

Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum

Lumineszenz

– Vorbereitung –

Armin Burgmeier Robert Schittny

1 Theoretische Grundlagen

1.1 Bändermodell

Zur Beschreibung der Leitungseigenschaften von Festkörpern eignet sich das *Bändermodell*. Dabei betrachtet man ein schwaches periodisches Potential, welches von den periodisch im Kristallgitter angeordneten Atomkernen erzeugt wird. Außerdem wird die Wechselwirkung zwischen den Elektronen vernachlässigt. Letzteres führt dazu, dass die Elektronen-Wellenfunktionen unabhängig voneinander sind und man den Kristall mit 1-Elektronen-Wellenfunktionen beschreiben kann.

Das Bloch-Theorem besagt, dass die Wellenfunktion eines Elektrons im periodischen Potential einer Blochwelle entspricht:

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Ω ist dabei ein Normierungsfaktor, \mathbf{k} ein Wellenvektor, n der Bandindex und $u_{n,\mathbf{k}}$ ist eine gitterperiodische Funktion, die im wesentlichen die Wechselwirkung mit den Atomorbitalen beschreibt.

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

wobei \mathbf{R} ein Gittervektor ist. Daraus ergibt sich, dass die Energieeigenwerte auch periodisch sind

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E_n(\mathbf{k}) \quad (3)$$

1 Theoretische Grundlagen

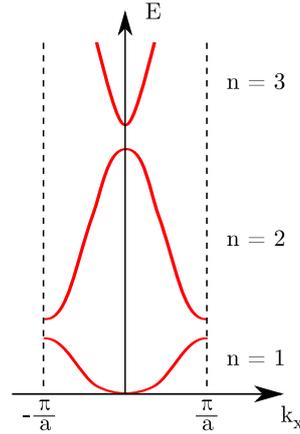


Abbildung 1: Elektronenzustände im reduzierten Zonenschema

mit einem reziproken Gittervektor \mathbf{G} . Diese Periodizität begründet die Darstellung der Elektronenzustände in einem reduzierten Zonenschema, bei dem nur die erste Brillouinzone dargestellt ist. Energiewerte in allen weiteren Brillouinzone kann man nach Gleichung (3) in die erste Brillouinzone zurückführen.

Die Energiedispersion $E(\mathbf{k})$ unterscheidet sich vor allem am Rand der Brillouinzone von der für freie Elektronen¹. Man findet, dass am Zonenrand

$$\nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = 0 \quad (4)$$

gelten muss. Dadurch entstehen Energiebereiche, in denen es keine erlaubten Elektronenzustände gibt. Diese Bereiche werden Bandlücken genannt. Die Bereiche mit erlaubten Zuständen nennt man (Energie-)Bänder. In Abbildung 1 ist dies für eine Dimension veranschaulicht.

Für $T = 0 \text{ K}$ besetzt man nun die Zustände für alle im Kristall vorhandene Elektronen nach der Fermi-Dirac-Statistik. Je nach Material kann es dabei vorkommen, dass die Fermi-Energie dann in einer Bandlücke oder innerhalb eines Bandes liegt. Im letzteren Fall sind eine bestimmte Anzahl von Bändern voll mit Elektronen besetzt (Valenzbänder), das darüber liegende Band ist teilweise besetzt und alle darauf folgenden Bänder sind nicht besetzt (Leitungsbänder). In diesem Fall hat man ein Metall vorliegen.

Liegt die Fermi-Energie innerhalb einer Bandlücke, so gibt es kein teilweise besetztes Band. Hier spricht man von einem Halbleiter oder Isolator, je nachdem wie groß die Energielücke zwischen dem höchsten Valenzband und dem niedrigsten Leitungsband ist. Der Übergang ist fließend. Als Faustregel gilt, dass man über einer Bandlücke von $E_g = 4 \text{ eV}$ von einem Isolator spricht.

