## 8 Diskussion der Photolumineszenz und Interbandphotoleitung

### 8.1 Ergänzungen und Korrekturen zum bisherigen Energiebandschema des β-rhomboedrischen Bors

Die Photolumineszspektren, die Interbandphotoleitung und die bekannten Absorptionsspektren in der Absorptionskante ermöglichen einen Einblick in die elektronische Struktur innerhalb der Bandlücke des  $\beta$ -rhomboedrischen Bors. Die Kombination der Ergebnisse dieser drei Meßverfahren ergaben die Notwendigkeit für eine Erweiterung und Korrektur des bestehenden Energiebandschemas. Das neu vorgeschlagene Energiebandschema erlaubt eine konsistente Interpretation aller bisherigen experimentellen Ergebnisse.

Das bisherige Energiebandschema birgt eine Inkonsistenz in sich: Im bisherigen Energiebandschema (Abb. 3.6) erfolgt der Ladungstransport bei Zimmertemperatur im oberen Valenzband (VB2) durch Hopping-Leitung. Der Hopping-Charakter des Ladungstransportes ist durch die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit schon lange nachgewiesen [132]. Der optische Übergang aus diesem abgespaltenen Valenzband in das Leitungsband wird aber als indirekt erlaubt charakterisiert. Bei lokalisierten Elektronenzuständen, die bei Hopping-Leitung vorhanden sein müssen, kann eine derartige Wellenvektorauswahlregel für einen optischen Übergang nicht gelten.

Um diese Inkonsistenz des bisherigen Energiebandschemas zu beheben, werden die beiden Absorptionsprozesse, die bisher einer Phononen-Emission und -Absorption beim indirekten Übergang zugeschrieben wurden, im neuen Energiebandschema zwei getrennten lokalisierten elektronischen Zuständen zugeordnet. Die Annahme zweier elektronischer Zustände ermöglicht zugleich die Interpretation der zeitabhängigen Photoleitung als Volumeneffekt und des Zeitverhaltens der Photolumineszenz.

Die Stokes-Verschiebung, die aus dem Lumineszenzspektrum zusammen mit dem bekannten Absorptionsspektrum ermittelt werden kann, erlaubt erstmals eine quantitative Aussage über die Energieverschiebung bei der Relaxation der Zustände in Abhängigkeit von deren Besetzungsgrad. Diese Information stellt eine wesentliche Ergänzung für das bisher bekannte Energiebandschema des  $\beta$ -rhomboedrischen Bors dar.

Im folgenden wird das verbesserte Energiebandschema näher vorgestellt. Im anschließenden Kapitel wird gezeigt, daß im Gegensatz zum alten Energiebandschema dieses neue Energiebandschema alle bisher bekannten experimentellen Ergebnisse konsistent erklären kann.

für das vorgeschlagene Energiebandschema ß-Ausgangspunkt neu des rhomboedrischen Bors ist das bekannte Energiebandschema (Abb. 3.6). Das abgespaltene obere Valenzband im bisherigen Energiebandschema wird, aus den oben genannten Gründen, im neuen Energiebandschema durch zwei dicht benachbarte Störniveaus (S1 und S2) ersetzt. Die Abb. 8.1 zeigt dieses neue Energiebandschema mit den experimentell nachgewiesenen Übergangsenergien. Die Absorptionsprozesse bei etwa 1,3 und 1,2 eV werden den beiden Störniveaus S1 und S2 zugeordnet, die gemäß den neu interpretierten Ergebnissen der Interbandabsorption um  $\approx 100 \text{ meV}$  getrennt sind. Die beobachteten Emissionsenergien (Lumineszenz) wurden den bekannten Absorptionsprozessen zugeordnet. Dabei wurde die Zuordnung so gewählt, daß das Franck-Condon-Modell realistische Gitterrelaxationsfrequenzen ergibt und eine konsistente Interpretation aller Meßergebnisse erlaubt. Aus dieser Zuordnung kann die energetische Relaxation der Zustände durch die Besetzung mit einem Elektron abgelesen werden.

