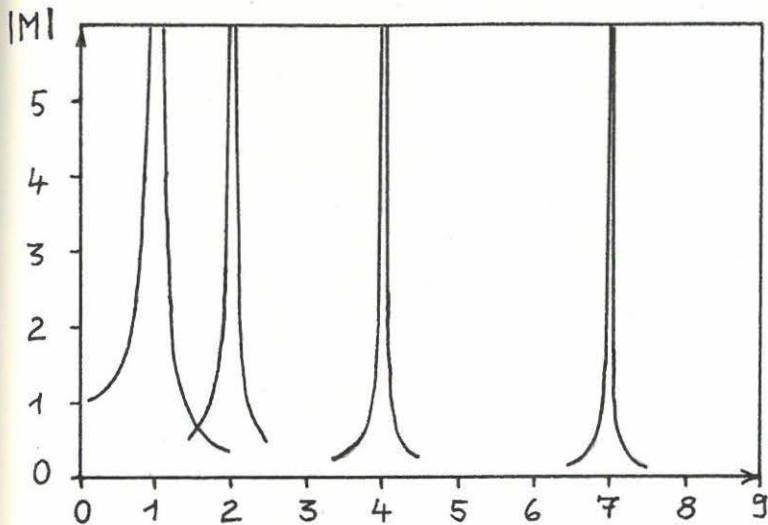


Abb.31b

Ausdehnung des Matrixelements $M = (E|\partial/\partial z|E')$ auf der Energieskala des Kontinuums.

1 - $E'/R_Z = 1$, 2 - $E'/R_Z = 2$,
3 - $E'/R_Z = 4$, 4 - $E'/R_Z = 7$

5.2.2. Lösung im Starkfeld-Fall und Diskussion für typische Parameter

Aufgrund der Voraussetzung $R_Z \ll \hbar\theta$ kann für tiefe Störstellen, die nach wie vor die Bedingung $\hbar\theta \ll E_B^0$ erfüllen sollen, sowohl der Feldeinfluß als auch der Coulomb-Effekt vernachlässigt werden, so daß es ausreicht, für die Dichte des Grundzustandes Formel (5.1) mit $A^2(r_0) \approx 8\pi/r_0$ zu verwenden. Somit ist nur die Kontinuumszustandsdichte zu modifizieren. Um die Näherungslösungen (5.5) und (5.7) verwenden zu können, schreibt man zweckmäßigerweise

$$\rho_c(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im Sp } G_E^- = \frac{1}{2\pi\hbar} \text{Sp} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E - H(t')) \right] \quad (5.11)$$

mit $H(t) = H_H + \hbar\theta_c^3 t^2 - i\lambda\hbar \partial/\partial z$.

Die Spur wird mit dem vollständigen System der $\phi_{Elm}(\bar{x}, t)$ gebildet, wobei wegen $\bar{x} = 0$ nur Zustände mit $m = 0$, $l = 0$ beitragen, so daß sich

$$\rho_c(E') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{E00}(0) \psi_{E00}(\lambda t^2/2) e^{-i\theta_c^3 t^3/3 - it(E-E')/\hbar} \quad (5.12)$$

ergibt. Für attraktives Coulomb-Potential zerfällt die Integration über E in eine Summe über diskrete Niveaus $-E_n$ ($n \geq 1$) und ein Integral über das Kontinuum $E > 0$; beide Anteile sind zu berücksichtigen. Setzt man in (5.12) die Kontinuums-Wellenfunktionen des Wasserstoff-Problems ein und benutzt ihre Integraldarstellung, so erhält man die Kontinuumszustandsdichte in Form eines Dreifachintegrals:

$$\rho_c^>(E') = \frac{\alpha_c^3}{16\pi^3 \hbar \theta_c} \int_0^\infty \frac{dE \sqrt{R_Z}}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{\frac{R_Z}{E}})} \frac{2\pi}{|\Gamma(1 + i\sqrt{\frac{R_Z}{E}})|^2} \times$$

$$\times \int_{-1}^1 d\xi \left[\frac{1+\xi}{1-\xi} \right] i\sqrt{\frac{R_Z}{E}} \int_{-\infty}^\infty dt e^{-it^3/3 - it(E-E')/\hbar\theta_c + it^2 \xi \sqrt{\frac{E}{\hbar\theta_c}}} \quad (5.13)$$

wovon das letzte exakt berechnet werden kann. Es entsteht

$$\rho_c^>(E') = \frac{\alpha_c^3}{4\pi} \sqrt{R_Z} \int_0^\infty \frac{dE}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{\frac{R_Z}{E\hbar\theta_c}})} \int_{-1}^1 d\xi \frac{\left[\frac{1+\xi}{1-\xi} \right] i\sqrt{\frac{R_Z}{E\hbar\theta_c}}}{|\Gamma(1 + i\sqrt{\frac{R_Z}{E\hbar\theta_c}})|^2} \times$$

$$\times \text{Ai} \left[E(1-\xi^2) - \frac{E'}{\hbar\theta_c} \right] e^{-i\xi\sqrt{E} \left[E - \frac{E'}{\hbar\theta_c} \right] + 2i\xi^3 E^{3/2}/3} \quad (5.14)$$

Wegen der Voraussetzung starker Felder kann in (5.14) näherungsweise

$$\left[\frac{1+\xi}{1-\xi} \right] i\sqrt{\frac{R_Z}{E\hbar\theta_c}} \left| \Gamma(1 + i\sqrt{\frac{R_Z}{E\hbar\theta_c}}) \right|^{-2} \approx 1 \quad (5.15)$$

gesetzt werden, womit (5.14) nach einer Transformation der Integrationsvariablen in

$$\rho_c^>(E') \approx \frac{\alpha_c^3}{2\pi} \sqrt{R_Z} \int_0^\infty dE \int_0^\infty d\xi \frac{1}{\sqrt{E + \xi^2}} \frac{1}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{\frac{R_Z}{(E+\xi^2)\hbar\theta_c}})} \times$$

$$\times \text{Ai} \left(E - \frac{E'}{\hbar\theta_c} \right) \cos \left[\xi \left(E - \frac{E'}{\hbar\theta_c} \right) + \xi^3/3 \right] \quad (5.16)$$

übergeht. Offenbar würde $\rho_c^>(E')$ im Limes $R_Z \rightarrow 0$ genau zum bekannten Franz-Keldysh-Resultat (3.29) werden. Eine weitere Näherung besteht darin, daß der Zustandsdichtefaktor und $\sqrt{E + \xi^2}$ an der Stelle $\xi = 0$ aus dem ξ -Integral gezogen werden. Diese Näherung ist um so besser, je tiefer das relevante Energieintervall im Ausläuferbereich liegt, d. h. je eher die Relation $|E'/\hbar\theta_c| \gg 1$ gilt. Gerade für die hier betrachteten Defekte ist wegen $E_B^0 \gg \hbar\theta \gg R_Z$ eine solche Situation gegeben. Sollten jedoch die Übergänge bevorzugt in der Nähe der Kontinuums-kante erfolgen, ist ein solches

Vorgehen nicht möglich. Dies trifft für den Fall mittlerer und schwacher Felder ($\hbar\theta \lesssim R_Z$) zu, für den jedoch schon (5.16) nicht mehr zu beweisen ist.

Mit der genannten Näherung vereinfacht sich (5.16) zu einem Einfachintegral

$$\rho_c^>(E') \approx \frac{\alpha_c^3 \sqrt{R_Z}}{2 \sqrt{\hbar\theta_c}} \int_0^\infty dE \frac{1}{1 - \exp(-2\pi\sqrt{\frac{R_Z}{E}})} \frac{1}{\sqrt{E}} \text{Ai}^2\left(\frac{E-E'}{\hbar\theta_c}\right), \quad (5.17)$$

das die Konvolution des Coulomb-Kontinuums im starken elektrischen Feld mit der Funktion $\text{Ai}^2((E-E')/\hbar\theta_c)/\sqrt{E}$ ausdrückt. In Abb. 32a ist die im Feld aufgeweichte Kontinuums-kante dargestellt. Gleichzeitig sind das Ergebnis für repulsives Potential und die Nullfeld-Zustandsdichte eingezeichnet.

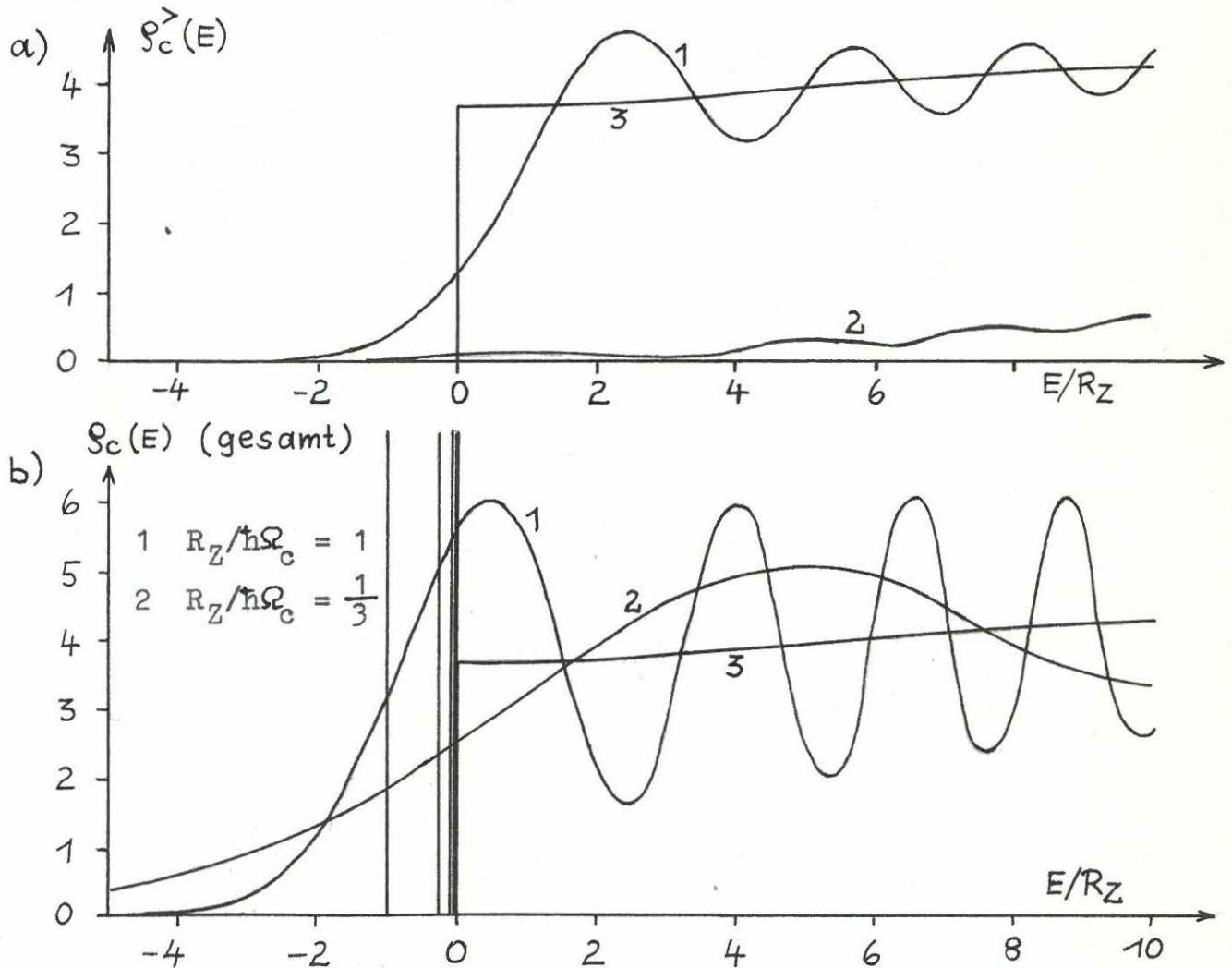


Abb.32 a) feldmodifizierte Kontinuumszustandsdichte bei attraktivem (1) und repulsivem (2) Coulomb-Potential. 3 - feldfreie Kontinuumszustandsdichte