¹ $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$

1.2 Elektronen und Löcher

Für $T > 0$ K ist es bei Halbleitern möglich, eine endliche Leitfähigkeit herzustellen. Dazu muss man einige Elektronen ins Leitungsband bringen oder Zustände im höchsten Valenzband unbesetzt lassen (denn volle und leere Bänder tragen nicht zur Leitfähigkeit bei). In letzterem Fall betrachtet man nicht die in der Größenordnung von 10^{23} liegenden Elektronen im höchsten Valenzband, sondern stattdessen die unbesetzten Zustände. Diese verhalten sich genauso wie ein elektronischer Ladungsträger, allerdings mit umgekehrter Ladung, umgekehrtem Spin und umgekehrtem Impuls. Solch ein unbesetzter Zustand wird auch als „Defektelektron“ oder „Loch“ bezeichnet.

Den beiden Ladungsträgern kann man nun noch eine effektive Masse

$$m = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} \quad (5)$$

zuordnen, mit der sie nach $F = ma$ auf eine äußere Kraft reagieren. Da wir im folgenden vor allem am Übergang vom höchsten Valenz- zum niedrigsten Leitungsband interessiert sind, und dort $E(\mathbf{k})$ annähernd quadratisch verläuft (vgl. Abbildung 1), nehmen wir die effektive Masse als konstant an.

Es gibt nun mehrere Möglichkeiten um Elektronen in einem Halbleiter ins Leitungsband oder Löcher ins Valenzband zu induzieren:

1. Thermische Anregung

Bei $T > 0$ K wird ein kleiner Teil der Elektronen des höchsten Valenzbandes in das niedrigste Leitungsband thermisch angeregt. Da auf diese Weise Elektronen und Löcher immer paarweise entstehen gilt für die Konzentrationen von positiven bzw. negativen Ladungsträgern n und p :

$$n = p = n_i(T) \quad (6)$$

$n_i(T)$ nennt man die *intrinsische Elektronenkonzentration*. Bei den meisten Halbleitern ist sie jedoch sehr klein, sodass die thermische Anregung nur einen untergeordneten Effekt darstellt.

2. Dotierung

Als *Dotierung* bezeichnet man das gezielte Verunreinigen eines Halbleiters indem man Fremdatome in das Kristallgitter einbaut. Besonders interessant sind Elemente der fünften Hauptgruppe, da sie ein schwach gebundenes Elektron haben das ins Leitungsband angeregt werden kann. Diese Elemente nennt man Donatoren.

Umgekehrt kann man ebenso gut Elemente der dritten Hauptgruppe einbauen. Diese Elemente nehmen leicht ein Elektron des Valenzbandes auf, was gleichbedeutend mit der Abgabe eines Loches in das Valenzband ist. Man nennt sie auch Akzeptoren.

Durch Dotierung kann man also die Anzahl der Ladungsträger einer Sorte (Elektronen oder Löcher, je nachdem ob man Donatoren oder Akzeptoren in das Kristallgitter einbaut) deutlich erhöhen. Da einige der Donatorelektronen auch mit thermisch angeregten Löchern rekombinieren (bzw. umgekehrt Akzeptorlöcher mit thermisch angeregten Elektronen) nimmt die Ladungsträgerkonzentration der anderen Ladungsträgersorte durch Dotierung auch ab. Im thermischen Gleichgewicht gilt jedoch immer

$$np = (n_i(T))^2 \quad (7)$$

Je nach Dotierungselement spricht man von n- oder p-Halbleitern.

3. Optische Anregung

Auch durch optische Anregung können Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband gehoben werden. Dabei ist bei der Energiebilanz darauf zu achten, dass auch der Quasiimpuls $\hbar\mathbf{k}$ erhalten sein muss. Liegt das Maximum des Valenzbandes also nicht beim gleichen \mathbf{k} -Wert wie das Minimum des Leitungsbandes, so wird zudem noch ein Phonon mit Quasiimpuls $\hbar\Delta\mathbf{k}$ erzeugt.

1.3 pn-Übergang

Ein *pn-Übergang* entsteht, wenn man einen n- und einen p-Halbleiter miteinander in Kontakt bringt. Wegen der unterschiedlichen Konzentrationen diffundieren dann Elektronen in den p-Halbleiter und Löcher in den n-Halbleiter, wobei sie mit der jeweils anderen Ladungsträgersorte rekombinieren. So entsteht im Grenzbereich ein Gebiet in dem kaum noch Ladungsträger vorhanden sind, die sogenannte Verarmungszone.

