

2.6 Transport und Rekombination

2.6.1 Driftstrom

2.6.2 Diffusionsstrom

2.6.3 Halbleitergrundgleichungen

2.6.4 Rekombinationsprozesse

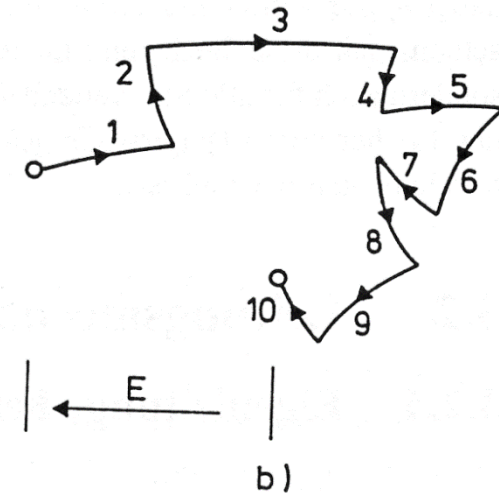
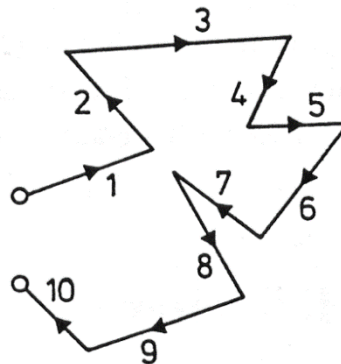
Strom im Halbleiter:

Abfolge von Phasen der Beschleunigung und abrupten Stößen

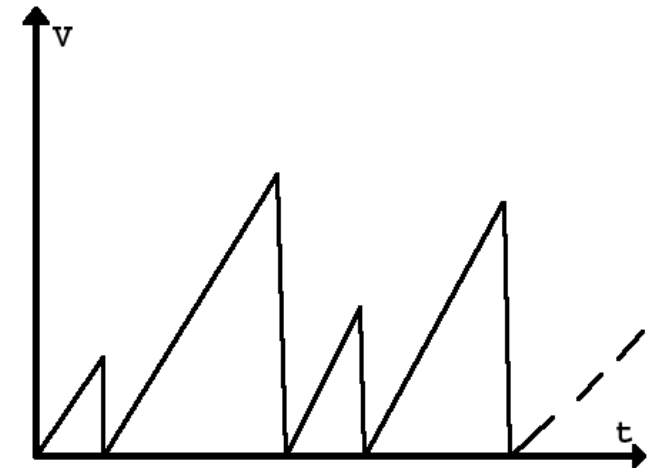
Elektronen werden durch den Halbleiter getrieben

↓
„Drift“ströme

Elektronenbahn
ohne/mit Feld



Elektronen werden im Mittel nach der Zeit τ durch Stoß mit Atomrumpf abrupt abgebremst.



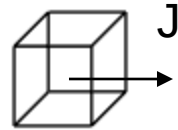
Damit ergibt sich (nicht ganz sauber)
als mittlere Geschwindigkeit:

$$\bar{v} = \frac{F}{m} \tau = \frac{qE\tau}{m^*} = \frac{-eE\tau}{m^*} \equiv -\mu E$$

Damit ergibt sich eine zentrale Größe
für einen Halbleiter, die **Beweglichkeit** μ :

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}$$

Sie ist ein Maß dafür, wie schnell sich ein Elektron im Halbleiter unter
Einwirkung des elektrischen Feldes bewirkt



Stromdichte durch ein Volumenelement:

$$J = q \cdot n \cdot \bar{v} = q \cdot n \cdot \mu \cdot E = \sigma \cdot E$$

El. Feld

Leitfähigkeit

Ladung pro
Teilchen (1e)
(Einheit: C=As)

Dichte der Ladungen
(Einheit: m⁻³ bzw cm⁻³)

mittlere Geschwindigkeit
Einheit: m/s

Quantitativ wird die Leitfähigkeit σ berechnet durch:

$$\sigma = e(\mu_n n + \mu_p p)$$

Ladung des Elektrons

Beweglichkeit der
Ladungsträger im
Leitungsband

Anzahl der
Ladungsträger im
Leitungsband

Anzahl der
Defektelektronen im
Valenzband

Beweglichkeit der
Ladungsträger im
Valenzband

Für die meisten Berechnungen sind nur wenige Bänder wichtig:

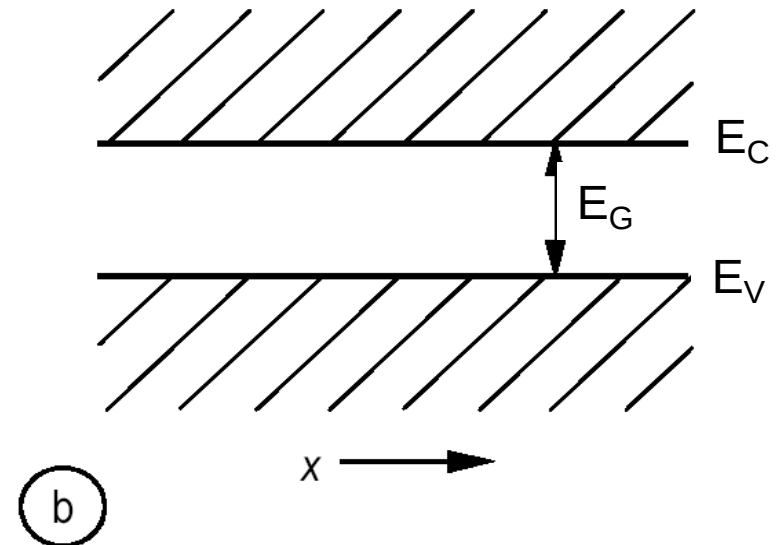
- ⇒ die (fast) gefüllten Bänder mit der höchsten Energie
- ⇒ die (fast) leeren Bänder mit der niedrigsten Energie

Die Bandstruktur wird dann in einem vereinfachten Bändermodell dargestellt:

E_C : Minimum des Leitungsbands
(Conduction band)

E_V : Maximum des Valenzbandes
(Valence band)

E_G : Energielücke
(Energy gap)



Um die Anzahl der Ladungsträger zu berechnen müssen wir wissen, wie viele Zustände es insgesamt gibt.

Die Anzahl der erlaubten Zustände pro Volumeneinheit und pro Energieintervall nennt man die Zustandsdichte $g(W)$.

- Die Anzahl der Elektronen im Leitungsband (bzw. die Anzahl der Löcher im Valenzband) mit einer Energie W ist im thermischen Gleichgewicht gegeben durch:

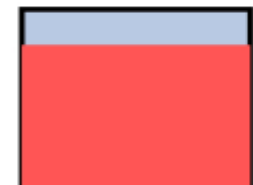
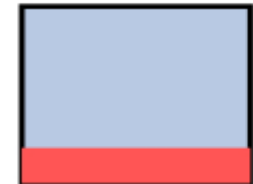
$$n_W(W) = g_L(W)f(W)$$

bzw.

$$p_W(W) = g_V(W)(1 - f(W))$$

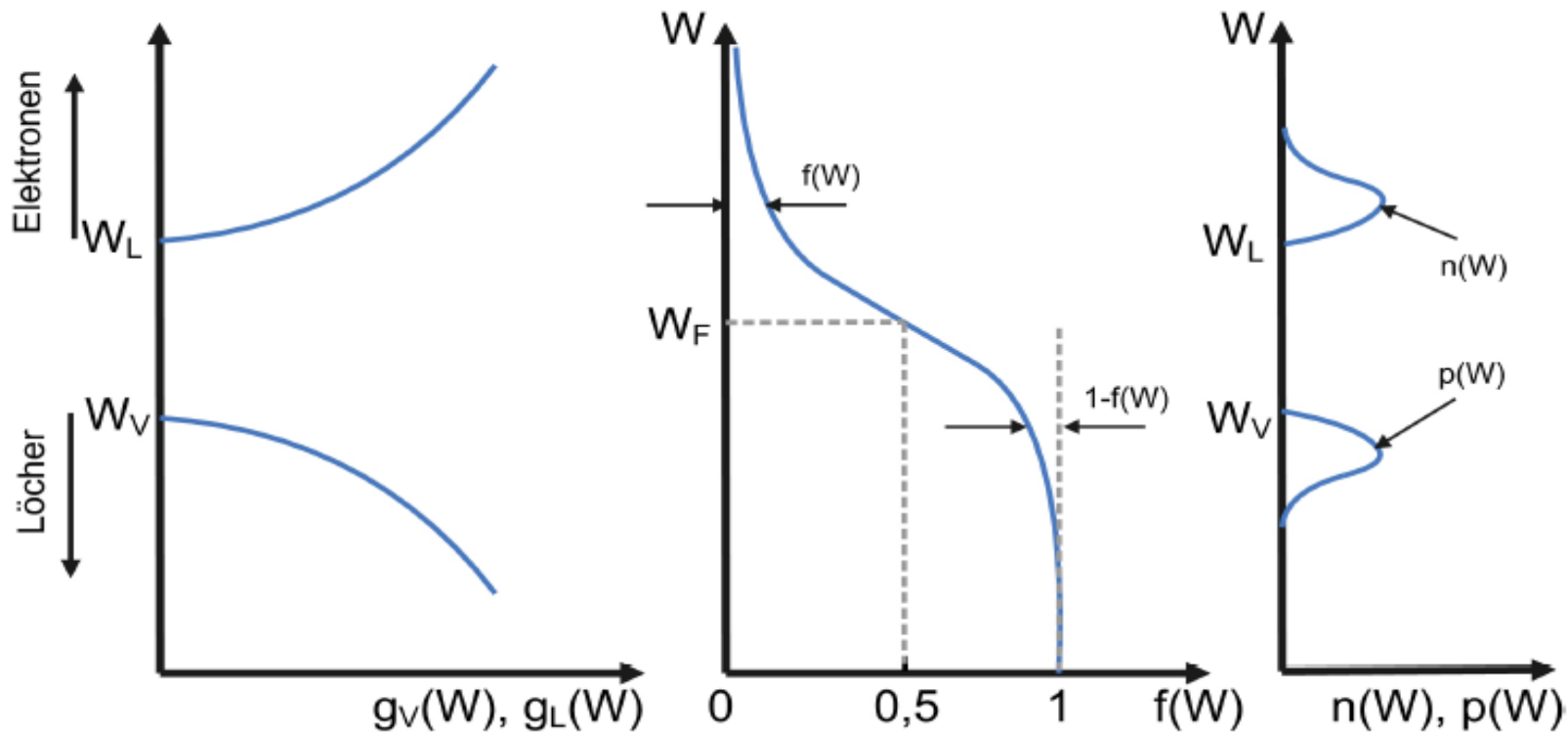
- Durch Integrieren über alle Energien W erhält man die Gesamtzahl der Ladungsträger n bzw. p .