b) Gesamtzustandsdichte für verschiedene Feldstärken

Die analoge Rechnung für die diskreten Zustände führt auf den Ausdruck

$$\rho_c^<(E') = \frac{\alpha_c^3}{2\pi\sqrt{\hbar\theta_c}} \sum_n \frac{R_Z}{n^2} \int_{-\frac{1}{n}\sqrt{\frac{R_Z}{\hbar\theta_c}}}^{\frac{1}{n}\sqrt{\frac{R_Z}{\hbar\theta_c}}} d\lambda \operatorname{Ai}\left[\lambda^2 - \frac{R_Z/n^2 + E'}{\hbar\theta_c}\right] \times \exp\left\{-\lambda\left[\lambda^2 - \frac{R_Z/n^2 + E'}{\hbar\theta_c}\right] + \lambda^3/3\right\}, \quad (5.18)$$

der (5.16) äquivalent ist. Im Ausläuferbereich $|E'/\hbar\theta_c| \gg 1$ kann im Integral von (5.18) λ^2 gegenüber dem restlichen Argument vernachlässigt werden. Wegen $R_Z \ll \hbar\theta_c$ liefert dann eine Entwicklung nach Potenzen der Integrationsgrenze in erster Näherung die einfache Beziehung /100/

$$\rho_c^<(E') = \frac{\alpha_c^3}{\pi\hbar\theta_c} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{R_Z^{3/2}}{n^3} \operatorname{Ai}\left[-\frac{R_Z/n^2 + E'}{\hbar\theta_c}\right], \quad (5.19)$$

die jedoch nur im Ausläuferbereich gilt, was schon daraus ersichtlich wird, daß im Gebiet $E' > R_Z$ negative Zustandsdichten auftreten können. Jedoch auch (5.19) geht für $F \rightarrow 0$ in den korrekten Nullfeld-Grenzwert über.

In Abb. 32b ist die Gesamtzustandsdichte $\rho_c^> + \rho_c^<$ nach (5.17) und (5.19) aufgetragen. Am Beispiel der Parameter des EL2-Zentrums in GaAs ist in Abb. 33 der Effekt eines einfach- und doppelt attraktiven Potentials auf die thermische Emissionsrate dargestellt. Der mit zunehmendem Coulomb-Potential flacher werdende Kurvenverlauf ist Ausdruck der erhöhten Tunnelwahrscheinlichkeit aufgrund der wachsenden Dichte der Endzustände. Im Bereich der experimentell realisierten Feldstärken beträgt der maximale Unterschied zwischen neutraler und doppelt attraktiver Störstelle etwa eine halbe Größenordnung. Dies zeigt deutlich, daß bereits im Starkfeld-Fall ($R_Z \ll \hbar\theta_c$) der Ladungszustand einen nicht zu vernachlässigenden Effekt hat.

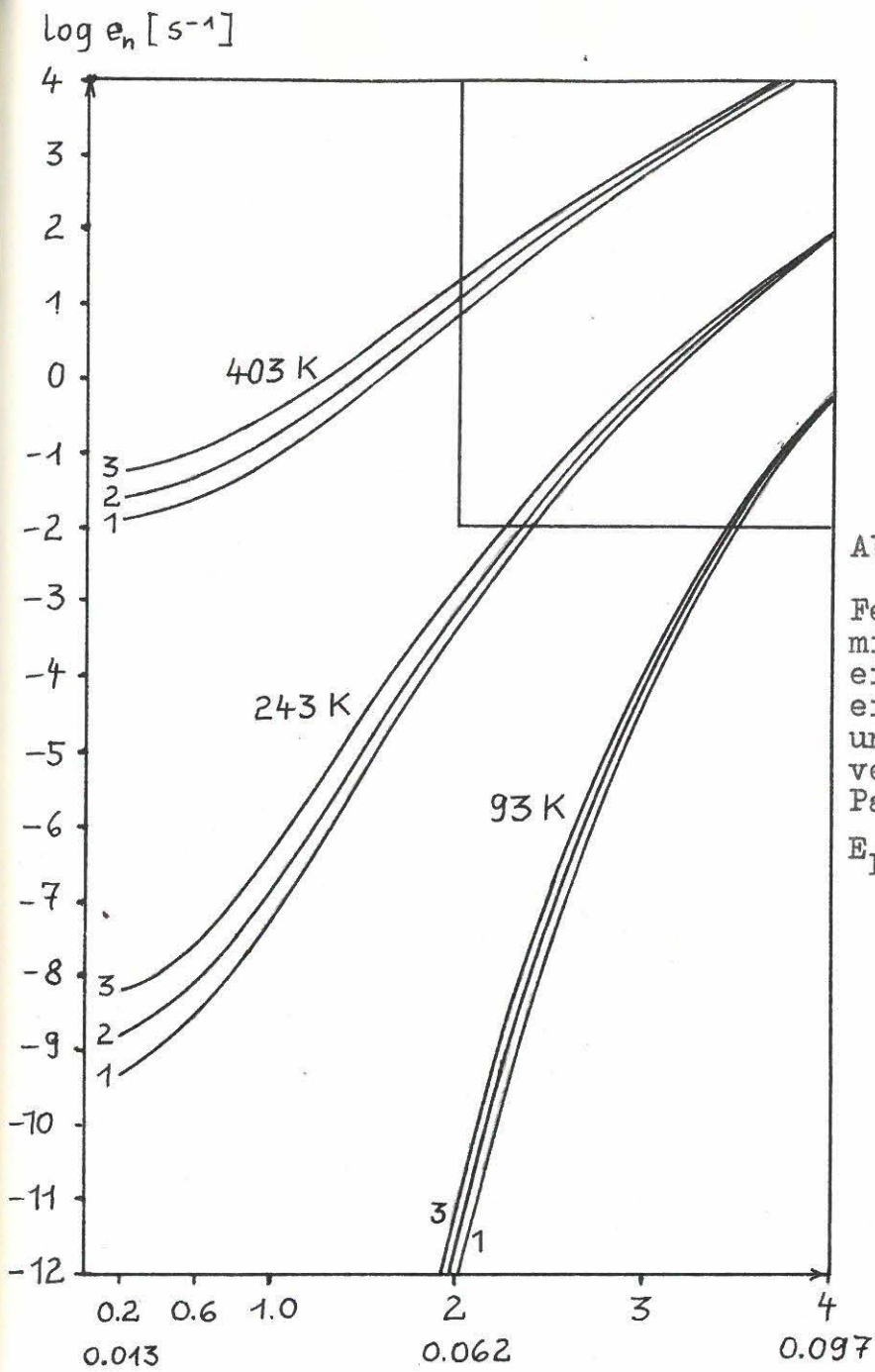


Abb.33

Feldabhängigkeit der thermischen Emissionsrate für ein ungeladenes (1), ein einfach attraktives (2) und ein zweifach attraktives Zentrum (3).
 Parameter (EL2): $\Delta_{FC} = 0.1\text{eV}$
 $E_B = 0.76\text{ eV}$, $R_1 = 0.006\text{ eV}$.

$\times 10^5\text{ Vcm}^{-1}$ Feldstärke
 eV elektroopt. En. $\hbar\theta_c$

Allerdings kann man bei der Anpassung kaum noch zwischen Ladungseffekten und Multiphonon-Effekten unterscheiden, denn wie aus der Diskussion in Abschnitt 3.7.1. hervorgeht, vermag eine Änderung der Bindungsenergie um etwa 50 meV bzw. die Vergrößerung des Huang-Rhys-Faktors von 5 auf 9 denselben Effekt zu produzieren.

5.2.3. Der Fall schwächerer Felder - Koinzidenzeffekte

Für mittlere ($\hbar\theta \approx R_Z$) und schwache elektrische Felder ($\hbar\theta \ll R_Z$) ist eine analytische Lösung des Problems der feldabhängigen Emissionsrate an geladenen Defekten strenggenommen nicht möglich. Aufgrund der Ergebnisse des letzten Abschnitts sind jedoch nur solche Felder als effektive Sonde zur Bestimmung des Ladungszustandes der Störstellen anzusehen.

Wird die Bindung primär durch das kurzreichweitige, stark lokalisierende Potential verursacht, so kann jetzt erst recht der Feldeinfluß auf die Störstelle vernachlässigt werden. Der dann noch verbleibende Feldeffekt infolge Änderung der Dichte der Endzustände soll unter folgenden Aspekten diskutiert werden:

- a) Übergänge in höhere gebundene Zustände werden wegen der niedrigen Feldstärke vernachlässigt.
- b) Formel (5.17), d. h. die typische Konvolution der feldfreien Zustandsdichte mit $Ai^2((E-E')/\hbar\theta)/\sqrt{E'}$, wird wegen ihrer physikalischen Plausibilität im Sinne einer Verallgemeinerung auch auf den Fall schwächerer Felder angewendet. Eine gewisse Berechtigung dafür ergibt sich aus der Tatsache, daß die Gültigkeit der von Enderlein /100/ gefundenen Näherung ((5.5) und (5.7)) durch numerische Rechnungen von Blossey /104/ zum Feldeinfluß auf Exzitonen auch noch für das Feldstärkegebiet $\hbar\theta \approx R_Z$ nachgewiesen wurde. Darüber hinaus besteht Grund zu der Annahme, daß auch für $\hbar\theta < R_Z$, insbesondere was den Einfluß auf die Kontinuumszustände betrifft, wesentliche Effekte richtig wiedergespiegelt werden, denn genügend tief im Kontinuum wird die Näherung für beliebig kleine Felder exakt.
- c) Wenn $\hbar\theta \ll R_Z$ gilt, ist auch $\hbar\theta \ll \hbar\omega_0$ zu erwarten, d. h. Koinzidenzeffekte werden wesentlich.