Auf den jeweiligen Seiten bleiben ionisierte Donatoren bzw. Akzeptoren übrig die dann ein elektrisches Feld bilden, die entgegen der Diffusion wirken. Es kommt zu einem Gleichgewicht.

Legt man nun eine Spannung an den pn-Übergang an, so fließen zusätzliche Ladungsträger ins Verarmungsgebiet. Legt man den Minus-Pol an die Seite mit dem negativ dotierten Halbleiter und den Plus-Pol an die entgegengesetzte Seite an (Durchlassrichtung), so wird die Verarmungszone kleiner, da Elektronen in diese hinein fließen. Ist die angelegte Spannung groß genug, dann verschwindet die Verarmungszone und es fließt ein Strom.

In der anderen Richtung (Sperrrichtung) werden weiter Elektronen aus der Verarmungszone entfernt, sie wird dadurch größer. Erreicht die angelegte Spannung allerdings die sogenannte Durchbruchspannung, so wird die Diode auch in diese Richtung leitend.

In beiden Fällen befindet sich die Diode bei angelegter Spannung nicht mehr im thermischen Gleichgewicht. Man kann daher die Verteilungen von Elektronen und Löchern in den Bändern nicht mehr durch eine einzelne Fermi-Energie ausdrücken. Zur Abhilfe führt man zwei sogenannte *Quasiferminiveaus* ein, eines für die Elektronen und eines für die Löcher. Diese beschreiben dann einzeln jeweils die Verteilung von Elektronen bzw. Löchern in den Bändern.

2 Leuchtdiode

Eine *Leucht-* oder *Lumineszenzdiode* ist eine in Flussrichtung gepolte Halbleiterdiode, bei der die injizierten Ladungsträger so angeregt werden, dass sie anschließend teilweise strahlend rekombinieren können. Sie besteht vornehmlich aus einem hochdotierten *pn*-Übergang, in dessen Sperrschicht und in angrenzenden Bahngebieten die injizierten Ladungsträger strahlend rekombinieren. Die Emissionswellenlänge $\lambda = hc/E_g$ ist vom Bandabstand E_g des *pn*-Übergangs und somit von den Halbleitereigenschaften der verwendeten Bauteile abhängig. Da die strahlende Rekombination eine *spontane* Emission und somit ein statistischer Prozess ist, ist die von einer Leuchtdiode ausgesandte Strahlung nicht kohärent.

Der strahlende *pn*-Übergang hat dabei dieselbe Strom-Spannungs-Kennlinie wie ein nichtstrahlender:

$$I(U) = I_S \left(e^{\frac{eU}{\beta k_B T}} - 1 \right) \quad (8)$$

I_S ist der Sperrstrom, der Faktor β , der zwischen 1 und 2 liegt, hängt davon ab, an welchem Ort im Halbleiter (Sperrschicht, Bahnbereich oder beides) die Ladungsträger rekombinieren.

2.1 Eigenschaften der Leuchtdiode

Quantenwirkungsgrad Der *Quantenwirkungsgrad* einer Leuchtdiode oder auch eines Photodetektors ist definiert als

$$\eta = \frac{\text{Zahl der pro Zeiteinheit erzeugten Photonen}}{\text{Zahl der injizierten Ladungsträger}} = \frac{j_{Ph}}{j_e} . \quad (9)$$