Werheit et al. [62] vermuten für alle 6 Trapzustände einen einheitlichen Bildungsmechanismus. Für die Trap-Zustände müßten dann auch gleichartige Relaxationsenergien gelten. Die am 6. Trap ermittelte Relaxationsenergie von etwa 0,34 eV wurde daher auch auf die verbleibenden 5 Trap-Zustände übertragen. Die zu erwartenden Emissionsenergien liegen leider außerhalb des apparativ zugänglichen Meßbereichs. Diese Extrapolation läßt aber darauf schließen, daß das 1. und 2. Trap im unbesetzten Zustand in das Leitungsband relaxiert. Eine Besetzung des 1. und 2. Traps ist nach diesem Modell nur über das Leitungsband möglich, in Übereinstimmung mit Schlußfolgerungen aus zahlreichen früheren experimentellen Ergebnissen.

Bei Temperaturen unter 200 K wird die strahlende Rekombination zum dominierenden Rekombinationsmechanismus. Da kein optischer Übergang aus dem Valenzband oder den vorgelagerten Störniveaus S1 und S2 in einen der Trap-Zustände beobachtet wird, wird dieser Übergang als optisch verboten angenommen. Die strahlende Rekombination muß folglich von der Leitungsbandkante aus erfolgen.

Oberhalb 200 K erfolgt die Rekombination bevorzugt nichtstrahlend. Aus der Temperaturabhängigkeit der Photoleitung konnte geschlußfolgert werden, daß der nichtstrahlende Rekombinationsweg über die Trap-Niveaus und die Störbänder erfolgt. Eine direkte Rekombination zwischen Valenz- und Leitungsband kann zumindest bei Temperaturen oberhalb 250 K weitgehend ausgeschlossen werden. Aus der Abnahme der Photolumineszenz mit steigender Temperatur wurde für die nichtstrahlende Rekombination eine Aktivierungsenergie von  $\approx 120$  meV abgeleitet (Kapitel 6.5). Im Energiebandschema (Abb.



**Abb. 8.1:** Erweitertes Energiebandschema des  $\beta$ -rhomboedrischen Bors mit nachgewiesenen optischen Übergängen. Alle Energieangaben in eV in bezug auf Leitungsbandunterkante, bei zwei Energieangaben wurde der Wert polarisationsabhängig gemessen (1.Wert: E // c, 2.Wert:  $E \perp c$ ), ein ausgezogener Strich beschreibt ein besetztes Niveau (nach Gitterrelaxation), eine gestrichelte Linie ein unbesetztes Niveau (vor Gitterrelaxation), ein Fragezeichen entspricht einem postulierten, aber bisher nicht gemessenen Übergang. Die Angaben für die Absorptionsenergien wurden [83] entnommen, die Emissionsenergien kommen aus dieser Arbeit.

8.1) erkennt man, daß ein besetzter Trap-Zustand durch eine Potentialbarriere von  $\approx 130...140$  meV vom nächsttieferen unbesetzten Trap-Zustand getrennt wird. Die relativ gute Koinzidenz beider Werte kann zufällig sein, legt aber die Vermutung nahe, daß die strahlungslose Rekombination kaskadenartig über die einzelnen Trap-Zustände erfolgt. Für Elektronen im 1. Trap-Niveau fällt allerdings praktisch eine entsprechende thermische Anregung mit einer Wiederanregung in das Leitungsband zusammen.

Offenbar ist die Energieseparation zwischen einem besetzten und unbesetzen Trap-Zustand sehr groß (≈ 336 meV). Hopping-Leitung zwischen den Trap-Zuständen kann damit in Übereinstimmung mit früheren Ergebnissen weitgehend ausgeschlossen werden.

