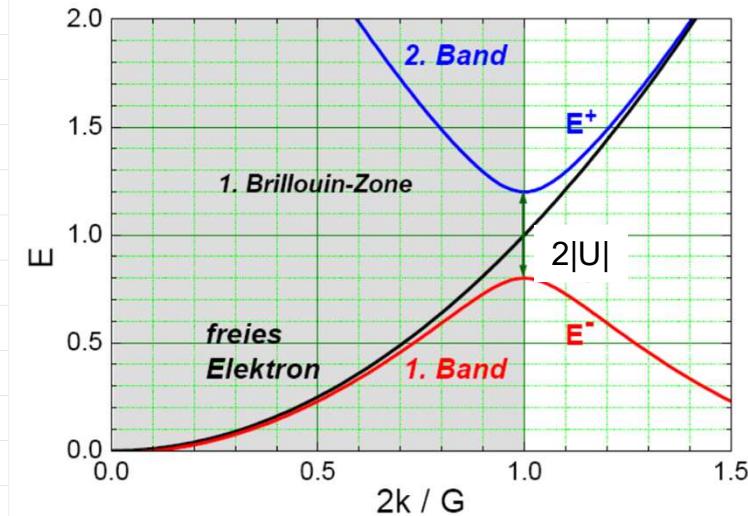


Bandlücke: Reflexionen an Braggsebenen
 \Rightarrow stehende Elektronenwellen
 $|q^+|^2$ vs $|q^-|^2$