T=300 K



Für die Anzahl der Ladungsträger gilt damit:

$$n_{th} = \int_{W_L}^{\infty} n_W(W) dW = \int_{W_L}^{\infty} g_L(W) f(W) dW \quad \text{bzw.} \quad p_{th} = \int_{-\infty}^{W_V} p_W(W) dW = \int_{-\infty}^{W_V} g_V(W) (1 - f(W)) dW$$



Es kann für die Besetzung des Leitungsbandes mit Elektronen abgeleitet werden:

$$n = N_L \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{kT}\right) \quad \text{mit } N_L = 2\left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Hierbei ist N_L ist die „effektive“ Zustandsdichte des Leitungsbandes.

Es kann für die Besetzung des Valenzbandes mit Löchern abgeleitet werden:

$$p = N_V \exp\left(-\frac{W_F - W_V}{kT}\right) \quad \text{mit } N_V = 2\left(\frac{2\pi m_h kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Hierbei ist N_V ist die „effektive“ Zustandsdichte des Valenzbandes

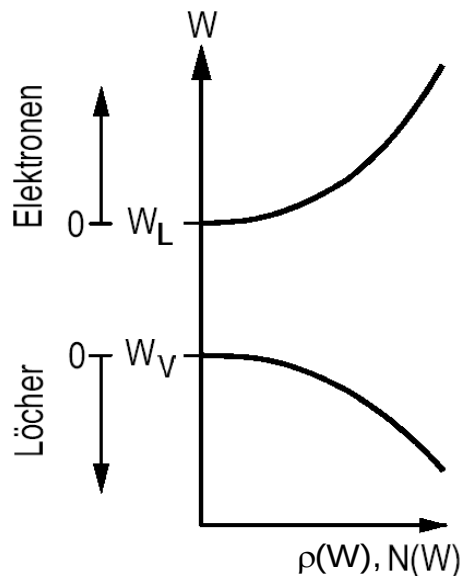
- Beschreibung des Halbleiters durch zwei effektive Niveaus mit entsprechend großer Zustandsdichte
- Besetzung erfolgt mit einem Boltzmann-Faktor.
- ...allerdings ist $N_{C,V}$ kein echter Materialparameter, da T-abhängig

Multiplikation
ergibt:

$$np = N_L \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{k_B T}\right) N_V \exp\left(\frac{W_V - W_F}{k_B T}\right) =$$

$$= N_L N_V \exp\left(-\frac{W_L - W_V - W_F + W_F}{k_B T}\right) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{k_B T}\right)$$

$$\text{mit } W_G = W_L - W_V$$



D.h. Elektronen- und Lochkonzentration stellen sich ein nach einer Art „Massenwirkungsgesetz“ !

Für den intrinsischen Halbleiter gilt:

$$n_i = p_i = \sqrt{N_L N_V} \exp\left(-\frac{W_G}{2k_B T}\right)$$

Erinnerung: Quasi-Fermi-Verteilungen

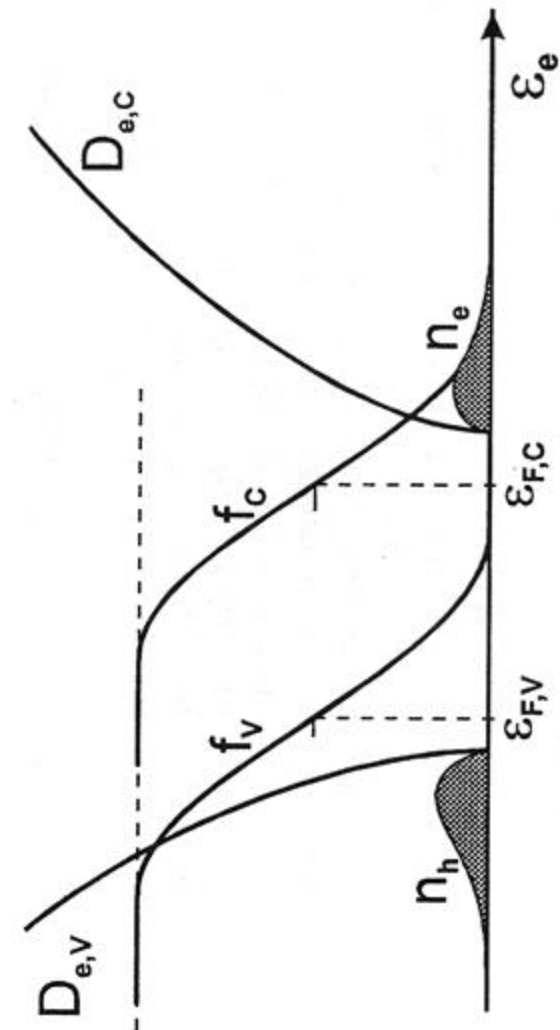
In der Solarzelle gilt dies gerade NICHT!

Ausweg: Statt durch *eine* Fermi-Verteilung erfolgt die Beschreibung der Ladungsträgerstatistik im Beleuchteten Halbleiter durch *zwei* Quasi-Fermi-Verteilungen, jeweils eine für die Löcher und eine für die Elektronen.

$$n_e \equiv n = N_C \exp\left(\frac{E_{F,e} - E_C}{kT}\right)$$

$$n_h \equiv p = N_V \exp\left(-\frac{E_{F,h} - E_V}{kT}\right)$$

- Solarzelle: Beleuchtung sorgt für $E_{F,h} \neq E_{F,e}$



Damit haben wir den Strom #1: Den Driftstrom

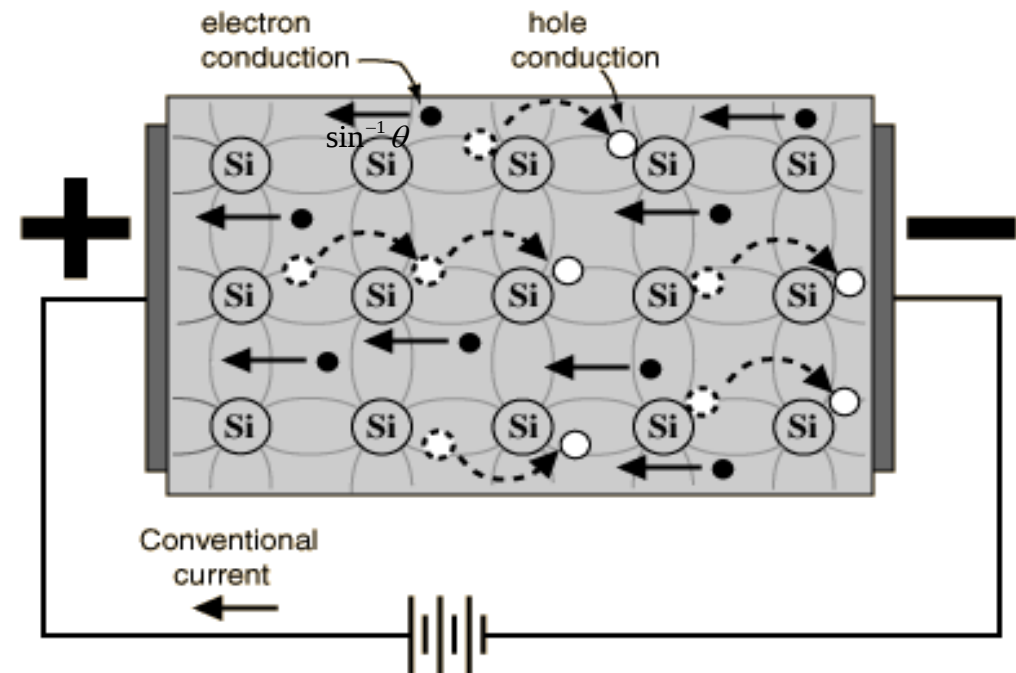
Driftstrom (Feldstrom) J_F infolge eines elektrischen Feldes

⇒ **Strom setzt sich aus einem Elektronen- und einem Löcheranteil zusammen**

⇒ **Leitfähigkeit hängt von der Ladungsträgerdichte und der Beweglichkeit ab**

$$\begin{aligned}\vec{J}_F &= \vec{J}_{n,F} + \vec{J}_{p,F} \\ &= -en\vec{v}_n + ep\vec{v}_p \\ &= e[n\mu_n + p\mu_p]\vec{E} = \sigma\vec{E}\end{aligned}$$

$$\sigma = e[n\mu_n + p\mu_p]$$



2.6 Transport und Rekombination

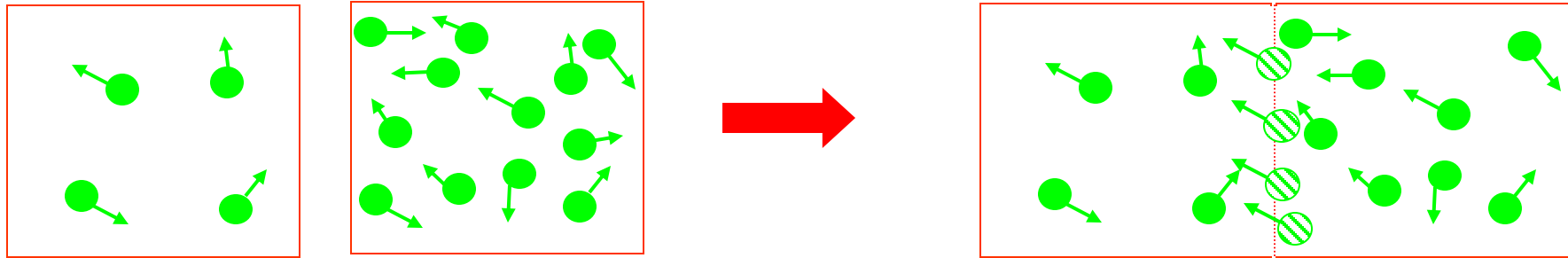
2.6.1 Driftstrom

2.6.2 Diffusionsstrom

2.6.3 Halbleitergrundgleichungen

2.6.4 Rekombinationsprozesse

Strom # 2: Diffusionsstrom

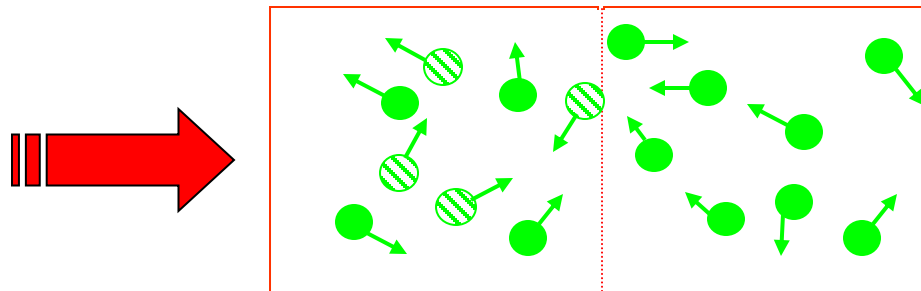


Zwei Bereiche mit verschiedener
Konzentration an Ladungsträgern
werden
zusammengebracht