Die Störzustände S1 und S2 werden zur besseren Übersicht im Energieschema als diskrete Energieniveaus dargestellt. Durch ihre hohe Dichte ( $\approx 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>) sind sie aber in Wirklichkeit energetisch bandartig verbreitert. Die Störzustände S1 und S2 zeigen wie die Trap-Zustände eine starke Elektron-Phonon-Kopplung. Die Ursache dieser Störbänder wird in den intrinsischen Strukturstörungen des  $\beta$ -rhomboedrischen Bors, vorrangig in der hohen Dichte unbesetzter Atompositionen, gesehen. Gestützt wird diese Annahme auch durch die Ergebnisse der Photolumineszenzuntersuchung. Die Auswertung der Lumineszenzspektren (Kapitel 6.4) ergaben für den Übergang in das Störniveau S2 eine Gitterrelaxationsfrequenz, die einer Schwingungsmode des B15-Atoms (zentrales Boratom) entspricht. Das B15-Atom ist aber ein nächster Nachbar der zu 25% vakanten B13-Position (siehe auch Kapitel 2.3).

Aus der Temperaturabhängigkeit der Absoptionsspektren (siehe Abb. 8.2 im folgenden Kapitel) muß geschlußfolgert werden, daß der Störzustand S1 weitgehend besetzt ist. Der Zustand S2 wird hingegen als unbesetzt oder nur geringfügig besetzt angesehen.

Da die energetische Separation zwischen einem besetzten und einem unbesetzten S1-Zustand etwa 150 meV beträgt, ist eine Hopping-Leitung innerhalb des Störbandes S1 auch bei genügend freien Zuständen wenig wahrscheinlich.

Ein besetzter S2-Zustand ist aber etwa nur 20...60 meV von einem unbesetzten S1-Zustand getrennt. Diese energetische Überlappung zwischen unbesetzten S1-Zuständen und besetzten S2-Zuständen könnte Hoppingleitung erlauben. Bei einer Anregung von Elektronen (thermisch oder optisch) aus dem S1-Zustand in den S2-Zustände gegenüber. Unter diesen Bedingungen sollte eine Hoppingleitung möglich sein, wobei für die Hopping-Beweglichkeit eine thermische Aktivierung entsprechend dem energetischen Abstand der Niveaus von etwa 20...60 meV zu erwarten wäre. Die stationäre Photoleitung zeigte unterhalb 250 K eine Aktivierungsenergie von etwa 20 meV (Abb. 7.4); dies ist mit der neuen Interpretation konsistent.

Da die optischen Absorptionsprozesse, die einer Anregung von Elektronen aus den S1und S2-Niveaus in das Leitungsband zugeordnet wurden, polarisationsabhängig sind, kann eine Anisotropie des Hopping-Mechanismus nicht ausgeschlossen werden.

# 8.2 Vergleich des alten und neuen Energiebandschemas anhand experimenteller Ergebnisse

In diesem Kapitel werden das alte und das neue Energiebandschema mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Dies soll demonstrieren, daß das neue Energiebandschema in der Lage ist, sowohl die experimentellen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit zu erklären als auch kompatibel zu den früheren Meßergebnissen ist.

### a) Energieabhängigkeit der Absorptionsprozesse bei 1,2 eV und 1,3 eV:

Das alte Energiebandschema erklärt diese Absorptionsprozesse durch einen indirekt erlaubten Bandübergang, wobei ein Phonon mit der Energie von  $E_{Phonon} \approx 56$  meV am Übergang beteiligt ist [83]. Der spektrale Verlauf der Absorptionskonstanten  $\alpha$  beträgt demnach:

**Gl. 8.1** 
$$\alpha \propto \frac{(\hbar\omega \pm E_{Phonon} - E_g)^2}{\hbar\omega}$$

Dabei ist  $E_{\text{Phonon}}$  die Energie des beteiligten Phonons,  $E_{\text{g}}$  der Bandabstand und  $\omega$  die Frequenz des anregenden Lichtes.