Im Falle schwächerer Felder ($\hbar\theta < R_Z$ bzw. $\hbar\theta \ll R_Z$) kann in (5.17) die Coulomb-Zustandsdichte durch eine Stufenfunktion ersetzt werden. Dann erhält man mit /51/

$$\int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} Ai^2(\varepsilon - y) \equiv Ai_1(-y)/2 \quad (5.20)$$

das Ergebnis

$$\varrho_c(E') \approx \frac{\alpha_c^3}{4} \sqrt{R_Z} \text{Ai}_1\left(-\frac{E'}{\hbar\theta_c}\right), \quad (5.21)$$

das in die allgemeine Formel (3.25) einzusetzen ist.

Praktisch relevant wird der Fall schwächerer Felder durch Messungen von Irmscher /5/ an Sauerstoff- und Wasserstoff-korrelierten Donatoren in Silizium (E1 und E3' in /5/) bei Feldstärken von 2×10^3 bis 3×10^4 Vcm^{-1} . Die Emissionsrate dieser Defekte zeigt eine überraschend starke Feldabhängigkeit mit einer Kurvenkrümmung, wie sie bei solch schwachen Feldern entsprechend der Kurvendiskussion in Abschnitt 3.3.3. nicht zu erwarten ist. Für das E1-Zentrum sind die Meßwerte in Abb. 34a aufgetragen. Gleichzeitig ist die Emissionsrate, berechnet im Einmoden-Modell, für neutrales (Abb. 34a) und attraktives Potential (Abb. 34b) dargestellt. Der Feldstärkebereich entspricht elektrooptischen Energien von 2.7 meV bis 10.2 meV, so daß im Einmoden-Modell der Kurvenverlauf völlig durch Koinzidenzeffekte bestimmt wird. In den eingezeichneten acht Kurven wurde die effektive Phononenergie von 64 meV (\sim opt. Phonon in Si) bis auf 43 meV verringert. Die sich daraus ergebende relative Lage der Punkte $-E_B + n\hbar\omega_0$ zur Kontinuums-kante bestimmt den Kurvenverlauf. Dabei ist aufgrund der geringen Feldstärke und der relativ tiefen Temperatur ($T = 72$ K) nur der der Kante am nächsten gelegene Punkt entscheidend. Liegt er nur wenig unterhalb der Kante (1), so ändert sich die Emissionsrate sehr stark mit negativer Krümmung. Die Feldabhängigkeit wird schwächer, wenn der Koinzidenzpunkt mit abnehmender Phononenergie ins Gap rutscht. Zwischen (5) und (6) erfolgt ein Umschalten: Jetzt wird der Punkt $-E_B + 3\hbar\omega_0$ entscheidend, der nächst tiefere liefert keinen Beitrag mehr. Die Kurvenform wird nun durch die Zustandsdichteänderung im Kontinuum bestimmt; so kann es zur Ausprägung leichter Oszillationen kommen. Bei weiterer Verringerung der Phononenergie rutscht der relevante Punkt erneut unter die Kante, so daß sich eine zu (1) analoge Kurvenform einstellt (8), die jedoch flacher ist, weil die benachbarten Punkte stärker beitragen, und zunehmend konstanter wird, je mehr Phononen beim Übergang beteiligt sind. Dies ist Ausdruck dafür, daß die Koinzidenzeffekte

letztlich verschwinden, wenn $\hbar\omega_0 \approx \hbar\theta_0$ wird. Der Vergleich zwischen Abb. 34a und b macht deutlich, daß sich die Koinzidenzeffekte in gleicher Weise, relativ unabhängig von der Form der Kontinuumszustandsdichte, auswirken. Bei attraktivem Potential werden sie wegen der (im feldfreien Fall) endlichen Höhe des Coulomb-Kontinuums noch verstärkt.

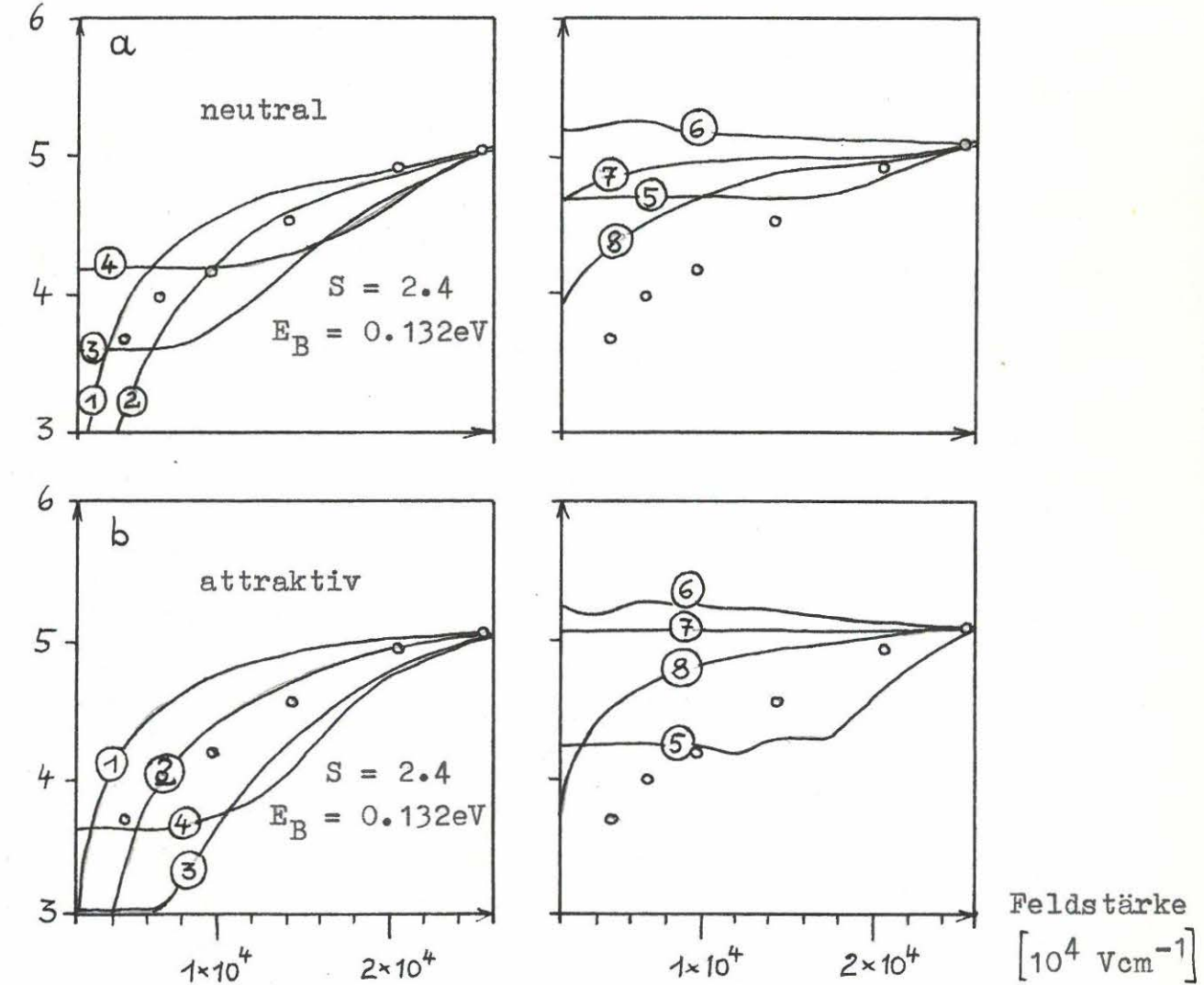
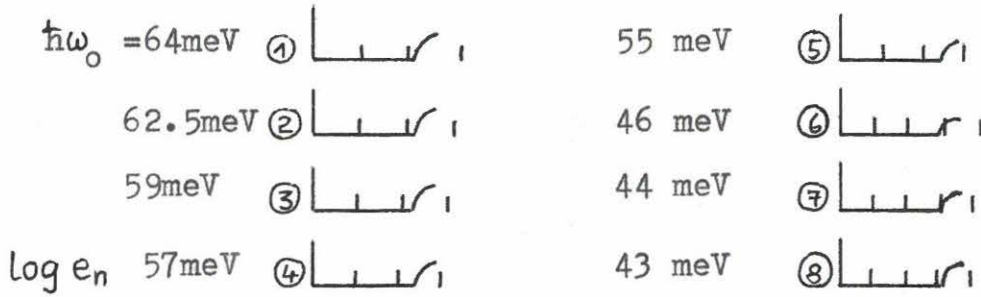
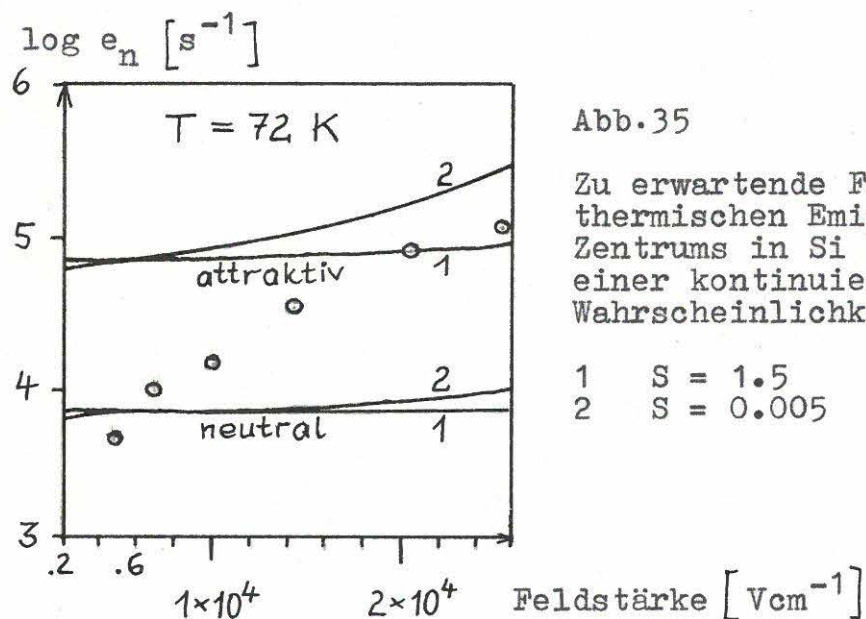


Abb.34 Feldabhängigkeit von $E1$ in Si /5/ und theoretische Ergebnisse im Einmoden-Modell für neutrales (a) und attraktives Potential (b) (Formel (3.25) mit (5.21))
 Oben ist die zur jeweiligen Kurve gehörende Koinzidenzsituation dargestellt.

Die Variation des Huang-Rhys-Faktors hat solange keinerlei Einfluß auf den Kurvenverlauf, wie $S = n$ ist. (Bei $S = n$ erfolgt als Konsequenz des Faktors $(1+S)^2/S$ eine Auslöschung der Rate - ein Effekt, der erst mit den Koinzidenzeffekten selbst verschwindet.) Prinzipiell ist eine Anpassung an die Meßergebnisse durch Wahl von E_B und entsprechende Einstellung des Verhältnisses $E_B/\hbar\omega_0$ möglich, die allerdings keine Unterscheidung zwischen neutralem und attraktivem Defekt erlaubt.