Es fließt ein Strom

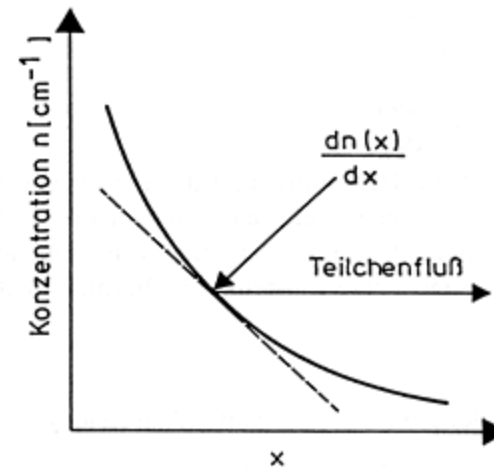
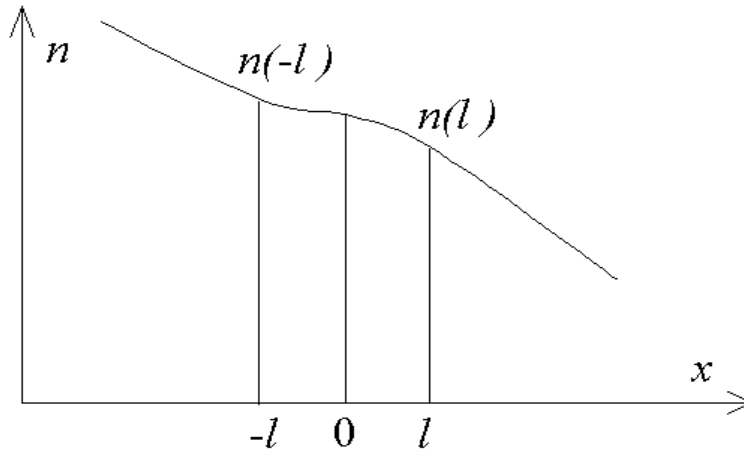
–im Durchschnitt bewegen
sich mehr Träger aus dem
Bereich höherer
Konzentration zum Bereich
niedrigerer Konzentration als
anders herum



Es stellt sich eine
statistische
Gleichverteilung der
Träger ein.

Strom # 2: Diffusionsstrom

–die Diffusionskonstanten D_n und D_p geben an, wieviel Strom bei einem gewissen Gradienten der e's bzw. h's fließt



eindimensional:

im Grenzübergang $l \rightarrow 0$:

$$J_{n,D} = eD_n \frac{dn}{dx}$$

bzw. für die Löcher:

$$J_{p,D} = -eD_p \frac{dp}{dx}$$

(unterschiedliches
Vorzeichen für e's und
h's !)

Strom # 2: Diffusionsstrom

Verallgemeinerung auf
3D:

$$J_{n,D} = eD_n \frac{dn}{dx}$$



$$\vec{J}_{n,D}(\vec{r}) = eD_n \nabla n(\vec{r})$$

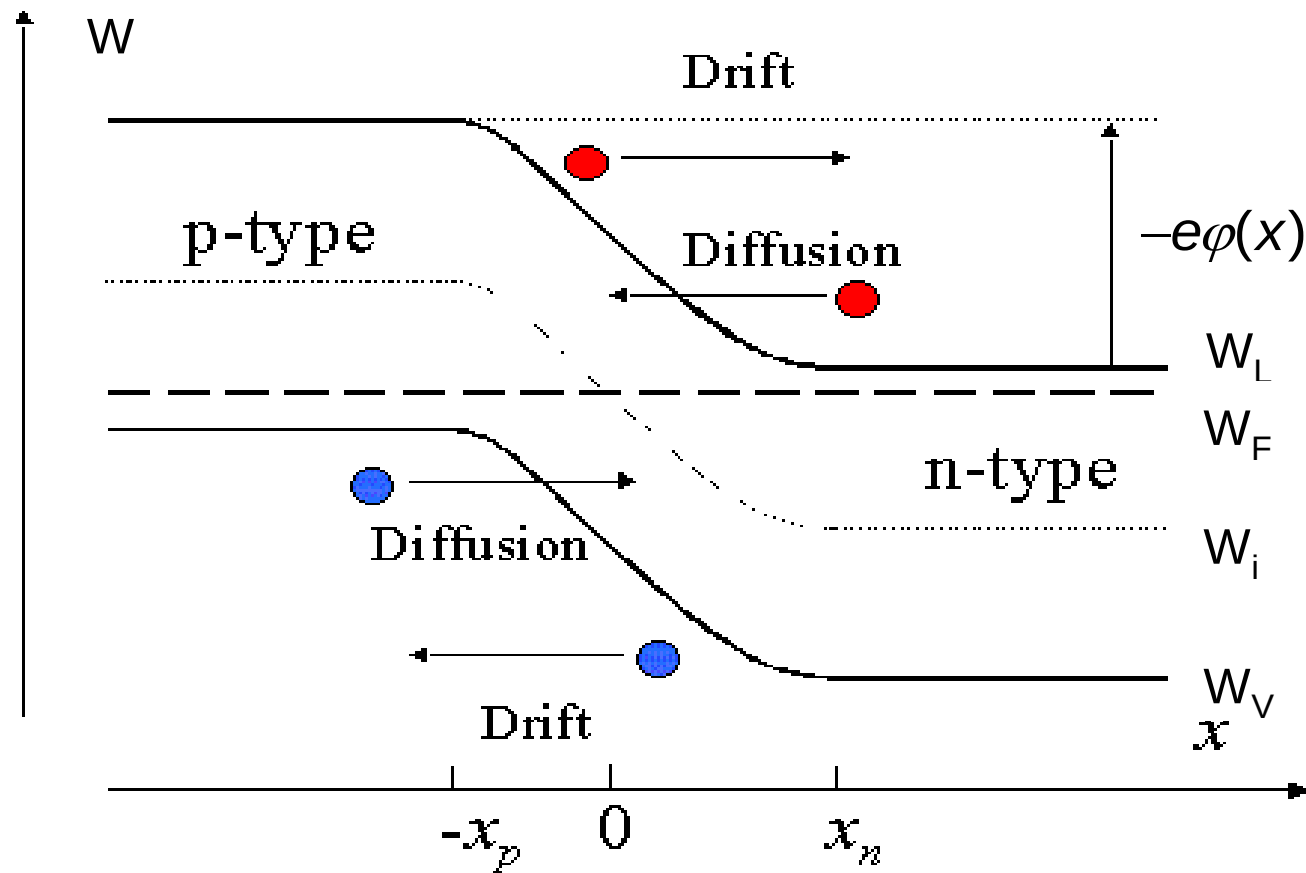
Insgesamt gilt also für die Diffusionsströme:

$$\vec{J} = \vec{J}_{n,D}(\vec{r}) + \vec{J}_{p,D}(\vec{r})$$

$$\vec{J}_{n,D}(\vec{r}) = eD_n \nabla n(\vec{r})$$

$$\vec{J}_{p,D}(\vec{r}) = -eD_p \nabla p(\vec{r})$$

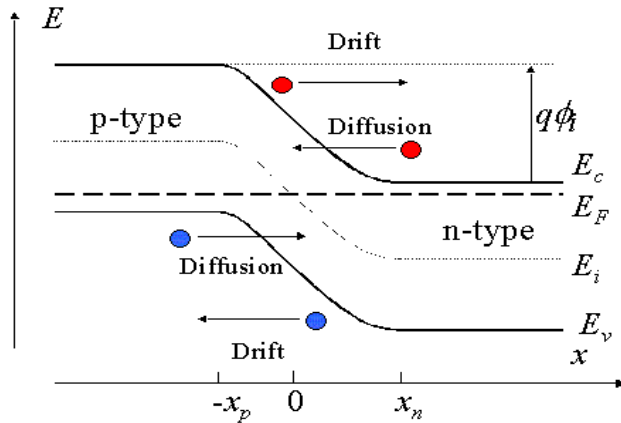
Zusammenhang von Drift und Diffusion



Die bekannte Ladungsträgerstatistik erlaubt uns auch für den Bereich mit Feld eine Vorhersage über die ortsabhängige Ladungsträgerdichte:

$$n(x) = N_L \exp\left(-\frac{W_L(\infty) - e\phi(x) - W_F}{kT}\right)$$

Einsteinrelation



$$n(x) = N_L \exp\left(-\frac{W_L(\infty) - e\varphi(x) - W_F}{kT}\right)$$

Hier kommt zum Ausdruck, dass in das elektrochemische Potential („Fermi-Niveau“) in einem Halbleiter das elektrische Potential $\varphi(x)$ mit eingeht. Da wir eine Aussage über Diffusionskonstanten machen wollen, macht es Sinn, den obigen Termin nach x abzuleiten:

$$\frac{\partial n(x)}{\partial x} = n(x) \frac{e}{kT} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} = -n(x) \frac{e}{kT} E(x)$$

Hierbei ist $E = -\text{grad } \varphi(x)$ das ortsabhängige elektrische Feld.

Einsteinrelation

Nun kann ausgenutzt werden, dass sich im Gleichgewicht Drift- und Diffusionsströme gegenseitig kompensieren:

$$\text{Aus } J_F = -J_D \text{ folgt } en(x)\mu_n E(x) = -eD_n \frac{\partial n}{\partial x}$$

Setzt man nun die abgeleitete ortsabhängige Ladungsträgerdichte in diese Beziehung ein, so ergibt sich:

$$en(x)\mu_n E(x) = (-eD_n)(-n(x)\frac{e}{kT}E(x))$$

Aus diesem Ausdruck kann das meiste weggekürzt werden, so dass man zur sogenannten **Einsteinrelation** kommt:

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n$$

Die gleiche Ableitung ließe sich auch für die Löcher machen und man kommt auf diese Weise zu:

$$D_p = \frac{kT}{e} \mu_p$$

Diese hier am Spezialfall pn-Übergang hergeleitete Beziehung ist eine viel allgemeinere Beziehung der statistischen Thermodynamik und gilt z. B. genauso auch bei der Bewegung von Ionen in einer Elektrolytlösung.

2.6 Transport und Rekombination

2.6.1 Driftstrom

2.6.2 Diffusionsstrom

2.6.3 Halbleitergrundgleichungen

2.6.4 Rekombinationsprozesse

Ladungsträgerprozesse in Halbleitern

Es gibt in Halbleitern drei unterschiedliche Prozesse, durch die sich die Ladungsträgerdichte räumlich und/oder zeitlich verändern kann:

1. Driftstrom ($\vec{J}_F = \vec{J}_{n,F} + \vec{J}_{p,F} = \sigma \vec{E} = [en\mu_n + ep\mu_p] \vec{E}$)

⇒ Ladungsträger bewegen sich aufgrund eines äußeren elektrischen Feldes:

$$\vec{J}_D = \vec{J}_{n,D} + \vec{J}_{p,D} \quad \begin{aligned} \vec{J}_{n,D} &= +eD_n \text{grad } n \\ \vec{J}_{p,D} &= -eD_p \text{grad } p \end{aligned}$$

2. Diffusionsstrom

⇒ Ladungsträger bewegen sich aufgrund eines Konzentrationsgradienten (D_n und D_p sind die Diffusionskonstanten der Elektronen bzw. Löcher):

$$g = g_{\text{phonon}} + g_{\text{opt}} + g_{\text{Rek}} + g_{\text{Auger}} \dots$$

$$r = r_{\text{phonon}} + r_{\text{opt}} + r_{\text{Rek}} + r_{\text{Auger}} \dots$$

Generation und Rekombination

- Die Trägergenerationsrate g setzt sich aus verschiedenen Anteilen zusammen:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{gen} = g = g(x, y, z, t) = g_{opt} + g_{phonon} + g_{St} + \dots$$

g_{opt} : Generationsrate durch Absorption von Photonen (Licht)

g_{phonon} : thermische Generationsrate durch Absorption von Gitter-Phononen

g_{St} : Generationsrate durch Ionisation einer Störstelle

- Zu jedem Generationsprozess gibt es einen entsprechenden Rekombinationsprozess:

$$-\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{rec} = r = r(x, y, z, t) = r_{opt} + r_{phonon} + r_{St} + \dots$$

- Im thermischen Gleichgewicht gilt $g = r$ und einzeln $g_i = r_i$!