Im neuen Energiebandschema wird diese Absorption zwei Bändern (Störbänder) aus lokalisierten Zuständen zugeordnet. Der optische Übergang ist folglich ein *nicht-direkter Übergang*. Für jedes der Bänder erhält man einen Absorptionsprozeß mit der spektralen Verteilung [133]:

Gl. 8.2 
$$\alpha \propto \frac{(\hbar\omega - E_g)^2}{\hbar\omega}.$$

Nichtdirekter und indirekter Übergang weisen also die gleiche Energieabhängigkeit der Absorption auf. Der spektrale Verlauf des Absorptionsspektrums des  $\beta$ -rhomboedrischen Bors kann damit auch durch das neue Energiebandschema konsistent beschrieben werden. Der Vorteil des neuen Energiebandschemas besteht darin, daß es zwanglos die beobachtete Hopping-Leitung im Band erklärt, während das alte Energiebandschema delokalisierte Bandzustände annimmt, in denen gewöhnliche Bandleitung auftreten müßte.

### b) Die Temperaturabhängigkeit der Absorptionsprozesse bei 1,2 und 1,3 eV:

Nach dem alten Energiebandschema wurde die Temperaturabhängigkeit der beiden Absorptionsprozesse gemäß den Gesetzmäßigkeiten indirekter Bandübergänge durch die Emissions- und Absorptionswahrscheinlichkeit für das beteiligte Phonon erklärt.

Im neuen Energiebandschema wird das untere Störniveau S1 als vollständig besetzt angenommen. Anregungen aus diesem Niveau sollten daher weitgehend temperaturunabhängig sein. Das obere Störniveau S2 hingegen ist bei tiefen Temperaturen nur schwach besetzt. Hier sollte eine thermisch aktivierte Zunahme der Absorption auftreten, wobei die Aktivierungsenergie die Differenz beider Niveaus von etwa 100 meV beträgt.

Die Abb. 8.2 zeigt die gemessene Absorption aufgetragen gegen die Temperatur zusammen mit den theoretischen Vorhersagen beider Modelle. Beide Modelle beschreiben das Verhalten qualitativ richtig. Das Modell für den indirekten Übergang verlangt aber bei höheren Temperaturen für den Prozeß mit Phononenemission eine deutlich stärkere Zunahme der Absorption, die nicht beobachtet wird. Umgekehrt sollte bei tiefen Temperaturen der Prozeß mit Phononenabsorption wesentlich stärker abgeschwächt werden, als beobachtet wurde.

Das neue Modell kann dagegen über den gesamten Temperaturbereich beide Prozesse richtig beschreiben. Das tieferliegende Störniveau ist vollständig besetzt und ändert seine Besetzungsdichte nur unwesentlich. Das Störniveau S2 hingegen wird thermisch mit einer Aktivierungsenergie von 100 meV besetzt, die dem energetischen Abstand beider Niveaus entspricht. Bei tieferen Temperaturen bleibt das Niveau offenbar geringfügig besetzt. Eine stark verzögerte Einstellung des thermischen Gleichgewichtes bei tiefen Temperaturen könnte die Ursache für die Restbesetzung des Störniveaus S2 sein. Die Abnahme der Absorptionsstärke bei tiefen Temperaturen nach 3 Stunden deutet auf ein thermisches Nichtgleichgewicht hin.



**Abb. 8.2:** Temperaturabhängigkeit der Absorptionsstärke der Absorptionsprozesse bei 1,2eV und 1,3 eV am  $\beta$ -rhomboedrischen Bor (entnommen aus [134]) im Vergleich zu Modellberechnungen für einen indirekten Bandübergang und einen nicht-direkten Bandübergang mit thermisch generierter Besetzung der Zustände

## c) Temperaturabhängige Energieverschiebung der Absorptionsprozesse bei 1,2 eV und 1,3 eV:

Die Einsatzkante der Absorptionsprozesse bei 1,2 eV und 1,3 eV verschiebt sich bei höheren Temperaturen zu kleineren Werten. Im alten Modell wurde dies als Temperaturabhängigkeit des Bandabstandes interpretiert. Für die Temperaturabhängigkeit des Bandabstandes gilt: [135, 136]