Will man Koinzidenzeffekte völlig ausschließen, wofür im Falle thermischer DLTS selbst bei tieferen Temperaturen eine hohe Wahrscheinlichkeit besteht, ist anstelle der Summe in (3.28) ein Integral über eine kontinuierliche thermische Wahrscheinlichkeitsverteilung zu betrachten. Anstatt auf eine Gauss-Verteilung zurückzugehen, ist in der vorliegenden Arbeit eine numerische Interpolation der diskreten Verteilung vorgenommen worden. Das Ergebnis zeigt Abb. 35.



Wie zu erwarten, verlaufen die Kurven nun für alle physikalisch relevanten S -Werte in beiden Fällen nahezu konstant, erst ab $\hbar\theta_0 \approx 8$ meV setzt ein leichter Anstieg ein. Eine negativ gekrümmte Kurve wäre jetzt nur durch Abschalten der Elektron-Phonon-Koppelung zu erhalten.

Somit ergibt sich folgendes Fazit:

- Ist der realisierte Feldstärkebereich durch $\hbar\theta_c \ll \hbar\omega_0$ zu charakterisieren, können Koinzidenzeffekte die beobachtete starke Feldabhängigkeit der Emissionsrate erklären. In diesem Falle (d. h. wenn Koinzidenzeffekte dominieren) spielt die genaue Form der feldmodifizierten Kontinuumszustandsdichte nur eine untergeordnete Rolle, was nachträglich den Gebrauch von (5.21) rechtfertigt.
- Nach Ausmittlung der Koinzidenzeffekte ergibt sich sowohl für neutrale als auch für geladene Zentren ein nahezu konstanter Kurvenverlauf. Schließt man Koinzidenzeffekte aus, kann die Änderung der Dichte der Endzustände die starke Feldabhängigkeit der Rate nicht erklären - sie kann sogar völlig vernachlässigt werden. Folglich kommt dann als Ursache nur der Poole-Frenkel-Effekt /107/ in Frage.

5.3. Poole-Frenkel-Effekt an tiefen Zentren

Die in Abschnitt 5.2.3. geäußerte Behauptung, daß der Feldeffekt auf eine geladene tiefe Störstelle, deren Grundzustand primär durch das kurzreichweitige Potential bestimmt wird, wegen $\hbar\theta \ll R_Z$ völlig zu vernachlässigen sei, gerät nach den letzten Ergebnissen offenbar in Widerspruch zu den von Irmscher /5/ gemessenen starken Feldabhängigkeiten der thermischen Emissionsrate von E1 und E3' in Si. Tatsächlich liegt es am langreichweitigen Schwanz der Wellenfunktionen geladener Defekte, daß selbst schwächere Felder die Emissionsrate um Größenordnungen erhöhen können. Da analytische Lösungen des Problems bei schwächeren Feldern nicht gelingen, betrachtet man in der Literatur die durch die Barrierenerniedrigung infolge des elektrischen Feldes erleichterte thermische Befreiung der Elektronen (Poole-Frenkel-Effekt /107/; Darstellung und Zitate in /5/). Dabei wird jedoch nie das kurzreichweitige Potential einbezogen, was jetzt geschehen soll. Dazu wird das Potentialmodell wie folgt modifiziert:

$$V_i(\bar{x}) = \frac{\tilde{V}_0}{2\pi r^2} \frac{1}{\pi} \frac{r_0}{r^2 + r_0^2} (-r/r_0) - \frac{e^2 Z}{\epsilon_s r} - eFz. \quad (5.22)$$

Aus (5.22) geht hervor, daß die dreidimensionale δ -Funktion durch eine Lorentzfunktion ersetzt wurde. Gleichzeitig wurde die Wirkung des Operators $(1 + \bar{x}\bar{\nabla})$ durch einen Faktor $(-r/r_0)$ berücksichtigt. Benutzt man für \tilde{V}_0 den Ausdruck, der sich bei Abwesenheit der beiden anderen Potentialanteile ergibt ($\tilde{V}_0 = 4\pi E_0 r_0^3$), vernachlässigt man weiterhin r_0^2 gegenüber r^2 , was bedeutet, daß der Ort der Barrierenabsenkung weit außerhalb des Lokalisationsradius r_0 (wie er sich nur aus dem δ -Potential ergibt) befindet und beschränkt sich auf eine eindimensionale Rechnung, dann wird mit $\xi \equiv z/r_Z$

$$V_i(\xi)/R_Z = -\frac{2}{\pi} \left(\frac{m_e}{\mu}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{R_Z}{E_0}} \frac{1}{\xi^3} - 2/\xi - \left(\frac{\hbar\theta}{R_Z}\right)^{3/2} \xi. \quad (5.23)$$

Der Zusammenhang zwischen E_0 und der experimentell gegebenen Bindungsenergie E_B^0 kann, falls $R_Z \ll E_0$ gilt, näherungsweise analytisch durch eine Relation vom Typ (2.27) hergestellt werden. Es wird sich jedoch zeigen, daß die Größe des Parameters E_0 , der den Einfluß des kurzreichweitigen Potentials auf die Barrierenabsenkung bestimmt, weitestgehend belanglos bleibt.

Für die Stelle des Potentialmaximums ergibt sich aus (5.23) exakt:

$$\xi_m^2 = \left(\frac{R_Z}{\hbar\theta}\right)^{3/2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{6}{\pi} \left(\frac{m_e}{\mu}\right)^{3/2} \left(\frac{\hbar\theta}{R_Z}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{R_Z}{E_0}}} \right]. \quad (5.24)$$

Eingesetzt in (5.23) liefert ξ_m die Barrierenabsenkung $|V_i(\xi_m)|$, die gemäß (3.52) auf die feldabhängige Emissionsrate in der Form

$$\log e_n(F, T) = A(T) + (\log e) \frac{|V_i(\xi_m)|}{kT} \quad (5.25)$$

führt. Dabei ist (mit $\gamma \equiv m_e/\mu$)

$$\begin{aligned} |V_i(\xi_m)|/R_Z &= \frac{2}{\pi} \gamma^{3/2} \epsilon_0^{-1/2} (\hbar\theta_c)^{9/4} B^{-3/2} + 2(\hbar\theta_c)^{3/4} B^{-1/2} + \\ &+ (\hbar\theta_c)^{3/4} B^{1/2} \end{aligned} \quad (5.26)$$

mit $\epsilon_0 \equiv E_0/R_Z$, $\hbar\vartheta_c = \hbar\theta_c/R_Z$ und

$$B = \left[1 + \sqrt{1 + \frac{6}{\pi} \gamma^{3/2} \epsilon_0^{-1/2} (\hbar\vartheta_c)^{3/2}} \right]. \quad (5.27)$$

Aus (5.26) folgen sofort die Grenzfälle

$$|V_c(\xi_m)| = \sqrt{8} R_Z (\hbar\vartheta_c)^{3/4} \quad (\text{reines Coulomb-Pot.}) \quad (5.28)$$

$$|V_t(\xi_m)| = 4/3 \left[\frac{6}{\pi} \gamma^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar\vartheta_c}{\epsilon_0}} \right]^{1/4} \hbar\theta_c \quad (\text{kein Coulomb-Pot.}),$$

die bei Coulomb-Zentren auf die bekannte wurzelförmige Abhängigkeit von der Feldstärke führt, während sich für das hier betrachtete Modell des kurzreichweitigen Potentials eine Abhängigkeit $\sim F^{3/4}$ ergibt.

In Abb. 36 ist der Potentialverlauf nach (5.23) für verschiedene Feldstärken und verschiedene Verhältnisse R_Z/E_0 dargestellt. Man erkennt, daß das Potentialmaximum für die im Experiment /5/ auftretenden Feldstärken (Abb. 36a und b) einige Bohrsche Radien r_Z vom Ursprung entfernt liegt. Dadurch trägt das kurzreichweitige Potential zum Betrag der Barrierenabsenkung kaum bei. Erst bei

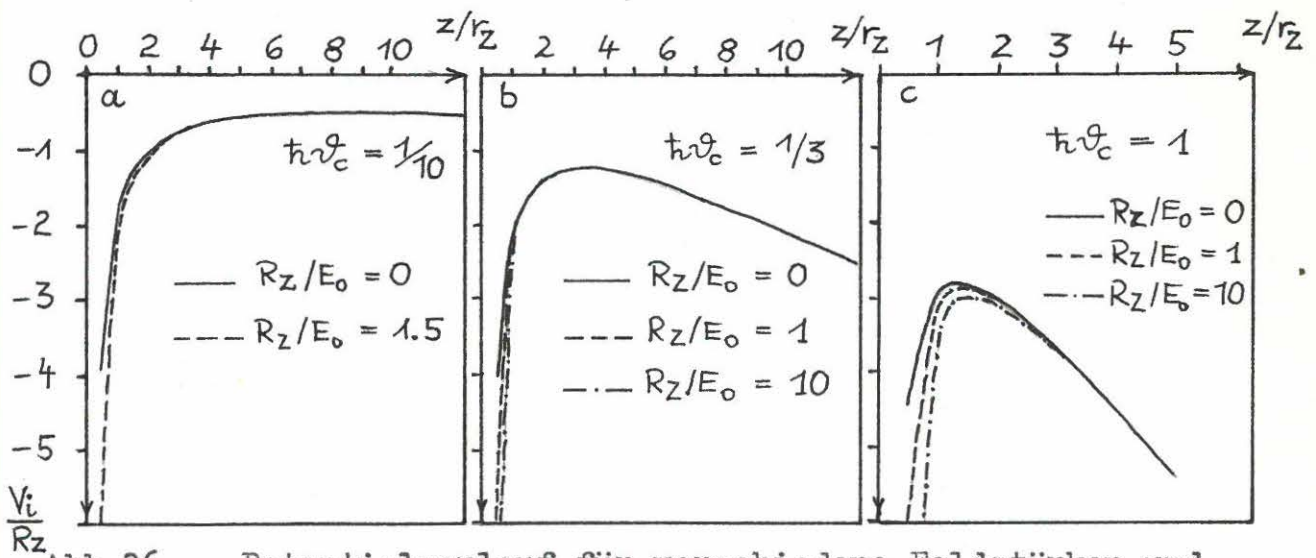


Abb. 36 Potentialverlauf für verschiedene Feldstärken und Parameter $\epsilon_0^{-1} = R_Z/E_0$
 $\gamma = 0.5$

stärkeren Feldern und $E_0 \ll R_Z$ wirkt es sich aus (Abb. 36c). Für die Interpretation der Meßergebnisse /5/ ist diese Situation jedoch nicht relevant. Eine Variation von R_Z/E_0 zwischen 0 und 10 hat also praktisch keinen Einfluß auf die Barrierenabsenkung.