Halbleitergrundgleichungen

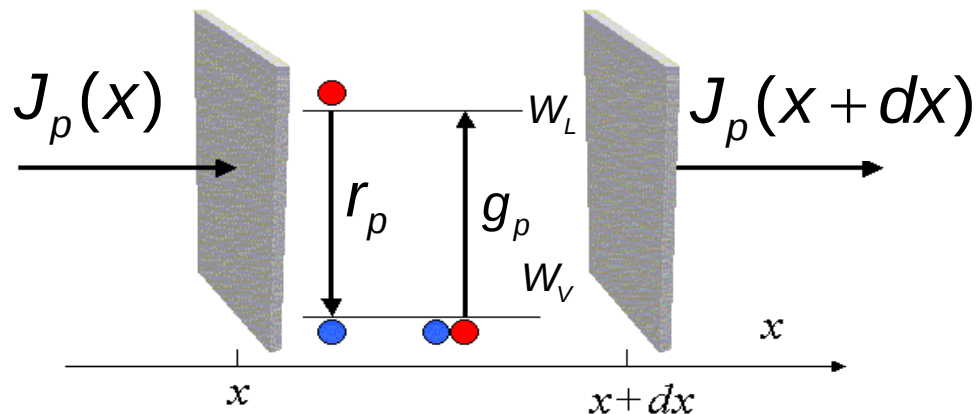
$$(H1) \quad \vec{J}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n$$

$$(H2) \quad \vec{J}_p = ep\mu_p \vec{E} - eD_p \nabla p$$

Drift- und
Diffusion

Wie ändert sich dann die lokale Ladungsdichte

$$\rho = e(p - n) \quad ?$$



$$\frac{\partial(ep)}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} + e(g_p - r_p)$$

bzw. in 3D:

$$\frac{\partial(ep)}{\partial t} + \nabla \vec{J}_p = e(g_p - r_p)$$

(Kontinuitätsgleichung)

Halbleitergrundgleichungen

$$(H1) \quad \vec{J}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n$$

$$(H2) \quad \vec{J}_p = ep\mu_p \vec{E} - eD_p \nabla p$$

Drift- und
Diffusionsgleichung
für Elektronen und Löcher

$$(H3) \quad \frac{\partial(-en)}{\partial t} + \nabla \vec{J}_n = -e(g_n - r_n)$$

$$(H4) \quad \frac{\partial(ep)}{\partial t} + \nabla \vec{J}_p = e(g_p - r_p)$$

Kontinuitätsgleichungen
für Elektronen
und Löcher

...dann fehlt nur noch die Verkopplung von Ladung und E-Feld...

Maxwell-Gleichung: $\nabla \vec{D} = \nabla \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E} = \rho$ bzw. mit $\vec{E} = -\nabla \varphi$

die Poisson-Gleichung: $\text{divgrad} \varphi = \nabla^2 \varphi = \Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}$

Halbleitergrundgleichungen

$$(H1) \quad \vec{J}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n$$

$$(H2) \quad \vec{J}_p = ep\mu_p \vec{E} - eD_p \nabla p$$

Drift- und
Diffusion

$$(H3) \quad \frac{\partial(-en)}{\partial t} + \nabla \vec{J}_n = -e(g_n - r_n)$$

$$(H4) \quad \frac{\partial(ep)}{\partial t} + \nabla \vec{J}_p = e(g_p - r_p)$$

Kontinuitäts-
gleichungen

$$(H5) \quad \Delta \varphi = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} (p - n + n_D^+ - n_A^-); \quad \vec{E} = -\nabla \varphi$$

Poisson-
Gleichung

2.6 Transport und Rekombination

2.6.1 Driftstrom

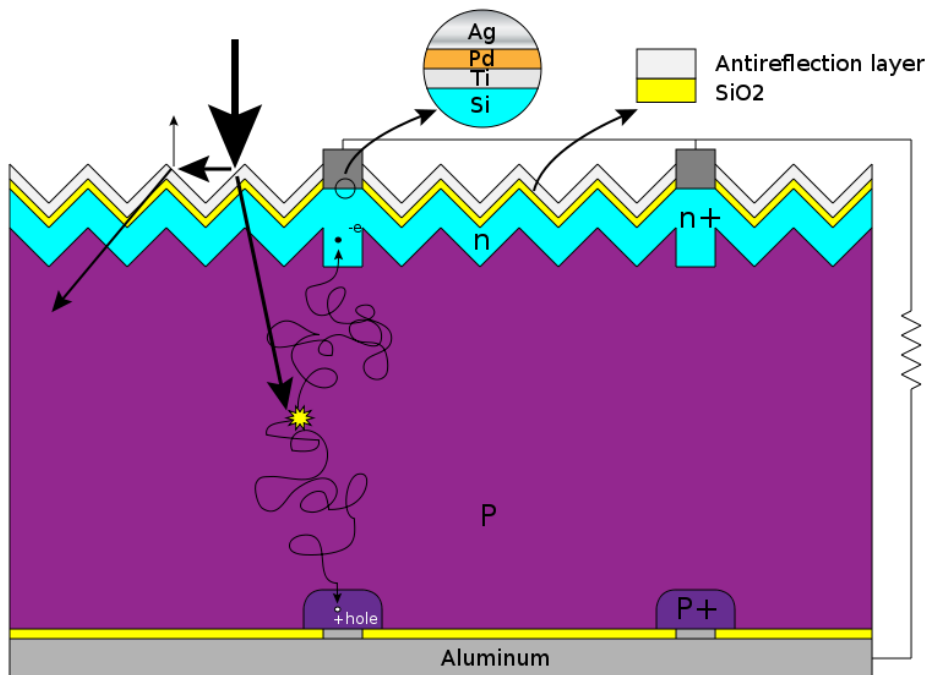
2.6.2 Diffusionsstrom

2.6.3 Halbleitergrundgleichungen

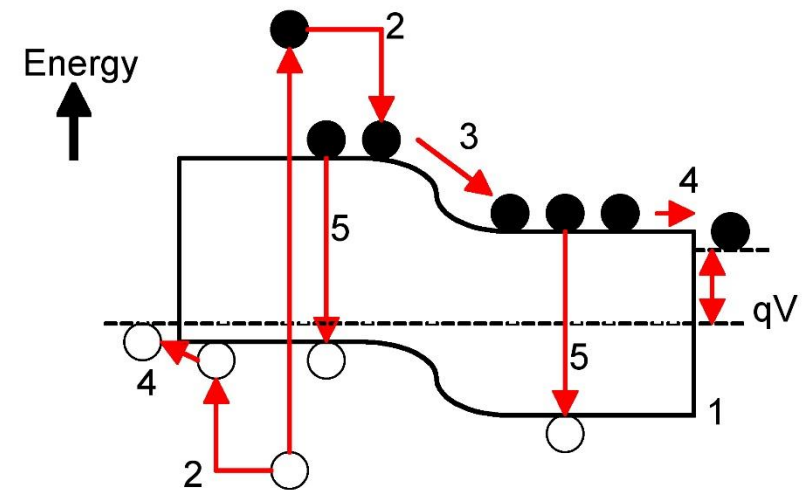
2.6.4 Rekombinationsprozesse

Rolle der Rekombination

Schema einer Solarzelle



Banddiagramm einer Solarzelle



Rekombination (5) reduziert den Photostrom

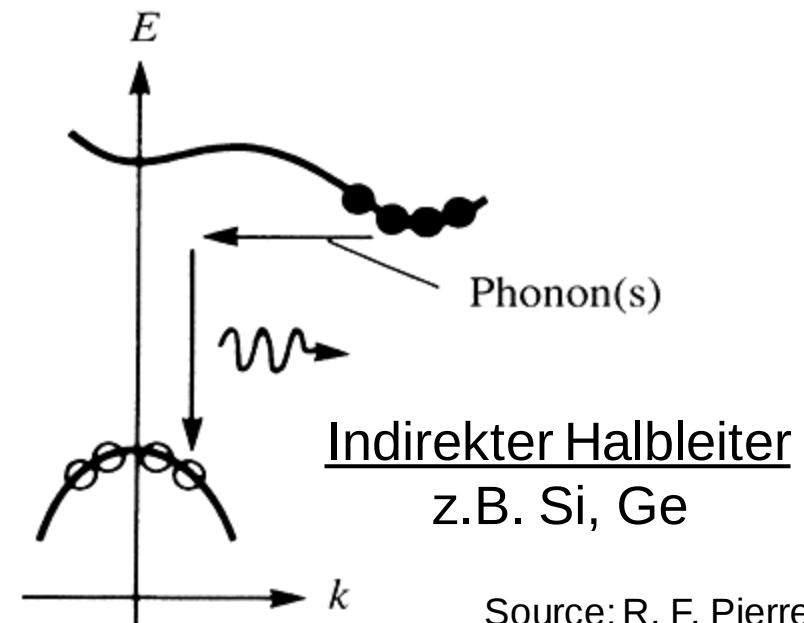
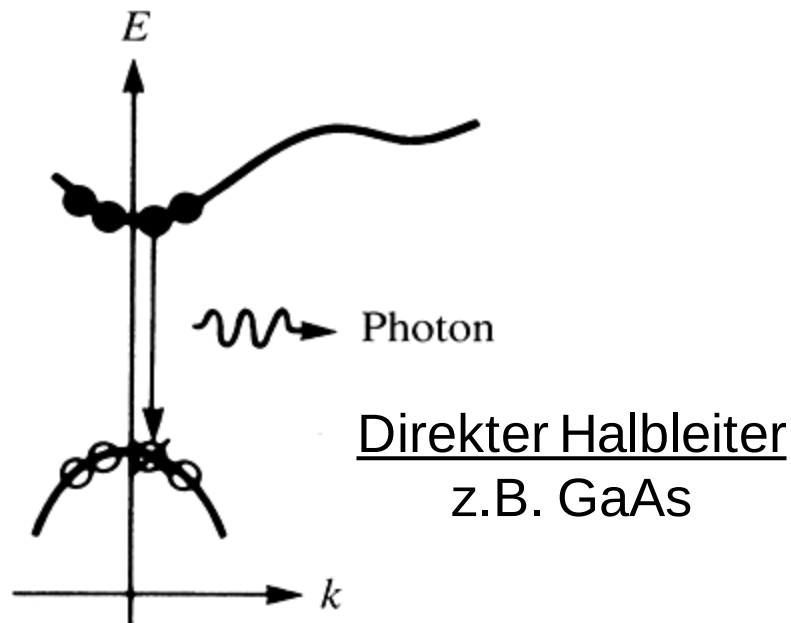
Rekombinationsprozesse

1. Strahlende Rekombination (nicht vermeidbar)
2. Nichtstrahlende Rekombination
 - Auger-Rekombination
 - Shockley-Read-Hall Rekombination
 - Grenzflächen-Rekombination
 - Korngrenzen-Rekombination

Strahlende Rekombination

Photonen haben einen sehr kleinen Impuls k_L . Deshalb finden nur senkrechte Übergänge im E - k -Diagramm mit hoher Wahrscheinlichkeit statt.

