

6. Rekombination u. Nichtgleichgewichtsstatistik

Anwendung auf Generations- u. Rekombinations (g-r)-
Prozesse von Ladungsträgern in Halbleitern:

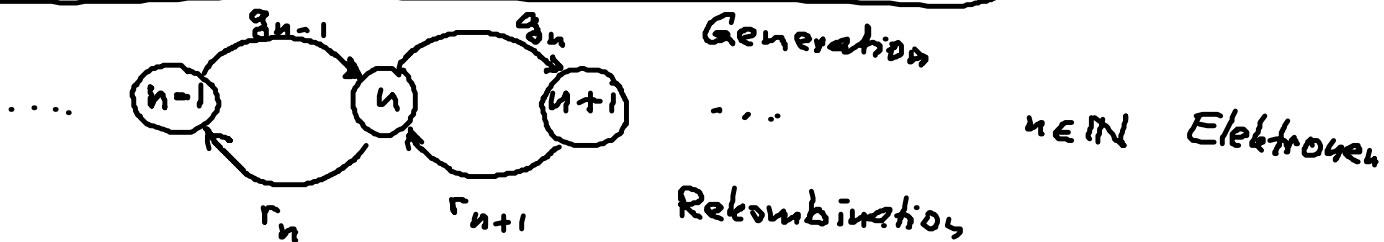
- Übergänge von Elektronen u. Löchern zwischen
qu. Zuständen (Leitungsband, Valenzband, lokalisierte
diskrete Niveaus in Störstellen oder Quantenpunkten)
 - dabei Absorption/Emission eines Photons (strahlender
g-r-Prozess)
 - oder Absorption/Emission von Phononen (nichtstrahl.
g-r-Prozess)
 - oder Coulomb-Streuung (e-e-Streuung, Auger-Rekomb.,
Stoßionisation)

Ein-Schritt-Prozesse (birth-death process)

$\hat{=}$ chem. Reaktion

→ Beschreibung durch Mastergl. (§2.1)

$$\dot{P}_n = r_{n+1} P_{n+1} + g_{n-1} P_{n-1} - (r_n + g_n) P_n$$



Rategl. für mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle$:

(\cong 0. Moment der Boltzmann-Gl. für Teilchendichte

$$n(\underline{r}, t) = \frac{\langle N \rangle}{V} = \int f(\underline{r}, \underline{k}, t) z d^3k \quad z \equiv \frac{2}{(2\pi)^3}$$

= makroskop. Generations-Rekombinationsrate φ

$$\dot{n} + \nabla_r (n \underline{v}) = \varphi(n, \underline{E}) \equiv \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}} z d^3k$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle N \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n \dot{P}_n = \sum_{n=0}^{\infty} n (r_{n+1} P_{n+1} - r_n P_n) + \sum_{n=0}^{\infty} n (g_{n-1} P_{n-1} - g_n P_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \{ [(n-1) - n] r_n P_n + [(n+1) - n] g_n P_n \} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle N \rangle = \langle g_n \rangle - \langle r_n \rangle}$$

• für lineare g-r-Prozesse $\left. \begin{array}{l} \langle g_n \rangle \sim \langle N \rangle \\ \langle r_n \rangle \sim \langle N \rangle \end{array} \right\}$ geschl. Gl. syst.

• für nichtlin. g-r-Prozesse:
Vernachlässigung der Fluktuationen (mean field approx.)

$$\langle \Delta N^2 \rangle \equiv \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle \equiv \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \stackrel{!}{\approx} 0$$

$$\Rightarrow \langle N^2 \rangle \approx \langle N \rangle^2$$

• ohne mean-field approx.: unendl. Gl. hierarchie für die Momente $\langle N^k \rangle$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle N^k \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} [n^k g_{n-1} P_{n-1} - n^k g_n P_n + n^k r_{n+1} P_{n+1} - n^k r_n P_n] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \{ [(n+1)^k - n^k] g_n P_n + [(n-1)^k - n^k] r_n P_n \} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\sum_{m=0}^{k-1} \binom{k}{m} n^m g_n P_n + \sum_{m=0}^{k-1} \binom{k}{m} n^m (-1)^{k-m} r_n P_n \right] \\ &= \sum_{m=0}^{k-1} \binom{k}{m} \langle n^m g_n \rangle + (-1)^{k-m} \langle n^m r_n \rangle \end{aligned}$$

Inbesondere:

$$\frac{d}{dt} \langle N \rangle = \langle g_n \rangle - \langle r_n \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle N^2 \rangle = \langle g_n \rangle + \langle r_n \rangle + 2 \langle n g_n \rangle - 2 \langle n r_n \rangle$$

...