Dies zeigt sich auch bei der Anpassung von (5.25) an die gemessene feldabhängige Emissionsrate der Zentren E1 und E3' in Si /5/. Im Falle von E1 ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit $R_Z = 30 \text{ meV}$. Dies entspricht etwa der effektiven Rydbergenergie mit $Z = 1$ ($m_{\langle 111 \rangle} = 0.26 m_0$). Die beste Anpassung für E3' gelingt mit $R_Z = 15 \text{ meV}$ und bzgl. der Temperaturabhängigkeit mit $E_B = 0.18 \text{ eV}$, wenn man in (5.25) $A(T) = -(\log_e) E_B/kT$ setzt.

Es könnte sich somit sowohl bei E1 als auch bei E3' um einen 0/+ -Übergang handeln.

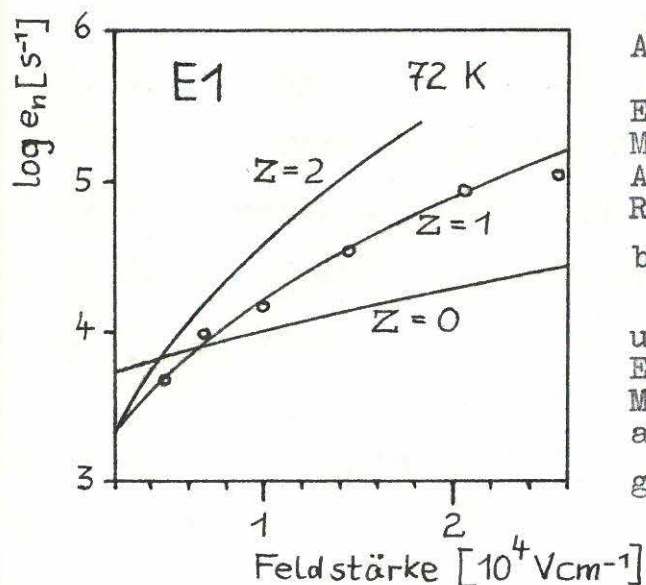
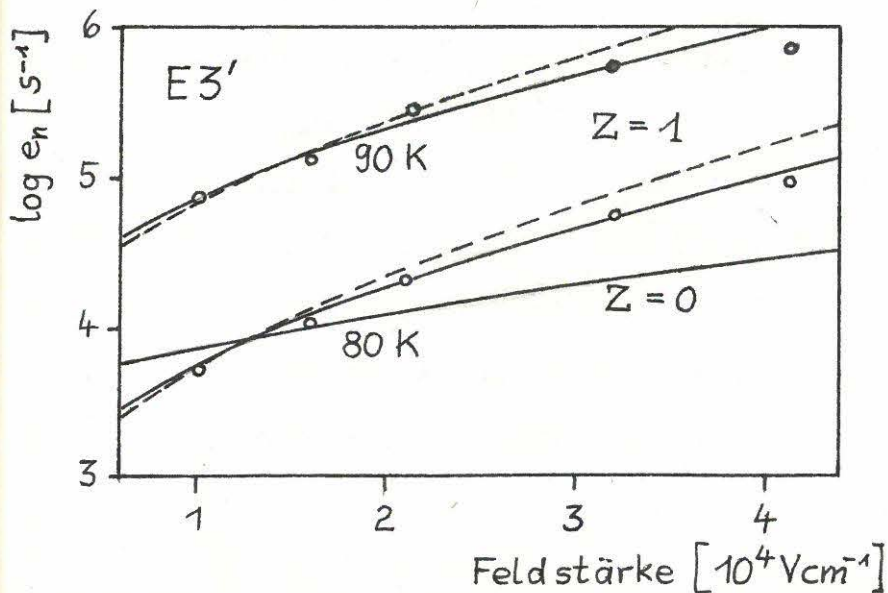


Abb.37

Emissionsrate von E1 in Si;
Meßpunkte nach /5/.
Anpassung nach Formel (5.25) mit
 $R_1 = 30 \text{ meV}$, $E_0 = 0.11 \text{ eV}$ für $Z=0,1$
bzw. $E_0 = 0.03 \text{ eV}$ für $Z = 2$

unten:
Emissionsrate von E3' in Si;
Meßpunkte nach /5/. $E_B = 0.18 \text{ eV}$
ausgezogen: $R_1 = 0.015 \text{ eV}$
gestrichelt: $R_1 = 0.03 \text{ eV}$



6. Literaturverzeichnis

- /1/ K. Huang, A. Rhys; Proc. Roy. Soc. A204, 406 (1950)
- /2/ M. A. Krivoglaz; Zh. eksper. teor. fiz. 25, 191 (1953)
- /3/ R. Kubo, Y. Toyozawa; Progr. Theor. Phys. (Kyoto) 13,
160 (1955)
- /4/ D. V. Lang; J. Appl. Phys. 45, 3023 (1974)
- /5/ K. Irmischer; Dissertation, Humboldt-Universität, Berlin (1985)
- /6/ M. G. Burt; J. Phys. C 16, 4137 (1983)
- /7/ K. Peuker, R. Enderlein, A. Schenk, E. Gutsche;
phys. stat. sol. (b) 109, 599 (1982)
- /8/ A. F. Tasch, C. T. Sah; Phys. Rev. B1, 800 (1970)
- /9/ D. V. Lang, H. G. Grimmeis, E. Meijer, M. Jaros;
Phys. Rev. B22, 3917 (1980)
- /10/ G. Vincent, A. Chantre, D. Bois; J. Appl. Phys. 50, 5484 (1979)
- /11/ S. Makram-Ebeid, M. Lannoo; Phys. Rev. B25, 6406 (1982)
- /12/ V. Ya. Prinz, S. N. Rechkunov; phys. stat. sol. (b)
118, 159 (1983)
- /13/ S. Makram-Ebeid; Appl. Phys. Lett. 37, 464 (1980)
- /14/ G. Ferency, P. Krispin, M. Somogyi; J. Appl. Phys. 54
3902 (1983)
- /15/ K. Irmischer, H. Klose, K. Maass; phys. stat. sol. (a)
75, K25 (1983)
- /16/ K. Huang; Scientia Sinica XXIV, 27 (1981)
- /17/ G. P. Li, K. L. Wang; Appl. Phys. Lett. 42, 838 (1983)
- /18/ M. Kaminska, M. Skowronski, J. Lagowski, J. M. Parsey, H. C.
Gatos; Appl. Phys. Lett. 43, 302 (1983)
- /19/ A. S. Davydov; Quantenmechanik, Berlin, 1978, S. 87

- /20/ R. Pässler; Dissertation B, TH Karl-Marx-Stadt, 1979
- /21/ W. Brauer, H.-W. Streitwolf; Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik, Berlin, 1977, S.69
- /22/ H.-J. Queisser; Festkörperprobleme XI, 45 (1971)
- /23/ H.-J. Queisser; Solid-State Electronics 21, 1495 (1978)
- /24/ S. T. Pantelides; Rev. Mod. Phys. 50, 797 (1978)
- /25/ M. Lannoo; J. Phys. C 17, 3137 (1984)
- /26/ M. Scheffler, J. Bernholc, N. O. Lipari, S. T. Pantelides; Phys. Rev. B29, 3269 (1984)
- /27/ H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford, J. D. Dow; Phys. Rev. Lett. 44, 810 (1980)
- /28/ G. A. Baraff, M. Schlüter; Phys. Rev. B30, 1853 (1984)
- /29/ D. J. Chadi; Phys. Rev. B16, 3572 (1977)
- /30/ N. O. Lipari, A. Baldereschi; Solid State Comm. 25, 665 (1978)
- /31/ M. Jaros; Phys. Rev. B16, 3694 (1977)
- /32/ H. B. Bebb; Phys. Rev. 185, 1116 (1969)
- /33/ H. B. Bebb, R. A. Chapman; J. Phys. Chem. Solids, 28, 2087 (1967)
- /34/ L. W. Keldysh; Zh. eksper. teor. fiz. 45, 364 (1963)
- /35/ H. Köster, JR., O. V. Kurnosova, I. N. Yassievich; phys. stat. sol. (b)
- /36/ E. O. Kane; J. Phys. Chem. Solids 1, 249 (1957)
- /37/ G. F. Koster, J. C. Slater; Phys. Rev. 95, 1167 (1954)
- /38/ G. F. Koster, J. C. Slater; Phys. Rev. 96, 1208 (1954)
- /39/ E. N. Adams; Jour. of chem. Phys. 21, 2013 (1953)
- /40/ J. Fiddicke; Dissertation, Humboldt-Universität, Berlin, 1975
- /41/ W. V. Houston; Phys. Rev. 57, 184 (1940)

- /42/ L. Liu, D. Brust; Phys. Rev. 157, 627 (1967)
- /43/ W. C. Vinogradov; Fiz. tverd. Tela 13, 3266 (1971)
- /44/ K. Elk, W. Gasser; Die Methode der Greenschen Funktionen
in der Festkörperphysik, Berlin, 1979
- /45/ G. Lucovsky; Solid State Comm. 3, 299 (1965)
- /46/ H. Bethe, P. Morrison; Elementary Nuclear Physics,
John Wiley, New York, 1956
- /47/ B. Monemar, L. Samuelson; Phys. Rev. B18, 809 (1978)
- /48/ V. M. Yartsev; phys. stat. sol. (b) 64, 377 (1974)
- /49/ A. Chantre, G. Vincent, D. Bois; Phys. Rev. B23, 5332 (1981)
- /50/ M. Abramovitz, I. A. Stegun; Handbook of Mathematical
Functions, russ. Übers., Nauka, 1979
- /51/ D. E. Aspnes; Phys. Rev. 147, 554 (1966)
- /52/ D. E. Aspnes; Phys. Rev. 153, 972 (1967)
- /53/ F. Bechstedt, K. Peuker, R. Enderlein; phys. stat. sol.
(b) 68, 43 (1975)
- /54/ E. Fick; Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie,
Leipzig, 1981
- /55/ R. Enderlein, J. Fiddicke, F. Bechstedt, K. Peuker,
R. S. Bauer; Luminescence Conf., Berlin (West), 1981
- /56/ L. D. Landau, E. M. Lifschitz; Lehrbuch der theoretischen
Physik Band III, Berlin, 1979
- /57/ W. Shockley, W. T. Read, JR.; Phys. Rev. 87, 835 (1952)
- /58/ J. M. Noras; J. Phys. C 14, 2341 (1981)
- /59/ S. Brehme; persönliche Mitteilung
- /60/ R. C. O'Rourke; Phys. Rev. 91, 265 (1953)
- /61/ A. Haug; Theoretische Festkörperphysik II, Deuticke, Wien, 1970