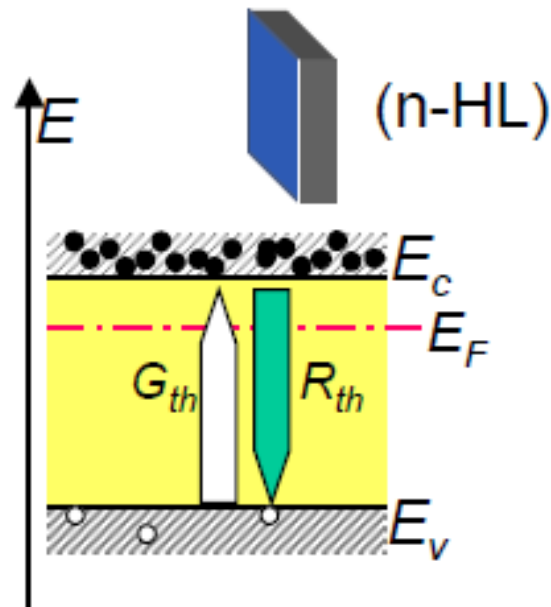
- ⇒ Bei direkten HL liegt die Lebensdauer für strahlende Übergänge im Bereich von Nanosekunden. Sie können als effiziente Lichtquellen verwendet werden (LED, Laser).
- ⇒ Bei indirekten HL kann Lichtemission nur in einem unwahrscheinlichen Dreierstoß (Elektron-Photon-Phonon) stattfinden und die Lebensdauer für strahlende Emission liegt im Millisekundenbereich.



Veranschaulichung der Ratenbilanz: Überschuss-Ladungsträger

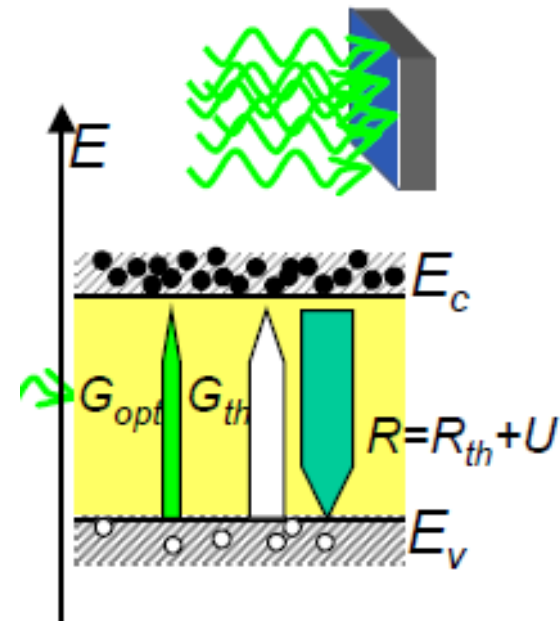
Halbleiter im Dunklen:
thermisches Gleichgewicht

thermische Erzeugung von
Elektron-Loch-Paaren ist
genauso
groß wie die Rekombination



Beleuchteter Halbleiter:
stationäres Nicht-Gleichgewicht

optische Erzeugung G_{opt} von
e-/h+-Paaren addiert sich zu G_{th}



Beschreibung der strahlenden Rekombination

- **Rekombinationsrate von Elektronen und Löchern durch spontane Emission:**

$$r_{opt} = B \cdot n \cdot p \quad \text{--wobei } B: \text{ Rekombinationskoeffizient}$$

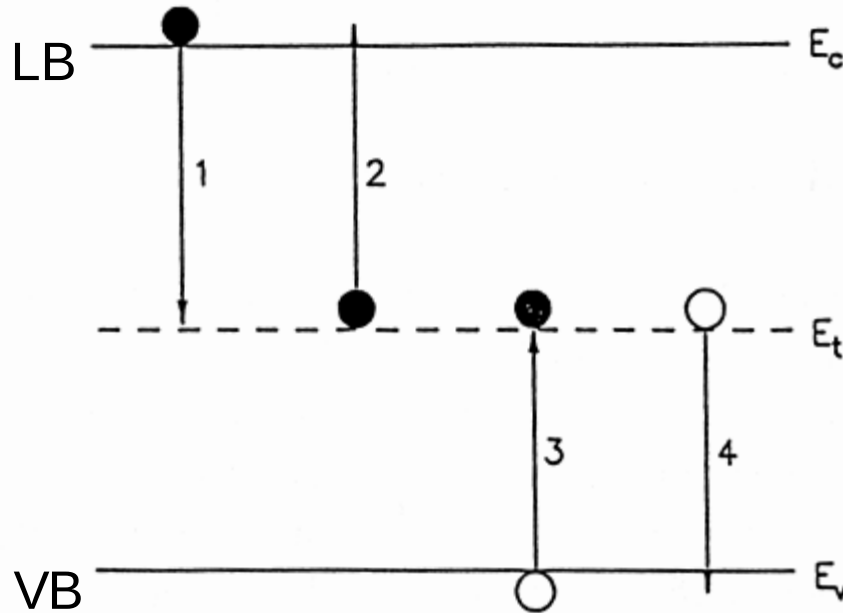
- Die Rekombination steht im thermischen Gleichgewicht mit der Generation durch Absorption der thermischen Hintergrundstrahlung:

$$g_{opt} = r_{opt} = B n_i^2$$

- Sind zusätzliche Photonen oder überschüssige Ladungsträger vorhanden (z.B. durch Bestrahlung) finden zusätzlich stimulierte Emissions- und Absorptionsprozesse statt, die zur Photonendichte proportionale Raten haben.

→ LEDs, Laserdioden

Störstellenrekombination



Störstellenrekombination:
Elektron und Loch werden
in dieselbe Störstelle
eingefangen

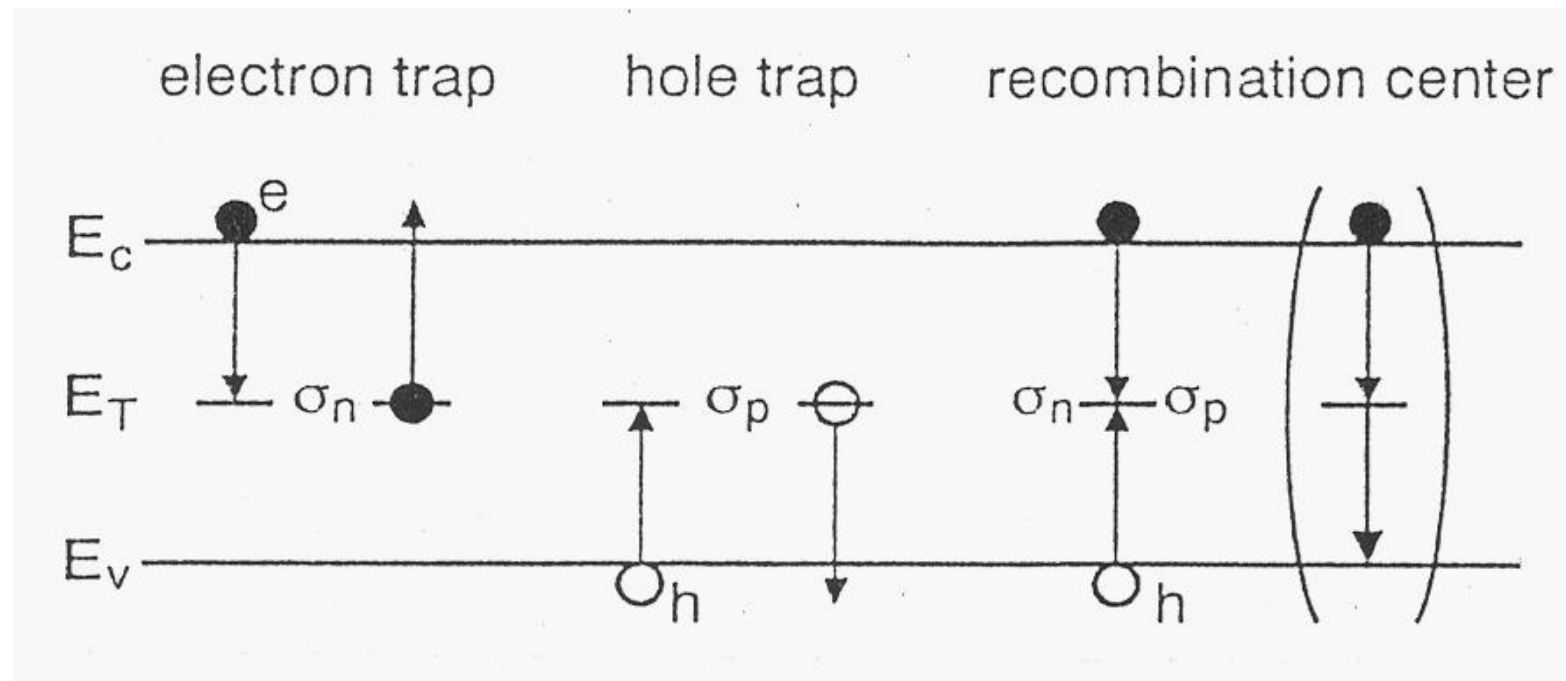
- Shockley-Read-Hall-Rekombination (Betrachtung der aller Raten)

z.B. Einfangprozeß 1:

$$r_{St,e} = N_t \sigma v_{th}$$

N_t : Dichte Trapniveaus
 σ : Einfangquerschnitt
 v_{th} : therm. Geschw.