Wir unterscheiden dabei zwischen *externem* und *internem* Quantenwirkungsgrad. Der interne Quantenwirkungsgrad η_q beschreibt das Verhältnis zwischen direkt im Halbleiter erzeugten Photonen und daran beteiligten Ladungsträgern, während der externe Quantenwirkungsgrad η_{ext} das Verhältnis zwischen aus dem Bauelement austretenden Photonen und eingangsseitig eintretenden Ladungsträgern beschreibt; er bezieht also eventuelle optische Verluste beim Austritt der Strahlung aus der Diode mit ein. Zusammen mit dem optischen Wirkungsgrad η_{opt} , der eben diese optischen Verluste beschreibt (Reflexion, Streuung etc.) gilt

$$\eta_{ext} = \eta_q \cdot \eta_{opt} . \quad (10)$$

Emissionsspektrum Die spektrale Verteilung der Leuchtdiode wird im wesentlichen vom verwendeten Material sowie den Betriebsformen bestimmt. Die emittierte Strahlung ist dabei nicht monochromatisch, da einerseits Störstellen im Halbleiter die Übergangsenergie E_g „verschmieren“ und andererseits Dispersionseffekte im Material auftreten.

Abstrahlcharakteristik Die Abstrahlcharakteristik einer Leuchtdiode ist stark bauförmig abhängig. Für planare Dioden gilt in guter Näherung die Verteilung des sog. *Lamber-*

3 Laserdiode

Strahlers. Dies ist eine ebene, diffus strahlende Fläche mit der Lichtstärke

$$I = I_0 \cdot \cos \alpha , \quad (11)$$

wobei α den Winkel der Strahlrichtung zur Flächennormale angibt.

Optische Verluste und Bauform Tritt die erzeugte Strahlung aus dem Halbleitermaterial mit dem Brechungsindex n_1 in ein anderes Material mit dem Brechungsindex n_2 , so erfolgt eine Teilreflexion, die nach Fresnel zu folgender Transmissionsrate führt (bei senkrechter Inzidenz der Strahlung):

$$T = 1 - R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2 = \frac{4n_1 \cdot n_2}{(n_2 + n_1)^2} \quad (12)$$

Bei einem typischen Übergang Halbleiter - Luft beträgt die Transmission dann nur noch rund 70%. Diese kann z.B. durch einen Kunststoffbelag der Halbleiterschicht mit geeignetem Brechungsindex deutlich erhöht werden.

3 Laserdiode

Im Gegensatz zur Leuchtdiode wird bei der Laserdiode die Strahlung nicht durch spontane Emission erzeugt, sondern durch *stimulierte* Emission. Dies erzeugt monochromatische und kohärente Strahlung im Gegensatz zur inkohärenten Strahlung der Leuchtdiode. Zur Herbeiführung von stimulierter Emission müssen dabei zwei Voraussetzungen erfüllt sein:

1. *Besetzungsinversion*

Es müssen dauerhaft mehr Ladungsträger auf höherem als auf niedrigerem Energieniveau vorhanden sein, damit die stimulierte Emission aufrecht erhalten werden und somit ein Verstärkungseffekt entstehen kann. Dies wird mit durch hohe Dotierung entarteten Halbleitern erreicht, das Quasiferminiveau der Elektronen liegt also im Leitungsband, das der Löcher im Valenzband. Die Besetzungsinversion wird dabei durch Anlegen einer bestimmten Mindestspannung, der *Schwellspannung*, herbeigeführt, unterhalb der nur die von der Leuchtdiode bekannte spontan emittierte Strahlung auftritt. Im Bereich der Schwellspannung tritt zunächst eine Superstrahlung mit erheblich höherem Wirkungsgrad der Lichterzeugung auf (der Emissionsbereich geht dabei in eine Anzahl intensiver schmaler Linien über), bevor schließlich bei weiter steigender Ladungsträgerinjektion die stimulierte Emission einsetzt.

2. *Resonanz*

Um die stimulierte Emission weiter aufzubauen und insbesondere eine monochromatische Strahlung herbeizuführen, muss das entstehende Licht in einem Resonator „gefangen“ werden; dieser wird durch ein planparalleles Spiegelsystem realisiert, das einen *Fabry-Perot-Resonator* darstellt. Einer der beiden Spiegel ist dabei

3 Laserdiode

teilweise durchlässig (meist reicht direkt die Grenze Halbleiter - Luft mit einer Transmission um 70% aus), wo dann die Strahlung austritt.

Auch die Laserdiode kann näher durch ihren Quantenwirkungsgrad beschrieben werden, dies geschieht analog zur Leuchtdiode.