- /62/ G. Helmis; Ann. Phys. (Leipzig) 19, 41 (1956)
- /63/ R. Pässler; Czech. J. Phys. B24, 322 (1974), B25, 219 (1975)
- /64/ S. Fischer; Jour. of Chem. Phys. 53, 3195 (1970)
- /65/ A. Schenk; Diplomarbeit, Humboldt-Universität, 1981
- /66/ H. Teichler; phys. stat. sol. (b) 104, 239 (1981)
- /67/ K. Peuker; persönliche Mitteilung, 1981
- /68/ C. H. Henry, D. V. Lang; Phys. Rev. B15, 989 (1977)
- /69/ E. Gutsche; phys. stat. sol. (b) 109, 583 (1982)
- /70/ I. Toyozawa; Solid State Electronics 21, 1316 (1978)
- /71/ R. Pässler; phys. stat. sol. (b) 85, 203 (1978)
- /72/ K. Tharmalingam; Phys. Rev. 130, 2204 (1963)
- /73/ W. Franz; Z. Naturf. 13a, 484 (1958)
- L. V. Keldysh; Zh. eksper. teor. fiz. 34, 1138 (1958)
- /74/ E. Gutsche; 9. Tagung "Physik und Elektronik", Berlin (1985)
- /75/ V. L. Bonč-Brujevič, S. G. Kalasnikov; Halbleiterphysik,
Berlin, 1982
- /76/ H. Haken; Quantenfeldtheorie des Festkörpers, Teubner,
Stuttgart, 1973
- /77/ B. K. Ridley; Solid State Electronics 21, 1319 (1978)
- /78/ V. A. Kovarskij; Mnogokvantovye processy, Moskva, 1985
- /79/ O. Engström, A. Alm; Solid State Electronics 21, 1571 (1978)
- /80/ O. Engström, A. Alm; J. Appl. Phys. 54, 5240 (1983)
- /81/ J. A. Van Vechten, C. D. Thurmond; Phys. Rev. B14, 3539 (1976)
- /82/ D. V. Lang, H. G. Grimmeis, E. Meijer, M. Jaros
Phys. Rev. B22, 3917 (1980)
- /83/ J. R. Morante, J. E. Carceller, P. Cartujo, J. J. Barbolla
phys. stat. sol. (b) 111, 375 (1982)

- /84/ N. Mott, E. A. Davis, H. A. Street; *Phil. Mag.* 32, 961 (1975)
- /85/ A. Schenk, K. Irmscher, D. Suisky, R. Enderlein, F. Bechstedt,
H. Klose; *Proc. 17th ICPS, San Francisco*, 613 (1984)
- /86/ P. Blood, J. J. Harris; *J. Appl. Phys.* 56, 993 (1984)
- /87/ G. P. Li, Y. Wu, M. Chang, K. L. Wang; *Extended Abstr. on the
16th IC on Solid State Devices and Materials, Kobe*,
107 (1984)
- /88/ A. Mitonneau, A. Mircea, G. M. Martin, D. Pons;
Rev. Phys. Appl. 14, 853 (1979)
- /89/ W. Walukiewicz, J. Lagowski, H. C. Gatos; *Appl. Phys. Lett.*
43, 192 (1983)
- /90/ M. Kaminska, J. M. Parsey, J. Lagowski, H. C. Gatos;
Appl. Phys. Lett. 41, 993 (1982)
- /91/ E. R. Weber, J. Schneider; *Physica* 116B, 398 (1983)
- /92/ S. Makram-Ebeid; *Appl. Phys. Lett.* 37, 464 (1980)
- /93/ G. M. Martin, S. Makram-Ebeid; *Physica* 116B, 371 (1983)
- /94/ A. G. Mironov, V. A. Morozova, V. S. Vavilov;
phys.stat. sol. (b) 127, 359 (1985)
- /95/ D. E. Aspnes, P. Handler, D. F. Blossey; *Phys. Rev.* 166,
921 (1968)
- /96/ Y. Hamakawa, F. A. Germano, P. Handler; *Phys. Rev.* 167,
703 (1968)
- /97/ V. I. Sokolov, A. E. Nikoforov, V. V. Chernyaev, S. Yu.
Shashkin; *Zh. eksper. teor. fiz., Pisma* 33, 189 (1981)
- /98/ R. Enderlein, P. Renner, M. Scheele; *phys. stat. sol. (b)*
71, 503 (1975)
- /99/ C. B. Duke, M. E. Alferieff; *Phys. Rev.* 145, 583 (1965)

- /100/ R. Enderlein; *phys. stat. sol.* 26, 509 (1968)
- /101/ J. D. Dow; *phys. stat. sol.* 34, K71 (1969)
- /102/ R. Enderlein; *phys. stat. sol.* 34, K75 (1969)
- /103/ C. M. Penchina, J. K. Pribram, J. Sak; *Phys. Rev.* 188,
1240 (1969)
- /104/ D. F. Blossey; *Phys. Rev.* B2, 3976 (1970), B3, 1382 (1970)
- /105/ J. Fauchier, J. D. Dow; *Phys. Rev.* A9, 98 (1974)
- /106/ A. Sommerfeld; *Atombau und Spektrallinien*, II. Band,
Frankfurt/M., 1978
- /107/ J. Frenkel; *Phys. Rev.* 54, 647 (1938)

Anlage 1

Berechnung der totalen elektronischen Übergangsrate im neutralen Modell

Die normierten Lösungen der Gleichung (2.33b) mit $U(\bar{x}) = -eFz$ sind, wenn man sich gleich auf Zustände mit der Magnetquantenzahl $m = 0$ beschränkt, die hier nur benötigt werden,

$$\phi_{\varepsilon', \lambda'}^c(\bar{x}) = \sqrt{\frac{eF\lambda'}{2\pi}} \frac{1}{\hbar\theta_c} J_0(\lambda'\rho) \text{Ai}\left[\frac{E_c(\lambda') - \varepsilon' - eFz}{\hbar\theta_c}\right], \quad (\text{A1})$$

wobei λ' die Bedeutung des Impulsbetrages senkrecht zur Feldrichtung hat (ρ, z - Zylinderkoordinaten, J_0 - Besselfunktion 0. Ordnung, $\text{Ai}(x)$ - Airy-Funktion, $\hbar\theta_{oe} = (e^2 \hbar^2 F^2 / 2m_{oe})^{1/3}$ - elektrooptische Energie, $E_{oe}(\lambda) = \hbar^2 \lambda^2 / 2m_{oe}$).

Die homogenen Lösungen zum Aufbau der Greenschen Funktion haben eine völlig analoge Gestalt:

(A2)

$$\varphi_{\varepsilon\lambda}(\bar{x}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{eF\lambda}{2\pi}} \frac{1}{\hbar\theta_\mu} J_0(\lambda\rho) \text{Ai}\left[\frac{E_\mu(\lambda) - \varepsilon - eFz}{\hbar\theta_\mu}\right] & \text{für } \mu > 0 \\ & \text{(vom Leitungsband)} \\ \sqrt{\frac{eF\lambda}{2\pi}} \frac{1}{\hbar|\theta_\mu|} J_0(\lambda\rho) \text{Ai}\left[\frac{-E_\mu(\lambda) + \tilde{\varepsilon} + eFz}{\hbar|\theta_\mu|}\right] & \text{für } \mu < 0 \\ & \text{(vom Valenzband).} \end{cases}$$

Die Entwicklungskoeffizienten $C_{\varepsilon\lambda}(\varepsilon', \lambda')$ in (2.41) sind die Matrixelemente aus den Funktionen (A1) und (A2) und können leicht berechnet werden. Man hat je nach Größe und Vorzeichen von drei Fälle zu unterscheiden:

$$C_{\varepsilon\lambda}(\varepsilon', \lambda') = \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{\hbar\theta_-} \text{Ai}\left[\frac{E_-(\lambda) - (\varepsilon - \varepsilon')}{\hbar\theta_-}\right] \begin{cases} \mu_c < m_c & (\text{a1}) \\ \mu_c > m_c & (\text{a2}) \end{cases} \quad (\text{A3a})$$

$$C_{\varepsilon\lambda}(\varepsilon', \lambda') = \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{\hbar\theta_r} \text{Ai}\left[\frac{E_r(\lambda) + (\tilde{\varepsilon} - \varepsilon')}{\hbar\theta_r}\right] \mu_v < 0 \quad (\text{b}). \quad (\text{A3b})$$

In (a) sind die Größen θ_- und E_- eine Funktion von m_- , wobei $1/m_- = 1/\mu_c - 1/m_c$ im Fall (a1) und $1/m_- = 1/m_c - 1/\mu_c$ im Fall (a2) gilt. Im Ausdruck für die Übergangsrates (2.43)

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \tilde{v}_0^2 S_t(\varepsilon) \int_0^\infty d\lambda \left| \int d\varepsilon'' \frac{\varphi_{\varepsilon''\lambda}^*(0) c_{\varepsilon''\lambda}(\varepsilon; \lambda)}{\varepsilon'' - \varepsilon - i\delta} \right|^2 \quad (A4)$$

kann, außer wenn $\mu \ll m_c$ ist, $(\varepsilon'' - \varepsilon - i\delta)^{-1}$ durch den Hauptwert $P/(\varepsilon'' - \varepsilon)$ ersetzt werden, da für tiefe Niveaus mit $\varepsilon \sim -E_g/2$ der Imaginärteil nur vernachlässigbar kleine Beiträge liefert, wie man anhand von (A2) und der stets erfüllten Voraussetzung $E_g \gg \hbar\theta$ sieht. Für die vom Leitungsband herrührende Störstelle können (sieht man vom trivialen Fall $\mu_c = m_c$ ab) drei Massenrelationen näherungsweise analytisch behandelt werden: $\mu_c \lesssim m_c$, $\mu_c \gtrsim m_c$, $\mu_c \gg m_c$ (starke Lokalisation).

Der Fall $\mu_c \ll m_c$ (schwache Lokalisation) muß gesondert behandelt werden, da hier der Imaginärteil wichtig wird.

Geht man mit (A2) und (A3) in (A4) ein, so ergibt sich für das innere Integral $\int d\varepsilon''$ der Ausdruck

$$\sqrt{\lambda} \left(\frac{\alpha\mu}{2\pi} \right)^{1/2} \frac{(\hbar\theta_\mu)^{-1/4}}{\hbar\theta_-} \int \frac{d\varepsilon''}{\varepsilon''} \text{Ai} \left[\frac{E_\mu(\lambda) - \varepsilon'' - \varepsilon}{\hbar\theta_\mu} \right] \text{Ai} \left[\frac{E_-(\lambda) + (\varepsilon'' + \varepsilon - \varepsilon')}{\hbar\theta_-} \right] \quad (A5)$$

Das obere Vorzeichen gilt für (a1), das untere für (a2).