Störstellen-Rekombination



$$R_{Stör,e} = \underbrace{\sigma_{Stör,e}}_{\text{Einfangquerschnitt}} \cdot \underbrace{v_e}_{\text{Geschw.}} \cdot \underbrace{n_e}_{\text{Dichte der Rekomb. Partner}} \cdot \underbrace{n_{Stör,h}}_{\text{analog für Löcher}}$$

Störstelle kann keine e oder h anhäufen $\rightarrow R_{Stör,e} = R_{Stör,h}$

Rekombinationszentren

akzeptorartig: unbesetzt: elektrisch neutral
 besetzt: negativ geladen

donatorartig: unbesetzt: positiv geladen
 besetzt: elektrisch neutral

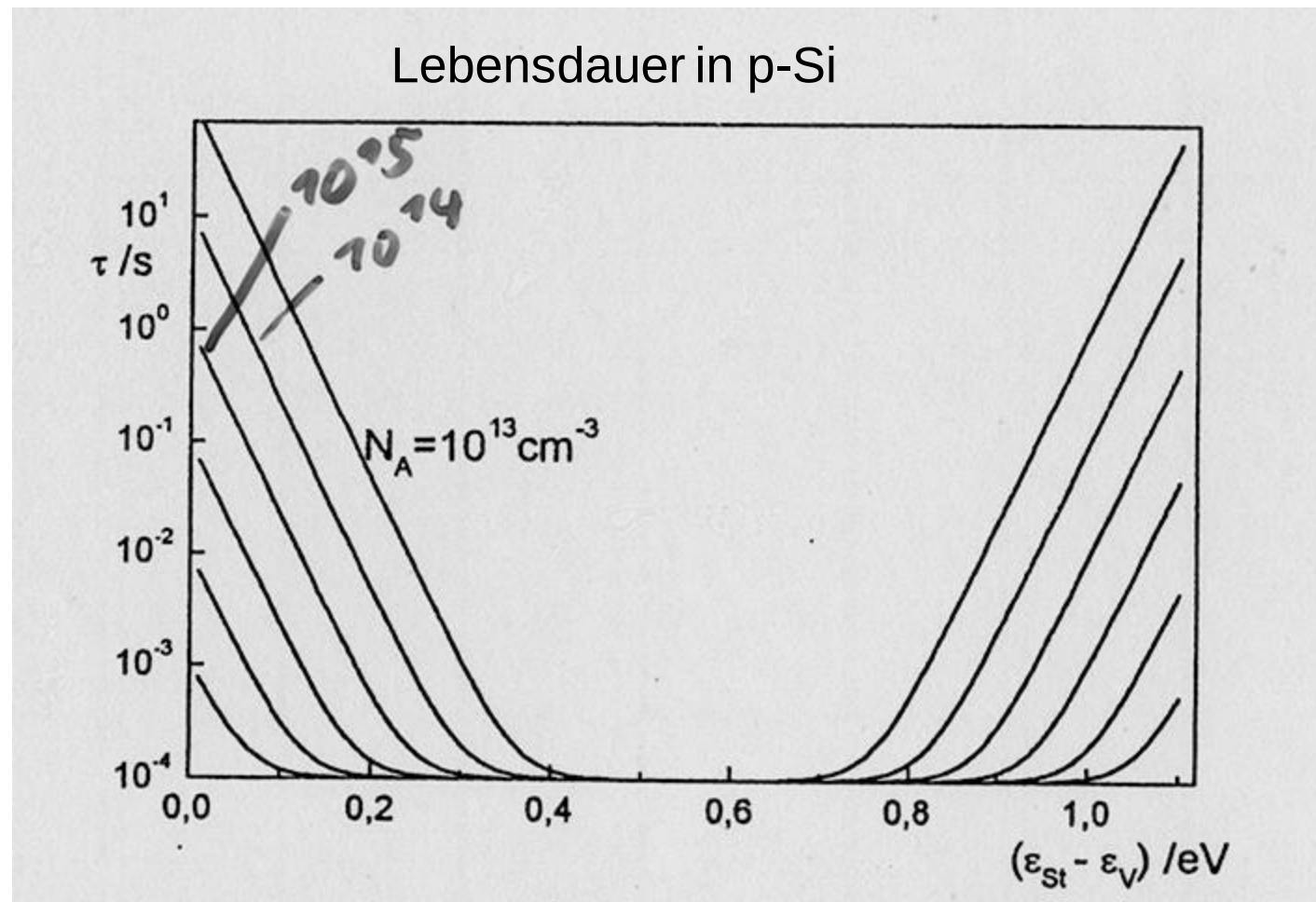
Die Störstellenrekombination über tiefe Störstellen („traps“) mit mehr als 100meV von der Bandkante nennt man auch Shockley-Read-Hall-Rekombination (SRH)

σ_e, σ_h , Einfangquerschnitte (Größenordnung 10^{-15}cm^2)

$\sigma_e \gg \sigma_h$	Elektron trap
$\sigma_e = \sigma_h$	Rekombinationszentrum
$\sigma_e \ll \sigma_h$	Löcher trap

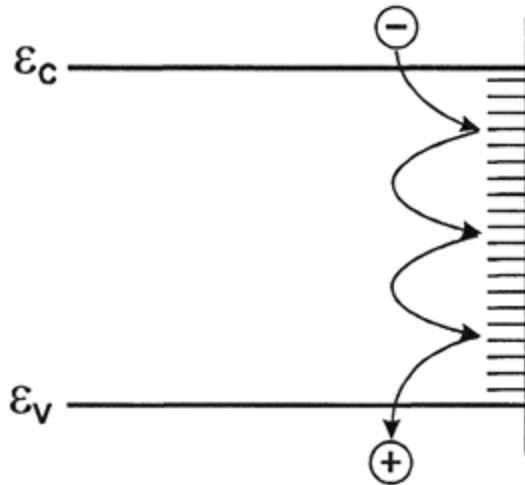
Elektron und Loch „traps“ sind relativ harmlos in Solarzellen
Rekombinationszentren jedoch tödlich! (z.B. Fe, Ni, Au in Si)

Shockley-Read-Hall-Rekombination



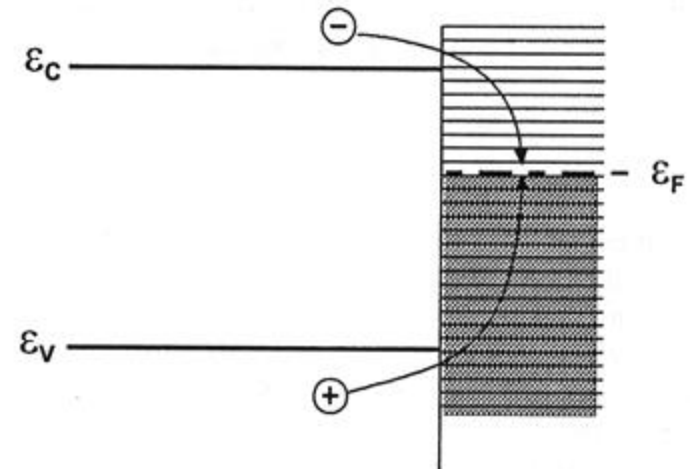
Wenn $\epsilon_{Stör}$ in der Mitte des Bandes $\rightarrow$ schlechterer Fall
 Für eine feste Störstellenenergie wird die Lebensdauer
 größer bei kleinerer Dotierung.

Oberflächenrekombination



Rekombination über kontinuierlich über der Energie verteilte Oberflächenzustände

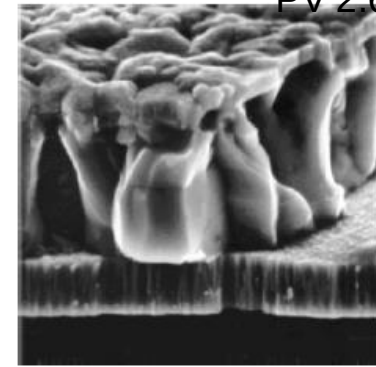
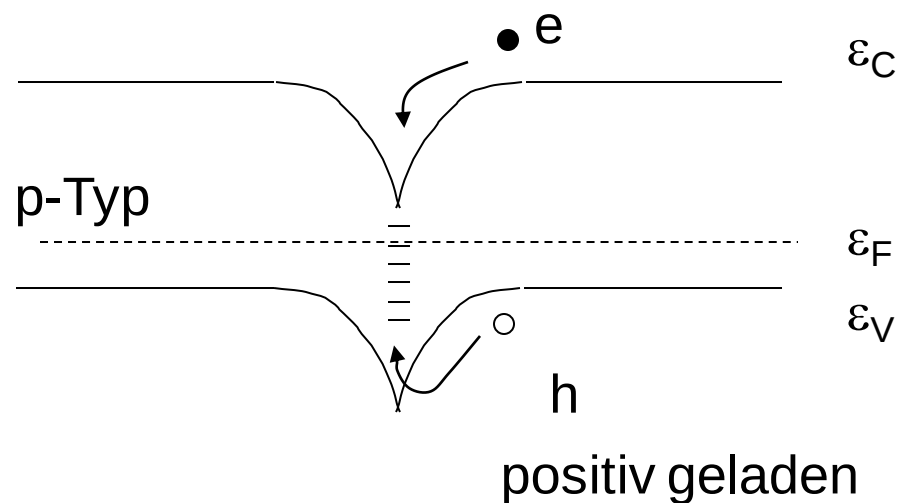
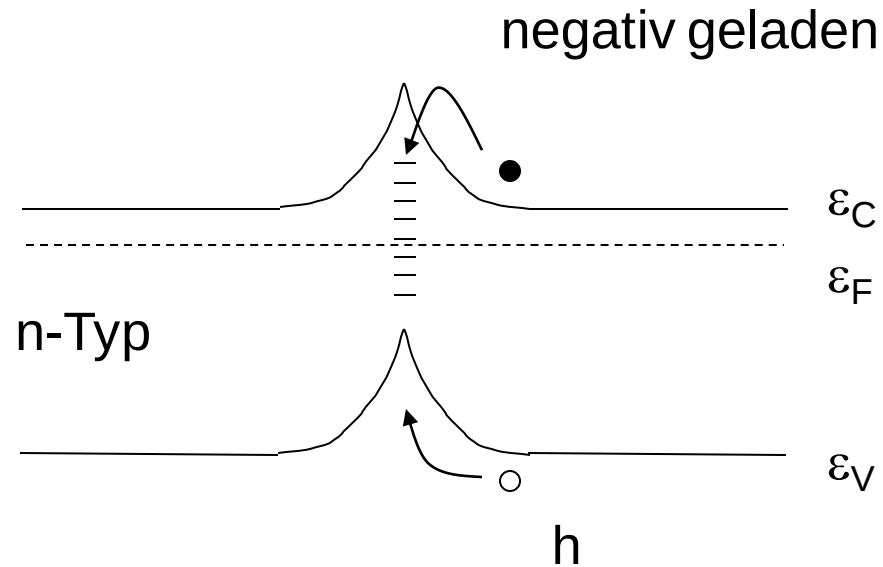
Oberflächenrekombination
über
Oberflächenzustände



Die Zustandsverteilung am Halbleiter - Metall Kontakt hat eine große Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit zur Folge