Gl. 8.3 
$$E(T) = E_g(0) - \beta \frac{E_{Phonon}}{\exp\left(\frac{E_{Phonon}}{k_B T}\right) - 1},$$

mit  $E_{\text{phonon}}$ : Energie des beteiligten Phonons,  $E_{g}(0)$ : Bandabstand bei 0K und  $\beta$ : theoretischer Modellparameter. Mit dieser Gleichung konnten die Meßwerte gut beschrieben werden [83].

Im neuen Modell wird die Verschiebung der Einsatzkante der Absorptionprozesse durch eine Aufweitung der Absorption infolge der starken Elektronen-Phonon-Kopplung beschrieben. Nach dem halbklassischen Franck-Condon Modell erwartet man gemäß der Gl. 6.11:

**GI. 8.4** 
$$E(T) = E(0) - \sigma_0 \left[ \sqrt{\operatorname{coth} \left( \frac{E_{Phonon}}{2k_B T} \right) - 1} \right].$$

 $\sigma_0$  ist die Halbwertsbreite der Absorptionsbande bei tiefen Temperaturen. Bei einer Anregung



**Abb. 8.3:** Einsatzkante der Absorptionsprozesse bei 1,2 eV und 1,3 eV in Abhängigkeit von der Temperatur für zwei verschiedene Polarisationen nach [83]; Das Modell beschreibt die zu erwartende Verschiebung nach dem Franck-Condon-Prinzip (Gl. 8.4).

in Kontinuumszustände kann  $\sigma_0$  große Werte annehmen. Wie aus der Abb. 8.3 zu erkennen ist, kann auch mit diesem Modell die gemessene temperaturabhängige Verschiebung der Einsatzkante für den Absorptionsprozeß sehr gut beschrieben werden.

### d) Photoinduzierte ESR:

Wie bereits bei den Grundlagen (Kapitel 3.3.2) erwähnt wurde, zeigt  $\beta$ -rhomboedrisches Bor einen stark ausgeprägten Photo-ESR-Effekt. Das ESR-Signal ist streng mit der Photoleitfähigkeit korreliert. Geist [90] erklärt diesen Effekt durch ein schmales Störband aus neutralen Donator- und Akzeptorzuständen, zwischen denen Hoppingleitung möglich ist. Als Quelle für das ESR-Signal sieht er einfach positiv ionisierte Donatoren. Durch optische Anregung können die Donatoren entsprechend ionisiert werden. Das Modell von Geist kann direkt auf das neue Energiebandschema übertragen werden. Die Donatorzustände entsprächen den S1-Zuständen und die Akzeptorzustände den S2-Zuständen. Die Ergebnisse der Photo-ESR lassen sich damit zwanglos im neuen Energiebandschema interpretieren.

#### e) Ladungsträgerdiffusion:

Die Ladungsträgerdiffusion im  $\beta$ -rhomboedrischen Bor ist von Werheit et al. [131] bei Zimmertemperatur untersucht worden. Ein anomaler Photoeffekt bei der Löcherdiffusion (Abnahme der Leitfähigkeit unter Beleuchtung) wurde im Bild des alten Energiebandschemas erklärt: Optisch generierte Löcher im Valenzband werden durch ein äußeres Feld in das Volumen der Probe getrieben. Die Löcher werden durch Elektronen im oberen Valenzband getrappt. Dadurch verringert sich die Konzentration an Elektronen im oberen Valenzband und die Leitfähigkeit, bei Zimmertemperatur im wesentlichen vom oberen Valenzband getragen, wird solange geringer, bis im unteren Valenzband eine ausreichende Löcherkonzentration vorhanden ist, die die Leitfähigkeit wieder zunehmen läßt. Aus der gemessenen zeitlichen Ausbreitung der Ladungsträger ins Volumen ergab sich, daß die Beweglichkeit im oberen Valenzband sehr klein sein muß.