Wenn sich die Massen nur wenig voneinander unterscheiden, dann kann aufgrund der Betrachtungen in Abschnitt 2.2.2. $1/\varepsilon''$ durch $(\varepsilon' - \varepsilon)^{-1}$ ersetzt und das verbleibende Integral mittels der Hilfsformeln /51/

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \text{Ai}(t+x) \text{Ai}(\alpha t + Y) = \frac{1}{(1-\alpha^3)^{1/3}} \text{Ai} \left[\frac{Y - \alpha x}{(1-\alpha^3)^{1/3}} \right], \alpha < 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \text{Ai}(t+x) \text{Ai}(Y - \alpha t) = \frac{1}{(1+\alpha^3)^{1/3}} \text{Ai} \left[\frac{Y + \alpha x}{(1+\alpha^3)^{1/3}} \right] \quad (A6)$$

gelöst werden. Man erhält dann sowohl für (a1) als auch für (a2) ohne weitere Näherung

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \tilde{v}_0^c{}^2 \varrho_t(\varepsilon) \frac{\varrho_c(\varepsilon')}{(\varepsilon' - \varepsilon)^2} \quad (\text{A7})$$

$$\text{mit } \varrho_c(\varepsilon') = \frac{\alpha_c^3}{4\pi} \sqrt{\hbar\theta_c} \mathcal{F}(-\varepsilon'/\hbar\theta_c), \quad (\text{A8})$$

der feldmodifizierten Leitungsbandzustandsdichte, in der $\mathcal{F}(y) = \text{Ai}'^2(y) - y\text{Ai}^2(y)$ ist. Formel (A7) ist also völlig identisch mit dem Ausdruck, der sich ergibt, wenn $m_c \equiv \mu_c$ vorausgesetzt wird.

Im Falle starker Lokalisation ($\mu_c \gg m_c$) kann m_- durch m_c ersetzt werden. Dann wird jedoch der Parameter α in (A6.2) sehr groß und kann nicht durch $\alpha = 1$ genähert werden. Eine entsprechende Näherung ist jedoch wegen des Nenners ε'' nötig. Man kommt nun aber auch über den Umweg

$$\text{Ai}(y - \alpha t) = -\frac{\alpha^{-1}}{(1 + \alpha^{-3})^{1/3}} \int_{-\infty}^{\infty} d\varrho \text{Ai}\left[\frac{\varrho + \alpha^{-1}y}{(1 + \alpha^{-3})^{1/3}}\right] \text{Ai}(\varrho + t) \quad (\text{A9})$$

$$\approx -\frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\varrho \text{Ai}(\varrho + \alpha^{-1}y) \text{Ai}(\varrho + t) = -\frac{1}{\alpha} \delta(t + \alpha^{-1}y)$$

wegen $\alpha^{-1} = m_c/\mu_c \ll 1$ zum Ziel. Durch Auswertung der δ -Funktion entsteht

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \tilde{v}_0^c{}^2 \varrho_t(\varepsilon) \frac{\alpha_c^3}{4\pi} \sqrt{\hbar\theta_c} \int_0^{\infty} dt \frac{1}{\left[t \frac{m_c}{\mu_c} \hbar\theta_c - \varepsilon\right]^2} \text{Ai}^2\left(t - \frac{\varepsilon'}{\hbar\theta_c}\right). \quad (\text{A10})$$

Der Nenner im Integranden ist im Falle tiefer Niveaus ($\varepsilon \sim -E_g/2$) und wegen $m_c \ll \mu_c$ eine schwach veränderliche Größe und kann bei $t = \varepsilon'/\hbar\theta_c$ aus dem Integral gezogen werden. Somit ergibt sich für die Übergangsrate auch bei starker Lokalisation Formel (2.40a)!

Der Vollständigkeit halber sei der Fall schwacher Lokalisation angeführt. Wenn $\mu_c \ll m_c$ gilt, kann (A5) direkt unter Benutzung von $m_- \approx \mu_c$ ausintegriert werden. Dazu hat man

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{\pi} \frac{\text{Ai}(\lambda + t + y)\text{Ai}(\lambda + y)}{\lambda} = \theta(t)\text{Ai}(t + y)\text{Bi}(y) + \theta(-t)\text{Bi}(t + y)\text{Ai}(y) \quad (\text{A11})$$

zu benutzen /53/. Mit Hilfe der Dirac-Identität /54/ erhält man

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \tilde{v}_0^2 \varrho_t(\varepsilon) \frac{\pi}{4} (\hbar\theta_\mu)^{-3/2} \alpha_\mu^3 \int_{-\varepsilon/\hbar\theta_\mu}^{\infty} dt \left\{ \theta(\varepsilon') \text{Ai}^2\left(t + \frac{\varepsilon'}{\hbar\theta_\mu}\right) \times \right. \\ \left. \times \left[\text{Ai}^2(t) + \text{Bi}^2(t) \right] + \theta(-\varepsilon') \text{Ai}^2(t) \left[\text{Ai}^2\left(t + \frac{\varepsilon'}{\hbar\theta_\mu}\right) + \text{Bi}^2\left(t + \frac{\varepsilon'}{\hbar\theta_\mu}\right) \right] \right\}. \quad (\text{A12})$$

Man erkennt, daß die Eigenschaften des Leitungsbandes nicht mehr eingehen; im Grenzfall $\mu_c/m_c \rightarrow 0$ kann das Integral in (A12) durch $\delta(\varepsilon')$ approximiert werden; alle Übergänge erfolgen in das Niveau $\varepsilon' = 0$.

Für eine Störstelle, die aus Valenzbandzuständen aufgebaut ist, ergibt das innere Integral in Formel (A4), wenn der Imaginärteil vernachlässigt wird,

$$\sqrt{\lambda} \left(\frac{\alpha_\mu}{2\hbar} \right)^{1/2} (\hbar|\theta_\mu|)^{-1/4} \int \frac{d\varepsilon''}{\varepsilon''} \text{Ai} \left[\frac{E_\mu(\lambda) + \varepsilon'' + \tilde{\varepsilon}}{\hbar|\theta_\mu|} \right] \text{Ai} \left[\frac{E_r(\lambda) + (\varepsilon'' + \tilde{\varepsilon} - \varepsilon')}{\hbar\theta_r} \right]. \quad (\text{A13})$$

Der Index r kennzeichnet das Auftreten der reduzierten Masse $1/m_r = 1/\mu_v + 1/m_c$. Im Falle schwacher Lokalisation ergibt sich ein Ausdruck völlig analog zu (A12), der von Enderlein et. al. /55/ zur Erklärung der Elektroabsorptionsdaten an GaP:N benutzt wurde.

Bei starker Lokalisation ($\mu_v \gg m_c$) kann mit derselben Argumentation wie in (A9) und (A10) gezeigt werden, daß die Übergangsrates wieder die Form (2.40b) annimmt, also von der Struktur identisch ist mit der für die feldfreie Übergangsrates.

Die Rechnung für den Fall $m_c \approx \mu_v$ kann nur durchgeführt werden, wenn der Nenner des Hauptwert-Integrals aus dem Integral gezogen

wird, was möglich ist, solange ε' nicht in die Größenordnung von $+E_g/2$ kommt. Weit im Band modifiziert der Nenner die Linienform demnach erheblich, in Übereinstimmung mit den Überlegungen zum optischen Streuquerschnitt. Für Energien in der Nähe des Maximums des optischen Streuquerschnitts muß (A13) numerisch berechnet werden, im Gegensatz zum vom Leitungsband herrührenden Defekt, für den $m_c \approx \mu_c$ gerade dazu führt, daß die zweite Airy-Funktion in (A5) δ -förmig wird. Bei allen physikalischen Prozessen jedoch, bei denen nur Kontinuumszustände weit unterhalb $E_g/2$ wesentlich beitragen, ist auch im Fall $m_c \approx \mu_v$ Formel (2.40b) eine gute Näherung.

Anlage 2

Übergangsrate für verbotene Übergänge

Zur Vereinfachung der Berechnung der elektronischen Übergangsrate für Übergänge aus einer donatorartigen Störstelle wird der Feldeinfluß auf den Defektzustand vernachlässigt. Das den feldinduzierten Prozeß bestimmende Matrixelement (2.18a) wird mit Hilfe von

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz z e^{i\gamma z} \text{Ai}(x - \xi z) = \frac{1}{\xi^2} \left[\frac{\gamma^2}{\xi^2} + x \right] e^{i/3(\gamma/\xi)^3 + ix\gamma/\xi} \quad (\text{B1})$$

behandelt. Man erhält

$$I_{E', \infty m, E00}^{cc}(1) = \frac{\beta}{\pi \alpha^3 \mu} \frac{\mu_c}{m_c eF} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{t^2 + \frac{E_c(\infty) - E'}{\hbar\theta_c}}{t^2 + \left[\frac{E_c(\infty) - \frac{\mu_c}{m_c} E}{\hbar\theta_c} \right]} \times e^{-it^3/3 - it \left[\frac{E_c(\infty) - E'}{\hbar\theta_c} \right]} \quad (\text{B2})$$

mit $\beta^2 = eF \alpha^3 \mu \sqrt{E_B^0} \delta(E + E_B^0) \delta_{m0} / (16(\hbar\theta_c)^2)$.

Das Integral ist nur aufgrund des auftretenden Nenners von Null verschieden. Dieser kann wieder wegen $E = -E_B^0$ und $E_B^0 \gg \hbar\theta_c$ näherungsweise berücksichtigt werden:

(B3)

$$I_{E', \infty m, E00}^{cc}(1) \approx \frac{-\beta}{\pi \alpha^3 \mu} \frac{\mu_c}{m_c eF} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + x \right] \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-it^3/3 - itx}}{x + \frac{\mu_c E - E_c(\infty)}{\hbar\theta_c}} \Bigg|_{x = \frac{E_c(\infty) - E'}{\hbar\theta_c}}$$

wobei im Nenner t^2 durch den Sattelpunktswert $t_s^2 = -x$ ersetzt wurde. Nach Ausführung von Integration und Differentiation folgt

$$- I_{E' \alpha m, E00}^{cc}(1) \approx \frac{4\beta}{\alpha_\mu^3} \frac{\mu_c}{m_c eF} \text{Ai}'\left(\frac{E_c(\alpha) - E'}{\hbar\theta_c}\right) \left[\frac{\frac{\mu_c}{m_c} E - E'}{\hbar\theta_c}\right]^{-2}, \quad (B4)$$

wenn ein zweiter Term, der proportional zu $[(\mu_c E/m_c - E')/\hbar\theta_c]^{-3}$ ist, unberücksichtigt bleibt.

Quadrieren und Integration über α führt schließlich auf (3.26).

Man kann leicht zeigen, daß sich (3.26) vom Ausdruck für den dipolverbotenen optischen Übergang um den Faktor

$$\frac{4}{\alpha_c^4} \left[\frac{m_c}{\mu_c}\right]^2 \frac{1}{\left[\frac{m_c}{\mu_c} E' - E\right]^2} \quad (B5)$$

unterscheidet.

Für den thermisch induzierten Übergang ist das Matrixelement (3.9a) zu berechnen. Anstelle von (B2) erhält man hier

$$I_{E' k_{\perp} m, E00}^{cc}(\bar{q}_0) = \frac{\beta}{\pi \alpha_\mu^3} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{iy^3/3 + iy \left[\frac{E_c(k_{\perp}) - E'}{\hbar\theta_c} \right]}{e^{(\frac{eF}{\hbar\theta_c} y - q_{0z})^2 \alpha_\mu^{-2} + [(k_{\perp 1} - q_{0\perp 1})^2 + \dots + (k_{\perp 2} - q_{0\perp 2})^2] \alpha_\mu^{-2} - E}} \dots \quad (B6)$$

Wegen $y \sim 1$ und $\hbar^2 q_0^2 / 2m_c \gg \hbar\theta_c$ (mittlere Phononenwellenzahlen) kann im Nenner $y = 0$ gesetzt werden. Die abschließende k_{\perp} -Integration liefert näherungsweise (3.27).