Oberflächenrekombination
an der
Grenzfläche zum Metall

Korngrenzenrekombination

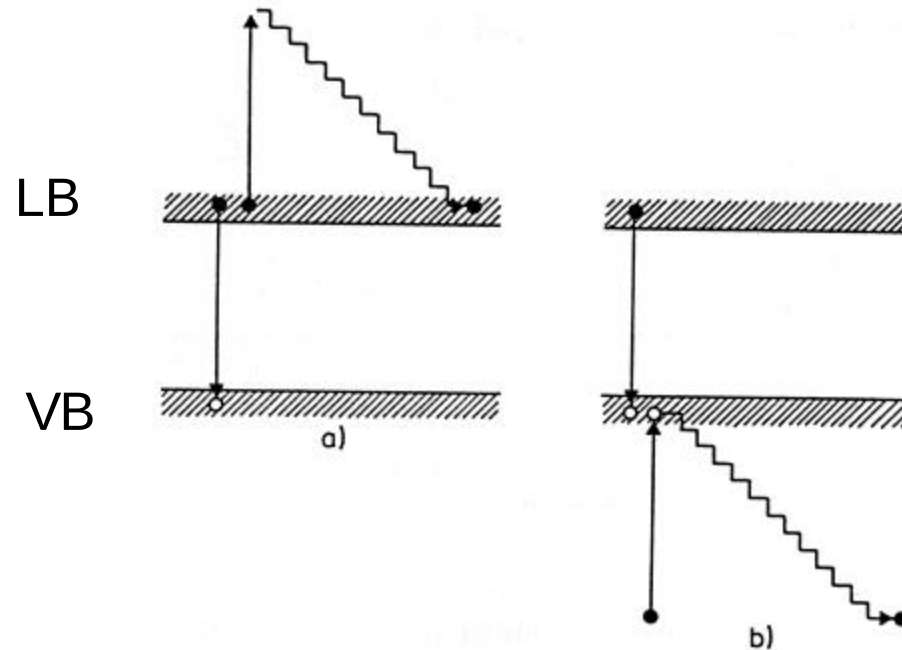


1 μm

geladene Grenzflächenzustände
durch Einfang von Majoritäten

bei Si wichtig bei CIS weniger

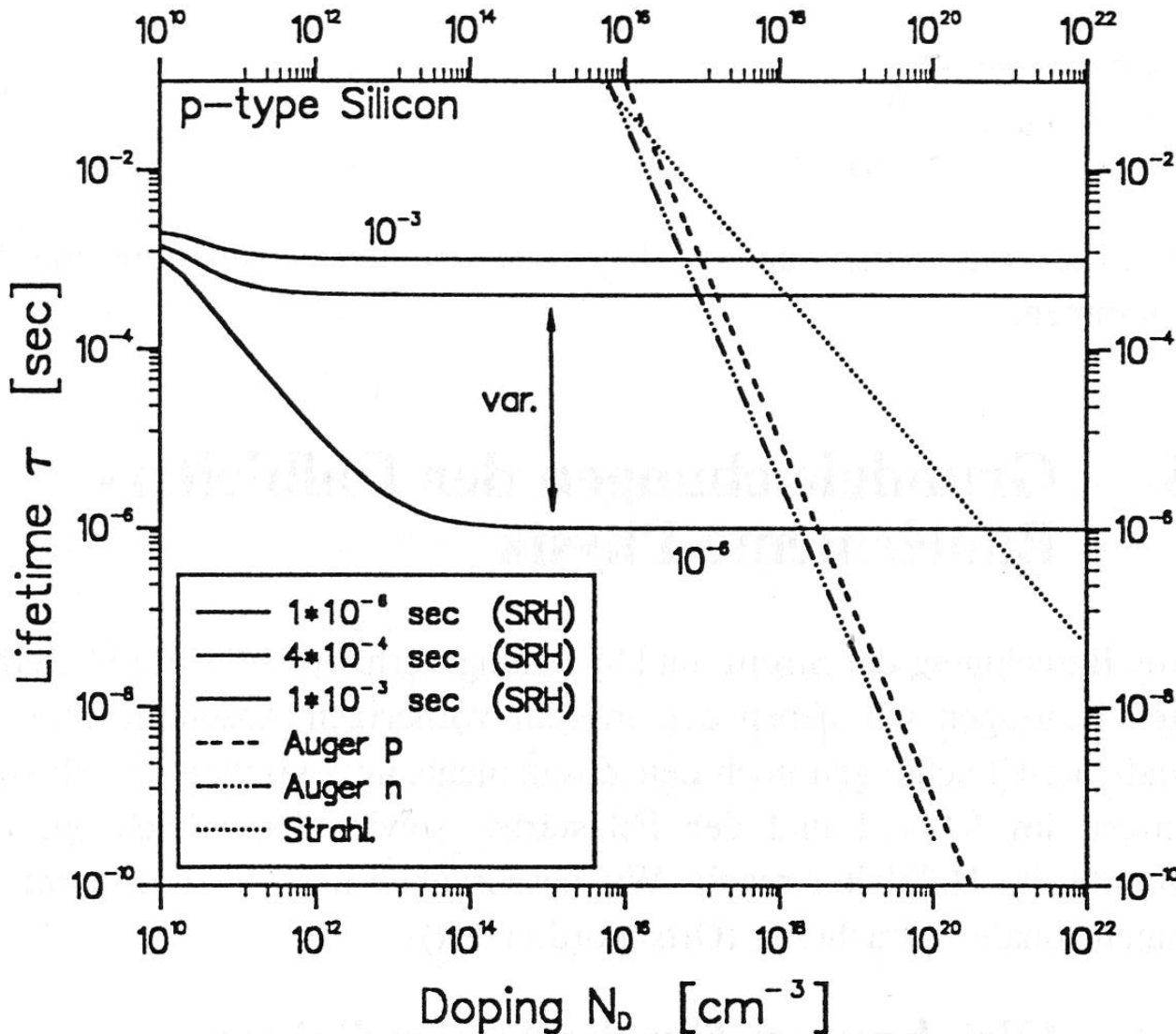
Rekombination: Auger



Augerrekombination: Elektron und Loch rekombinieren und Energie wird von drittem Teilchen aufgenommen

$$r_{\text{Auger}} = r_{\text{Auger, eeh}} + r_{\text{Auger, ehv}} = C_1 n^2 p + C_2 n p^2$$

Dotierungsabhängigkeit der Lebensdauer



Lebensdauer eines
photoangeregten
Elektrons

$$r_{\text{gesamt}} = \frac{1}{\tau_{\text{gesamt}}} =$$

$$r_{\text{opt}} + r_{\text{Auger}} + r_{\text{St}} + \dots$$

Lebensdauer

Bei schwacher Anregung
d.h. Zusatzkonzentration
durch Beleuchtung klein
gegen Majoritätendichte
Im stromlosen Fall aus
Kontinuitätsgleichung