Bandlücke: Aufspaltung atomarer Energieniveaus durch Wellenfunktionsüberlapp

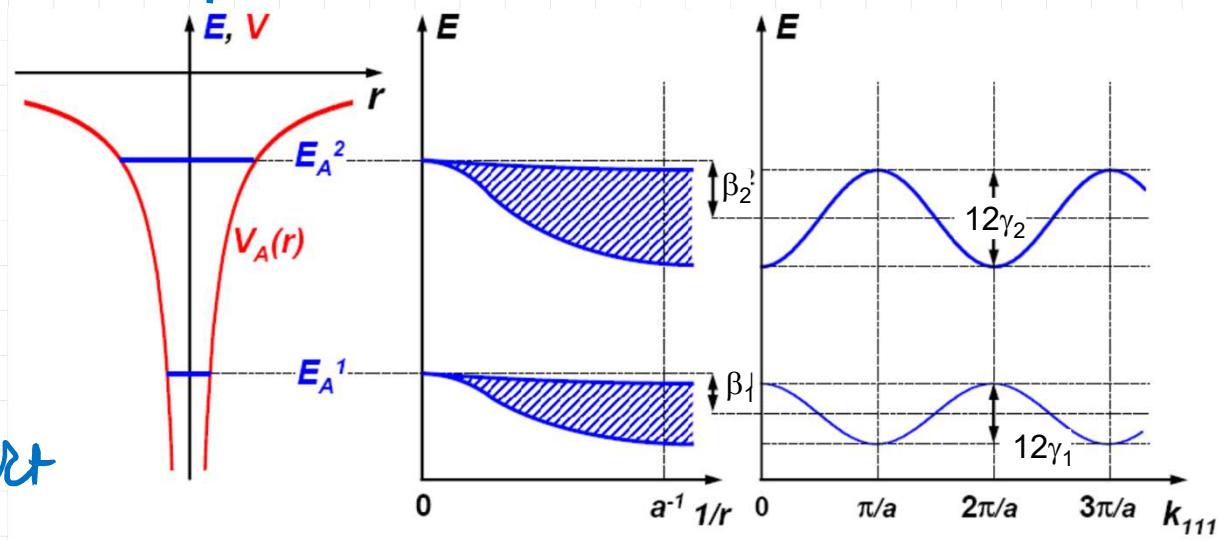
fest freie e^- + d-Bänder



↑
fest freie e^-

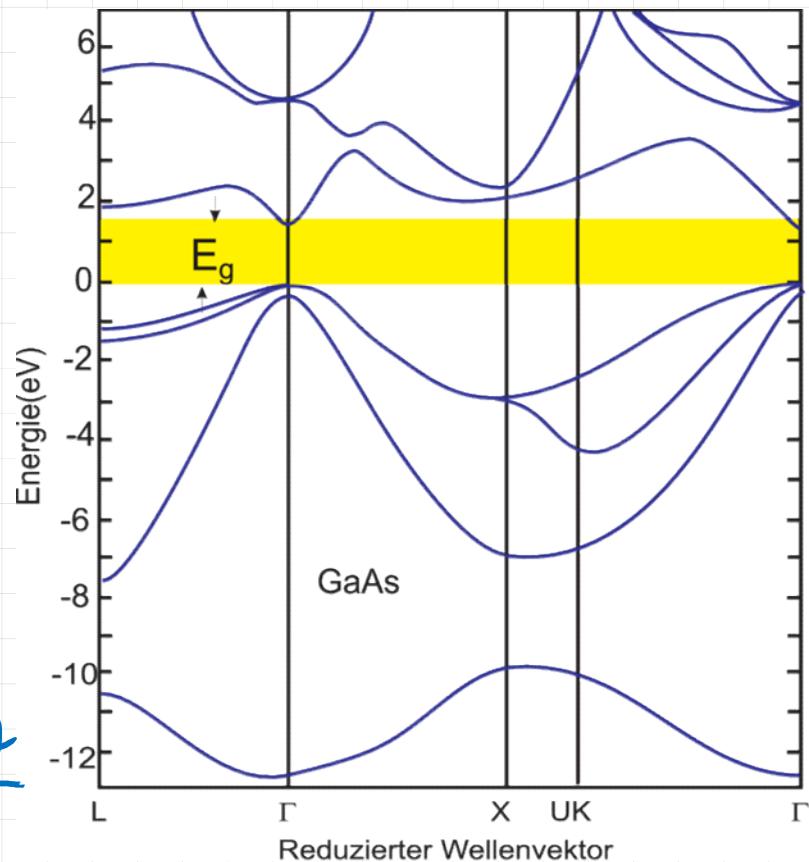


Bandlücke indirekt



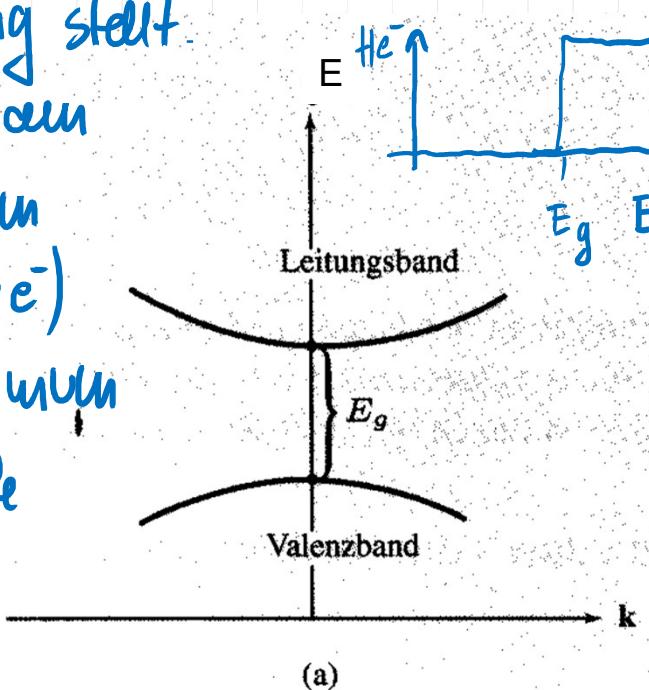
Freitag, 28.7. 9:00 Fragen in Vorlesung, Quiz und Aufgaben per Zoom

- ④ GaAs besteht aus Ge $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$ und As $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^3$ in der zu S-Struktur mit 2-atomiger Basis.
- Die acht 4s und 4p e^- bilden von denen 4 vollständig besetzt sind.
- Die Bandlücke beträgt 1,42 eV und der höchste besetzte Zustand im Leitungsband, sowie der niedrigste unbesetzte Zustand im Valenzband liegen beide am Γ -Punkt, also beim gleichen \vec{k} -Vektor. Eine solche Bandlücke heißt direkte Bandlücke, während die Bandlücke bei Ge (verschiedene \vec{k} 's) indirekt ist.