Anlage 3

Übergangsrate bei anisotroper Bandstruktur

Die z-Integration des Überlappungsintegrals zwischen Defektzustand (2.44) und Bandfunktion (3.36) kann exakt ausgeführt werden, wenn man die Relation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iza} \text{Ai}(bz+x)\text{Ai}(-z+y) = \quad (C1)$$

$$= \frac{1}{c^{1/3}} \text{Ai} \left[\frac{a^2 b}{c^{4/3}} + \frac{x+by}{c^{1/3}} \right] e^{ia^3/3(1-b^3)/c^2 - ia(b^2 x + y)/c}$$

benutzt, die mit Hilfe der Integraldarstellung der Airy-Funktion bewiesen werden kann ($c \equiv 1 + b^3$). Man erhält unter Beachtung der Umformung (A9), wenn $\mu_V \gg m_{\parallel}$ angenommen wird, für das Quadrat des Übergangsmatrixelements

$$\left| I_{E', k_{\perp 1}, k_{\perp 2}, E00}^{CV} \right|^2 \approx \frac{1}{4\pi^2} \frac{\alpha_{\parallel}}{\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}} \frac{\tilde{v}_0^2 \mathcal{G}_t(\tilde{E})}{\left[\tilde{E} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu_V} \right]^2} \times \quad (C2)$$

$$\times \text{Ai}^2 \left[\frac{1}{\hbar\theta_{\parallel}} \left(\frac{\hbar^2 k_{\perp 1}^2}{2m_t} + \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} + \frac{\beta^2 \hbar^2}{2\mu_V} \right) k_{\perp 2}^2 - E' \right) \right].$$

Die Voraussetzung $\mu_V \gg m_{\parallel}$ entfällt, wenn der Feldeinfluß auf den Defektzustand vernachlässigt wird. Die Übergangsrate ergibt sich aus (C2) durch Integration über k_{\perp} , die nur noch näherungsweise möglich ist. Wegen $\tilde{E} \approx E_B^0 \gg \hbar\theta_{\parallel}$ darf der Nenner wieder approximativ behandelt werden. Dieses Vorgehen ist um so gerechtfertigter, je kleiner der Winkel ϑ ist, da dann $\mu_V/m_{\perp} \gg \beta^2$ und $m_t \approx m_{\perp}$ folgt. Mit diesen Annahmen erhält man

$$D(E', E) = \frac{\tilde{v}_0^2}{\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}} \mathcal{G}_t(\tilde{E}) \frac{\sqrt{8m_t m_{\perp} m_{\parallel}}}{4\pi \hbar^3} \int_0^{\infty} dt \frac{\text{Ai}^2 \left(\frac{t - E'}{\hbar\theta_{\parallel}} \right)}{\left[\tilde{E} + \frac{m_{\perp} t}{\mu_V} \right]^2} \quad (C3)$$

und damit schließlich (3.38).

(C3) kann man leicht auf den Nullfeld-Grenzwert spezialisieren, wenn man

$$\lim_{F \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\hbar\theta_{\parallel}}} \text{Ai}^2\left(\frac{t-E'}{\hbar\theta_{\parallel}}\right) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Theta(E'-t)}{\sqrt{E'-t}} \quad (C4)$$

beachtet. Berechnet man die Übergangsrate im Limes $F = 0$ unabhängig von obiger Betrachtung mit den Nullfeld-Einhüllenden, die den Zuständen (2.44) und (3.36) entsprechen, so bekommt man exakt (mit $\mathcal{V} \equiv 0$)

$$D^0(E, E') = \tilde{V}_0^{\mathcal{V}^2} \int_t^{\infty} \tilde{E} \frac{\sqrt{8m_{\perp}^2 m_{\parallel}}}{4\pi \hbar^3} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{E'-t}} \frac{\Theta(E'-t)}{\left[\frac{m_{\parallel}}{\mu_{\mathcal{V}}}(E'-t) + E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\mathcal{V}}} t\right]^2}, \quad (C5)$$

was unter der Voraussetzung $m_{\parallel} \ll \mu_{\mathcal{V}}$ mit dem Grenzwert (C4) von (C3) übereinstimmt. Allerdings kann (C5) exakt integriert werden und liefert damit einen genauen Ausdruck der strahlungslosen Nullfeld-Emissionsrate für Übergänge in ein Bandtal beliebiger Lage. Das Integral in (C5) wird nämlich

$$\frac{1}{\left[E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\mathcal{V}}} E'\right]} \left\{ \frac{\sqrt{E'}}{\left[E_B^0 + \frac{m_{\parallel}}{\mu_{\mathcal{V}}} E'\right]} + h(E') \frac{\sqrt{\mu_{\mathcal{V}}}}{\sqrt{|m_{\parallel} - m_{\perp}| \left(E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\mathcal{V}}} E'\right)}} \right\} \quad (C6)$$

mit
$$\arctg \sqrt{\frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{\mu_{\mathcal{V}}} \frac{E'}{\left(E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\mathcal{V}}} E'\right)}} \quad m_{\parallel} > m_{\perp}$$

$$h(E') = \text{Arth} \sqrt{\frac{|m_{\parallel} - m_{\perp}|}{\mu_{\mathcal{V}}} \frac{E'}{\left(E_B^0 + \frac{m_{\perp}}{\mu_{\mathcal{V}}} E'\right)}} \quad m_{\parallel} < m_{\perp} \quad (C7).$$

Anlage 4

Übergangswahrscheinlichkeit thermisch induzierter Multiphonon-Prozesse im Zweimoden-Modell

Der thermisch induzierte Anteil in der geschweiften Klammer von (3.12) liefert, wenn die Fouriertransformierte von (3.16) eingesetzt und die Summation über zwei Moden erstreckt wird, den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp\left\{i\omega\tau + \sum_{r=1,2} S_r \left[(\bar{N}_r + 1)e^{i\omega_r\tau} + \bar{N}_r e^{-i\omega_r\tau} - (2\bar{N}_r + 1) \right] \right\} \times \\
 & \sum_{q, q' \neq 1, 2} f_q(tc) f_{q'}^*(tc) \left\{ (1 + \bar{N}_q) e^{i\omega_q\tau} \delta_{qq'} + \bar{N}_q e^{-i\omega_q\tau} \delta_{qq'} + \right. \\
 & \frac{f_q^*(tt) f_{q'}(tt)}{\hbar^2 \omega_q \omega_{q'}} \left[1 + (\bar{N}_q + 1) e^{i\omega_q\tau} - \bar{N}_q e^{-i\omega_q\tau} + (\bar{N}_{q'} + 1) e^{i\omega_{q'}\tau} + \right. \\
 & (\bar{N}_q + 1)(\bar{N}_{q'} + 1) e^{i\tau(\omega_q + \omega_{q'})} - \bar{N}_q(\bar{N}_{q'} + 1) e^{-i\tau(\omega_q - \omega_{q'})} - \\
 & \left. \left. \bar{N}_{q'} e^{-i\omega_{q'}\tau} - (\bar{N}_q + 1)\bar{N}_{q'} e^{i\tau(\omega_q - \omega_{q'})} + \bar{N}_q \bar{N}_{q'} e^{-i\tau(\omega_q + \omega_{q'})} \right] \right\}. \quad (D1)
 \end{aligned}$$

Da

$$\begin{aligned}
 \frac{f_q^*(tt) f_{q'}(tt)}{\hbar^2 \omega_q \omega_{q'}} &= \sqrt{S_q} \sqrt{S_{q'}} \quad \text{und} \quad (D2) \\
 f_1(tc) f_2^*(tc) &= f_1^*(tc) f_2(tc) = f_{12}
 \end{aligned}$$

gesetzt werden darf, kann die Summe über q, q' in (D1) wesentlich vereinfacht werden. Man erhält

$$\sum_{q, q' = 1, 2} = |f_1|^2 \left\{ S_1 - 2S_1 \bar{N}_1 (\bar{N}_1 + 1) + e^{i\omega_1\tau} (\bar{N}_1 + 1) [1 + 2S_1] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + e^{-i\omega_1\tau} \bar{N}_1(1 - 2S_1) + e^{2i\omega_1\tau} S_1(\bar{N}_1 + 1)^2 + e^{-2i\omega_1\tau} S_1\bar{N}_1^2 \Big\} + \\
& + |f_2|^2 \{ 1 \rightarrow 2 \} \\
& + 2f_{12}\sqrt{S_1}\sqrt{S_2} \left\{ 1 + (\bar{N}_1 + 1)e^{i\omega_1\tau} + (\bar{N}_2 + 1)e^{i\omega_2\tau} - \bar{N}_1 e^{-i\omega_1\tau} \right. \\
& - \bar{N}_2 e^{-i\omega_2\tau} - \bar{N}_1(\bar{N}_2 + 1)e^{-i\tau(\omega_1 - \omega_2)} - \bar{N}_2(\bar{N}_1 + 1)e^{i\tau(\omega_1 - \omega_2)} \\
& \left. + (\bar{N}_1 + 1)(\bar{N}_2 + 1)e^{i\tau(\omega_1 + \omega_2)} + \bar{N}_1\bar{N}_2 e^{-i\tau(\omega_1 + \omega_2)} \right\} .
\end{aligned}
\tag{D3}$$

Die Zeitintegration kann nun z. B. nach der in /78/ angegebenen Methode ausgeführt werden und führt auf modifizierte Besselfunktionen I_1 mit dem Argument $2S_r\sqrt{\bar{N}_r(\bar{N}_r + 1)}$. Unter Benutzung der Rekursionsformel

$$I_{1-1}(z) - I_{1+1}(z) = \frac{21}{z} I_1(z) \tag{D4}$$

kann die letzte geschweifte Klammer in (D3) auf die Form

$$\begin{aligned}
2\pi \sum_{k_1 = -\infty}^{\infty} \sum_{k_2 = -\infty}^{\infty} \left[\frac{\bar{N}_1 + 1}{\bar{N}_1} \right]^{k_1/2} \left[\frac{\bar{N}_2 + 1}{\bar{N}_2} \right]^{k_2/2} I_{k_1} \left[2S_1\sqrt{\bar{N}_1(\bar{N}_1 + 1)} \right] \times \\
\times I_{k_2} \left[2S_2\sqrt{\bar{N}_2(\bar{N}_2 + 1)} \right] (1 + k_1/S_1)(1 + k_2/S_2) \delta(\omega + \omega_1 k_1 + \omega_2 k_2)
\end{aligned}
\tag{D5}$$

gebracht werden. Dieselbe δ -Funktion wie in (D5) tritt aber auch in den beiden anderen geschweiften Klammern von (D3) auf, so daß schließlich eine Zusammenfassung unter der Doppelsumme in Gestalt eines Binoms möglich wird, die (3.40) ergibt.