Das neue Energiebandschema erlaubt die Erklärung der Driftexperimente auf analoge Weise. Die geringe Beweglichkeit im Störband ergibt sich zwanglos aus dem lokalisierten Charakter der elektronischen Zustände (Hopping-Leitung). Bei Zimmertemperatur stehen das Störniveau S1 und S2 im ausreichendem thermischen Austausch. Eine Verringerung der Elektronenkonzentration im Niveau S1 zieht zwangsweise eine entsprechende Verringerung im Niveau S2 mit sich, und die Leitfähigkeit durch Hopping-Prozesse wird geringer.

### f) Zeitabhängigkeit der Photolumineszenz und Photoleitung:

In dieser Arbeit wurde erstmals das Langzeitverhalten der Photolumineszenz untersucht. In der Abb. 8.4 ist die Lumineszenzintensität gegen die Zeit aufgetragen. Zum Vergleich wurde unter gleicher Zeitskala die Photoleitfähigkeit dargestellt. Man erkennt ein sehr komplementäres Zeitverhalten von Photolumineszenz und Photoleitung. Während die Photoleitfähigkeit mit der Zeit nach dem Einschalten der Laserbeleuchtung zunimmt, baut sich die Lumineszenzintensität ab. Die Ähnlichkeit im Zeitverhalten legt die Vermutung nahe, daß Photoleitung und Photolumineszenz gekoppelt sind.

Im Rahmen des bisherigen Energiebandschemas ist eine Interpretation dieses Verhaltens schwierig. Die starke Lumineszenz bei  $\approx$  1eV müßte einem Übergang in das obere Valenzband zugeordnet werden. Energetisch wäre auch eine Zuordnung zum 6. Trap möglich, doch würde sich aus dem Franck-Condon-Modell eine unwahrscheinlich große Phononenfrequenz von  $\approx$  3000 cm<sup>-1</sup> für die Gitterrelaxation ergeben, die diese Erklärung ausschließt. Die abnehmende Photolumineszenz müßte mit einem zunehmenden Mangel an freien Zuständen im oberen Valenzband unrealistisch scheint. Dies ergibt aber einen Widerspruch: Durch die optische Anregung werden Elektronen aus dem Valenzband in die Trapzustände umgelagert. Die Elektronenkonzentration im oberen Valenzbant mit einem Valenzband kann also durch die Beleuchtung nur geringer werden und die Photolumineszenz müßte im Widerspruch zum Experiment mit wachsender Zeit zunehmen.

Auch das Zeitverhalten der Photoleitung bei tiefen Temperaturen läßt sich mit dem bisherigen Energiebandschema nur schwer erklären. Zwar wäre eine Zunahme der Photoleitung durch eine Verringerung der Elektronenkonzentration im oberen Valenzband und der damit verbundenen Schaffung freier Zustände denkbar, doch sollte die Photoleitung dann schnell nach dem Einschalten der Beleuchtung zunehmen. Im Experiment findet man aber eine Verzögerung bis zu 10 s, ehe ein deutlicher Photoeffekt auftritt. Eine Erklärung dieses Verhaltens ist im Rahmen des alten Energiebandschemas nur unter Annahme von Diffusionseffekten möglich. Die quantitativen Abschätzungen im Kapitel 7.5 zeigten jedoch, daß die beobachtete Verzögerung im wesentlichen nicht durch Diffusion erklärt werden kann (vgl. Kapitel 7.5).