$$\Delta n_e(t) = \Delta n_e(0) e^{\frac{-t}{\tau_e}}$$

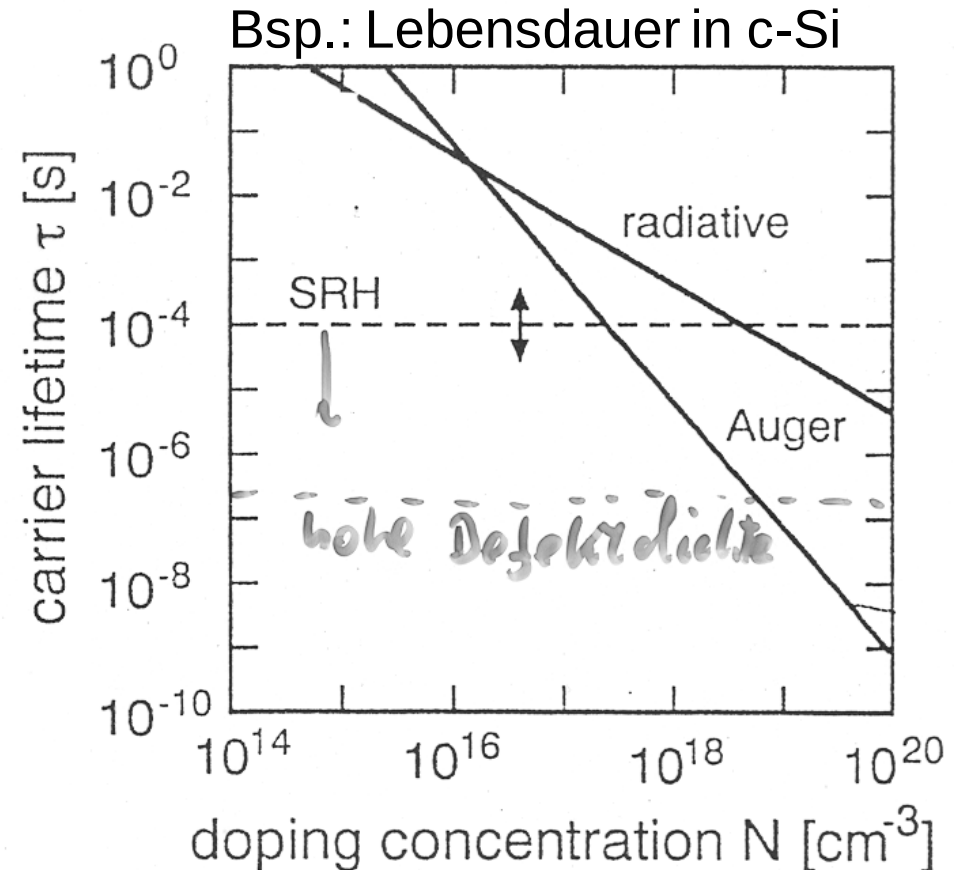
$$\tau_e = \frac{1}{B \cdot n_h^0}$$

$$\Delta R_e = \frac{\Delta n_e}{\tau_e}$$

Bei Änderung:
momentane
Lebensdauer

$$\frac{1}{\tau_e} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}$$

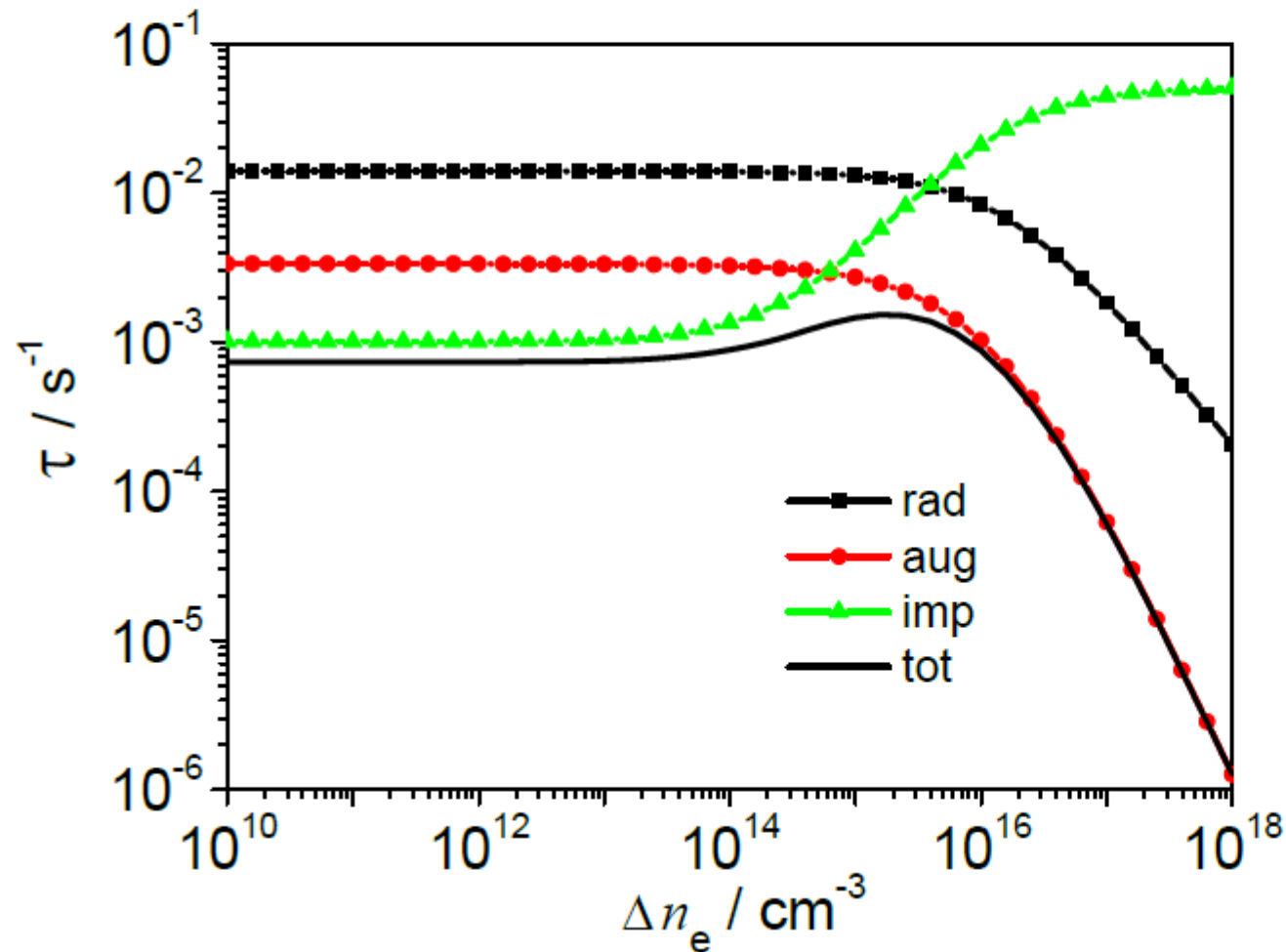
Überlagerungsprinzip gilt generell



Lebensdauer für verschiedene Rekombinationsmechanismen in Si bei verschiedenen Einstrahlungen

Beispiel: p-dotiertes Si

$$\rho = 1 \Omega \text{cm}, n_A \approx 1,5 \times 10^{16} \text{ 1/cm}^3$$



Abschätzung für Überschussladungsträger

Ausgehend von einem Halbleiter mit der intrinsischen Ladungsträgerdichte:

$$n_i = 10^{10} / \text{cm}^3$$

Einer n-Dotierung von: $n_e = 10^{16} / \text{cm}^3$

Ergibt sich: $n_h^0 = 10^4 / \text{cm}^3$ (aus Massenwirkungsgesetz)

Photonenfluss bei AM1.5 (2eV): $P = 10^{17} / \text{cm}^2 / \text{s}$

Annahme für Lebensdauer: $\tau = 10^{-6} \text{ s}$

Absorption der Photonen innerhalb eines Volumens mit der Grundfläche 1 cm^2 und der Tiefe $x = 10 \mu\text{m}$

$$\Delta n_e = \Delta n_h = P \tau / x = 10^{14} / \text{cm}^3$$

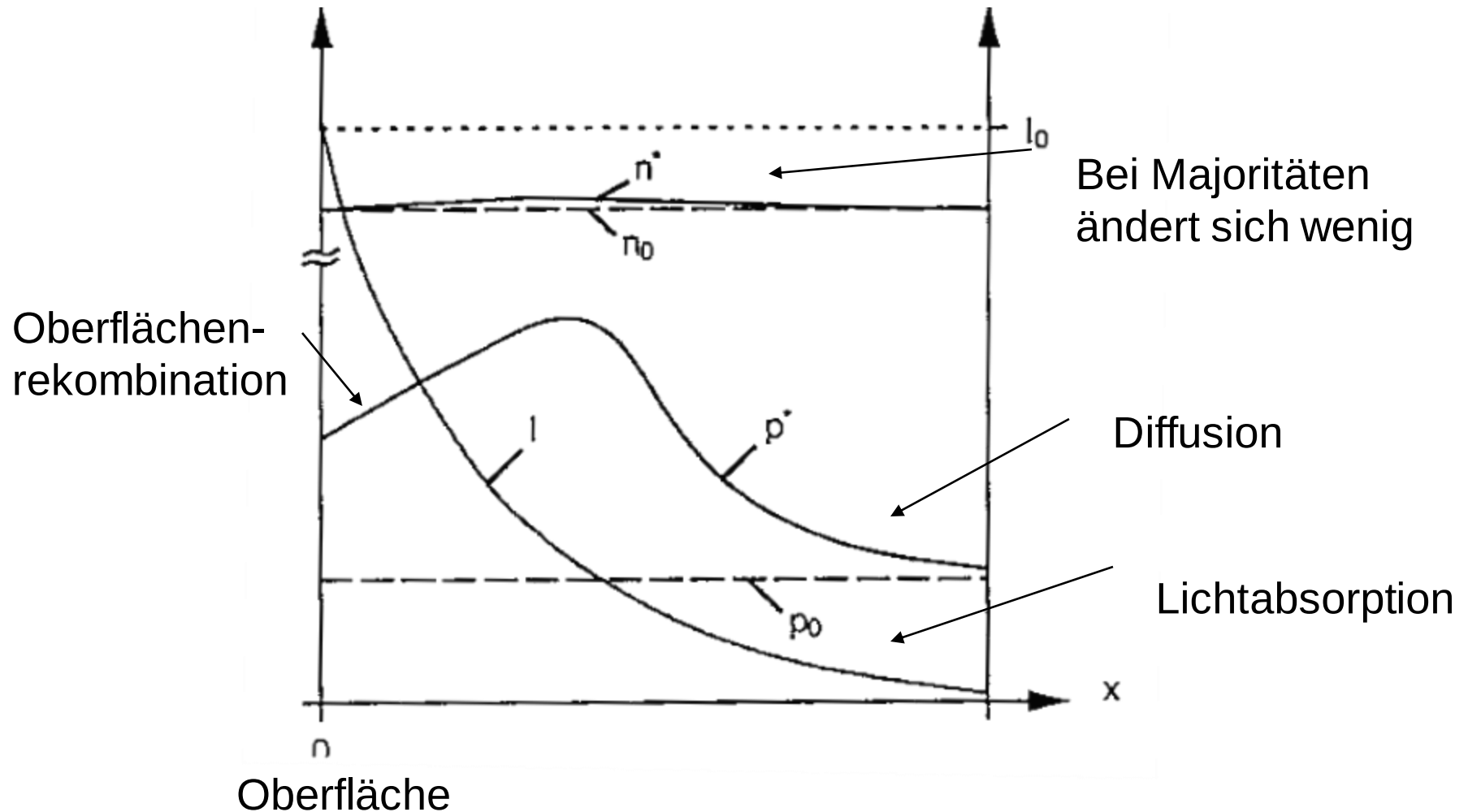
→ Bezogen auf die Majoritäten +1%!!

→ Bezogen auf die Minoritäten + 10 Größenordnungen

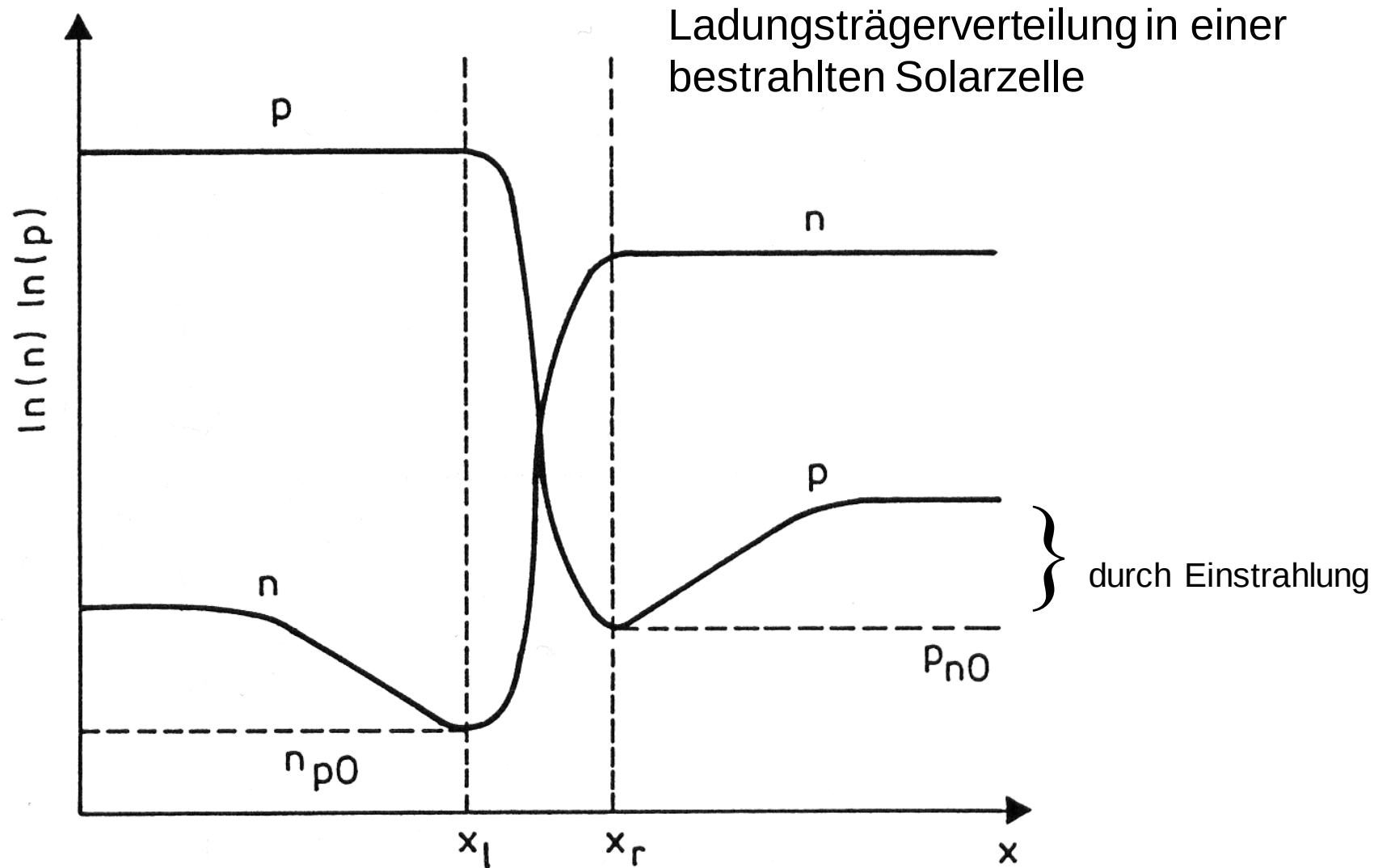
→ Beobachtete Photoeffekte werden durch die Minoritäten bewirkt

Veranschaulichung: Überschussladungsträger

Vergleich des Konzentrationsprofils durch: a) Lichtabsorption b) tatsächlichen Konzentrationsprofil mit und ohne Beleuchtung



Überschusskonzentrationen unter Beleuchtung



Collection Probability