Im folgenden energieaufgelöste Betrachtung:

Verteilung der Elektronen auf Leitungsband u. Valenzbandzustände?

⇒ Stöpern der Boltzmann-Gl. $(\frac{\partial f}{\partial t})_{\text{Stoß}}$

zunächst: im thermodyn. Gleichgewicht

dann: Nichtgleichgewicht

6.1 Zustandsdichte

wichtige Größe nicht nur in kristallinen, sondern auch in amorphen (ungeordn.) Festkörpern.

Hier: allgemeine Behandlung in d Dimensionen

(Nanostrukturen: Quantentopf - 2D)
Quantendraht - 1D
Quantenpunkt - 0D

Wähle festes Grundvolumen V_d im d -dim. Ortsraum.

Zahl der Zustände im Energieintervall $E \dots E+dE$ pro V_d :

$D(E) dE$ Zustandsdichte (density of states) $D(E)$
DOS

Für Kristalle kann $D(E)$ durch Blochvektor \underline{k} ausgedrückt werden: $E(\underline{k})$ Energie-Bandstruktur

• Zahl der Zustände im \underline{k} -Raum pro Brillouin-Zone-Vol. V_{BZ}

$2N$ (N Elementarzellen im Ortsraum-Vol. V_d)
incl. Spin

• Volumen der B.Z. in d -dim. \underline{k} -Raum: $V_{BZ} = (2\pi)^d \frac{N}{V_d}$

- Zahl der Zustände im BZ-Volumenelement $d^d k$ pro V_d :

$$z d^d k = \frac{2N}{V_d} \frac{d^d k}{V_{BZ}} = \frac{2}{(2\pi)^d} d^d k \quad \boxed{z = \frac{2}{(2\pi)^d}}$$

- Zahl der Zustände mit Energie $0 \leq E \leq E_0$ pro V_d :

$$\int_0^{E_0} D(E) dE = \int_{G(E_0)} z d^d k = \frac{z}{(2\pi)^d} \int_0^{E_0} dE \int S(E - E(\underline{k})) d^d k$$

$G(E_0)$
 von der Fläche $E(\underline{k}) = E_0$
 umschlossenes Gebiet
 im k -Raum

Integration über
 Energieflächen k -Raum
 $E(\underline{k}) = \text{const.}$
 im k -Raum

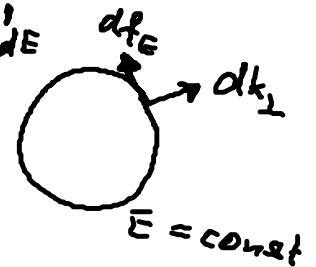


Also

$$\boxed{D(E) dE = \left\{ \frac{z}{(2\pi)^d} \int S(E - E(\underline{k})) d^d k \right\} dE}$$

Für $d=3$ folgt mit $d^3 k = d\underline{k} = d\underline{k} \perp \underline{\nabla}_{\underline{k}} E = d\underline{k} |\underline{\nabla}_{\underline{k}} E|^{-1} dE$

$$\boxed{D(E) = \frac{z}{(2\pi)^3} \int \frac{d\underline{k}}{|\underline{\nabla}_{\underline{k}} E(\underline{k})|} \Big|_{E=\text{const.}}}$$



Beispiel:

Anisotropes parabol. Band in d Dim.:

$$E(\underline{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^d \frac{k_i^2}{m_i} \sigma_i = \sum_{i=1}^d y_i^2 \sigma_i \quad \text{mit } y_i = \frac{\hbar k_i}{\sqrt{2m_i}}, \quad \sigma_i = \pm 1$$

$$dy_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_i}} dk_i \quad \Rightarrow \quad d^d k_i = dk_1 \dots dk_d = \frac{\sqrt{2^d m_1 \dots m_d}}{\hbar^d} d^d y$$

$$D(E) = \frac{z}{(2\pi)^d} \frac{\sqrt{2^d m_1 \dots m_d}}{\hbar^d} \int S(E - \sum_{i=1}^d \sigma_i y_i^2) d^d y$$

Klassifikation der Bandextrema im k -Raum nach der Vorzeichenfolge $(\sigma_1, \dots, \sigma_d)$ (Von Hove-Singularitäten der Zustandsdichte):

M_0 : alle $\sigma_i > 0$

Minimum von $E(\underline{k})$ \cup Leitband

$$M_1: \begin{cases} \sigma_1 < 0, \sigma_i > 0 \text{ sonst} \\ \vdots \\ \sigma_1, \sigma_2 < 0, \end{cases} \text{ Sattelpkt}$$

$$M_d: \text{ alle } \sigma_i < 0 \quad \text{Maximum}$$

Valenzband 

Berechnung der Zustandsdichte für d-dim. Min. (M_0):

$$\int \delta(E - y^2) d^d y = \int_{\Omega_d} \delta(E - y^2) y^{d-1} dy = \frac{\Omega_d}{2} \int_0^\infty \delta(E - s) s^{\frac{d-2}{2}} ds$$

$\sum_{i=1}^d y_i^2$ d-dim. Kugelkoordin. "s"

$$= \frac{\Omega_d}{2} E^{\frac{d-2}{2}} \quad E > 0$$

wobei $\Omega_d = 2 \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ das d-1 dim. Winkelintegral ist

($\Omega_d y^{d-1}$ ist die Oberfl., $\Omega_d \frac{y^d}{d}$ das Vol. einer d-dim. Kugel)

Strecke $\Omega_1 = 2\sqrt{\pi} / \Gamma(\frac{1}{2}) = 2$ $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$

Kreis $\Omega_2 = 2\pi / \Gamma(1) = 2\pi$ $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$

Kugel $\Omega_3 = 2\pi^{3/2} / \Gamma(\frac{3}{2}) = 4\pi$ $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$

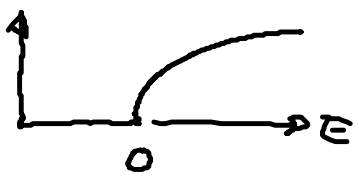
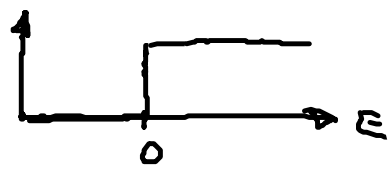
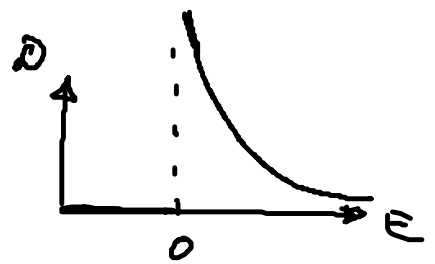
Evq. $D(E) = \begin{cases} \frac{2\sqrt{m_1 \dots m_d}}{(2\pi\hbar^2)^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2})} E^{\frac{d-2}{2}} & E \geq 0 \\ 0 & E < 0 \end{cases}$

Insbesondere (für $E \geq 0$),

d=1 : $D(E) = \frac{\sqrt{2m_1}}{\pi\hbar} E^{-1/2}$

d=2 : $D(E) = \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{\pi\hbar^2}$

d=3 : $D(E) = \frac{\sqrt{8m_1 m_2 m_3}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$



Zustandsdichte an der Bandkante höher für niedrigere Dim.!

Für ein 3-dim. isotropes parabol. Band $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ folgt

auch direkt mit $|\nabla_k E| = \frac{\hbar^2 k}{m^*}$, $df_E = k^2 d\Omega$:

$$\mathcal{D}(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p_E}{|\nabla_k E|} \underset{E = \text{const.}}{=} \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi k^2}{\hbar^2} k d\Omega = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$

$k = \frac{\sqrt{2m^* E}}{\hbar}$