**Abb. 8.4:** Normierte Photoleitfähigkeit und Lumineszenzintensität von  $\beta$ -rhomboedrischemBor bei 90K gegenüber der Zeit seit Einschalten der Laserbeleuchtung

Das neue Energiebandschema kann beide Prozesse zwanglos erklären. Zunächst werden Ladungsträger aus dem voll besetztem S1-Niveau und dem Valenzband in das Leitungsband angeregt. Die Löcher aus dem Valenzband werden sehr schnell von besetzten S1-Zuständen eingefangen und können somit nicht zur Leitfähigkeit beitragen. Unbesetzte S1-Zustände relaxieren um etwa 150 meV im Energieschema nach oben und machen eine Hoppingleitung auch im teilweise unbesetzten S1-Band unwahrscheinlich. Die optisch generierten Elektronen im Leitungsband hingegen werden sofort von freien Trap-Zuständen eingefangen. Daher nimmt zunächst trotz Beleuchtung die Leitfähigkeit nur unwesentlich zu. Mit zunehmender Auffüllung der Trap-Zustände steigt die Wahrscheinlichkeit für einen strahlenden Übergang vom Leitungsband in das zunächst unbesetzte S2-Niveau, der zu dem starken Lumineszenzprozeß bei etwa 1 eV führt. Die Elektronen im S2-Zustand können nun aber zusammen mit den unbesetzten S1-Zuständen eine Hoppingleitung ausführen. Erst jetzt setzt eine deutliche Zunahme der Photoleitung ein. Mit der Auffüllung des S2-Zustandes nimmt die Photoleitung zu, zugleich verringert sich aber die Lumineszenz wegen der abnehmenden Dichte an freien Zuständen im S2-Niveau. Dies erklärt das zeitlich korrelierte Verhalten zwischen der abnehmenden Photolumineszenz und der zunehmenden Photoleitung. Zugleich ergibt sich aus diesem Schema das verzögerte Einsetzen der Photoleitung bei tiefen Temperaturen als Volumeneffekt. Eine einfache Modellrechnung hat bestätigt, daß das nach diesem Mechanismus zu erwartende Zeitverhalten der Photoleitfähigkeit mit dem beobachteten Verhalten gut übereinstimmt (siehe Abb. 7.5 und Kapitel 7.5).

Diffusionseffekte bei der gemessenen Photoleitung können zwar nicht völlig ausgeschlossen werden, sie werden aber nur als zusätzliche Störung angesehen.

### g) Temperaturabhängige Erholung der Lumineszenz:

Die Intensitätsabnahme der Photolumineszenz konnte durch eine Ausheizphase im Dunkeln rückgängig gemacht werden (vergl. Kapitel 6.6). In der Abb. 6.12 ist dargestellt, wie sich die Photolumineszenz in Abhängigkeit von der Temperatur in der Ausheizphase erholt. Für den Temperaturbereich 150...200 K wurde eine Aktivierungsenergie von 60 meV gefunden. Im neu vorgeschlagenen Energiebandschema entspricht dies etwa der Energiedifferenz zwischen einem besetzten S2- und einem unbesetzten S1-Zustand (20...60 meV). Der S2-Zustand wird folglich thermisch entleert, und dies führt zu der beobachteten Steigerung der Lumineszenzintensität. Oberhalb 200K tritt hingegen wiederum eine deutliche Abnahme der Ausheizwirkung auf. Für diesen Prozeß konnte grob eine Aktivierungsenergie von  $\approx 130$  meV ermittelt werden. Im Bild des neuen Energiebandschemas entspricht dies einer thermisch aktivierten Entleerung der weitgehend besetzten Trapzustände, denn bei einer kaskadenartigen Entleerung der einzelnen Trap-Zustände in das S2-Niveau sind Potentialbarrierren von 100...140 meV zu überwinden.

Das neue Energiebandschema erklärt auch, weshalb eine optische Regenerierung der Lumineszenzfähigkeit durch Beleuchten mit langwelligem Licht ( $E_{photon} < 1,1 \text{ eV}$ ) nicht möglich war: Da der optische Übergang in Trap-Niveaus offenbar optisch verboten ist, wäre für eine optische Entleerung eine Anregung in das Leitungsband erforderlich. Diese erfordert aber eine Photonenenergie von mindestens 1,23...1,27 eV.