Der Unterschied zwischen einer direkten und einer indirekten Bandlücke ist technisch relevant. Absorption von Photonen mit E_g ist bei direkter Bandlücke möglich, bei indirekter Bandlücke beginnt Absorption erst wenn ein Phonon Impuls zur Verfügung steht.

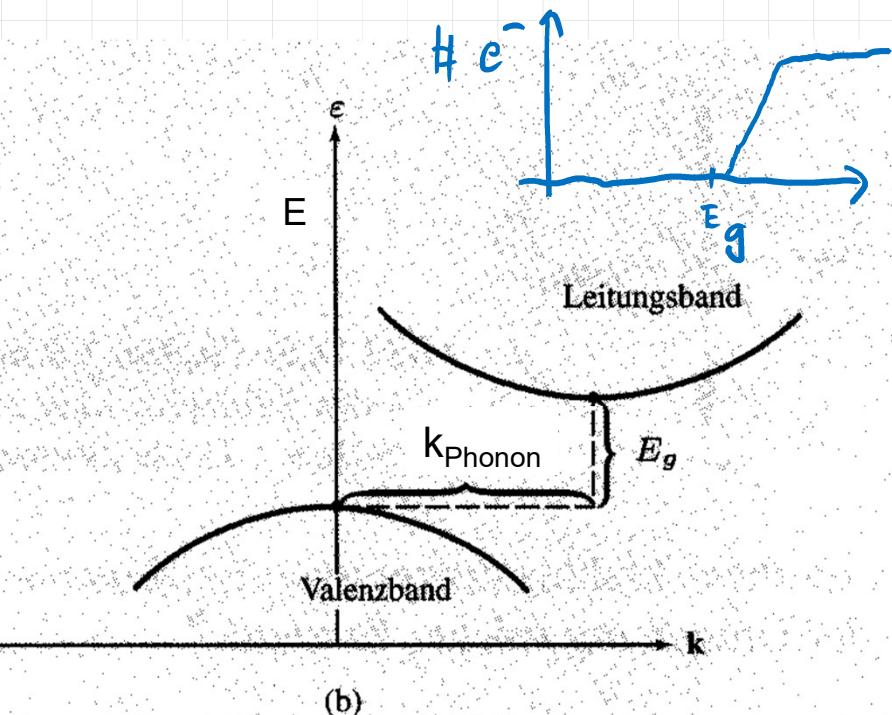
Umgekehrt können e^- am Leitungsbandminimum mit Löchern (fehlende e^-) am Valenzbandmaximum bei direkter Bandlücke direkt bei indirekter Bandlücke nur unter Zuhilfenahme eines Phonons



(a) direkter Übergang (z.B. GaAs)

Absorptionsschwelle:

$$\hbar\omega_{\text{Photon}} = E_{\text{abs}} = E_g$$



(b) indirekter Übergang (z.B. Si oder Ge)

Absorptionsschwelle:

$$\hbar\omega_{\text{Photon}} + \hbar\omega_{\text{Phonon}} = E_{\text{abs}} > E_g$$

rekombinieren.

Durch die Beteiligung eines Phonons wird die strahlende Rekombination bei indirekter Bandlücke langsam. Daher erfolgt die Rekombination dann meist durch alternative, nicht strahlende Rekombination an Störstellen

Die Quanteneffizienz (Wahrscheinlichkeit für strahlende Rekombination) ist für

GaAs : 0,5

Si : $1 \cdot 10^{-5}$

Alle optoelektronischen Bauelemente (z.B. LED's) benötigen daher Halbleiter

Für Solarzellen ist ein Halbleiter mit einer indirekten Bandlücke kein Nachteil - warum?

5 Graphen ist eine Lage Graphit und ein 2D Material. Gr hat eine zweiatomige Basis aus C [He] $2s^2 2p^2$ und damit 8 Valenzelektronen pro primärer Einheitszelle. Daraus leiten sich 8 Bänder, je 4 vollständig besetzte und 4 leere Bänder, je 3 bindende und anti-bindende σ und σ^* Bänder, sowie je ein n und ein n^* Band. Die n Bänder berühren sich am K-Punkt und bilden den sogenannten

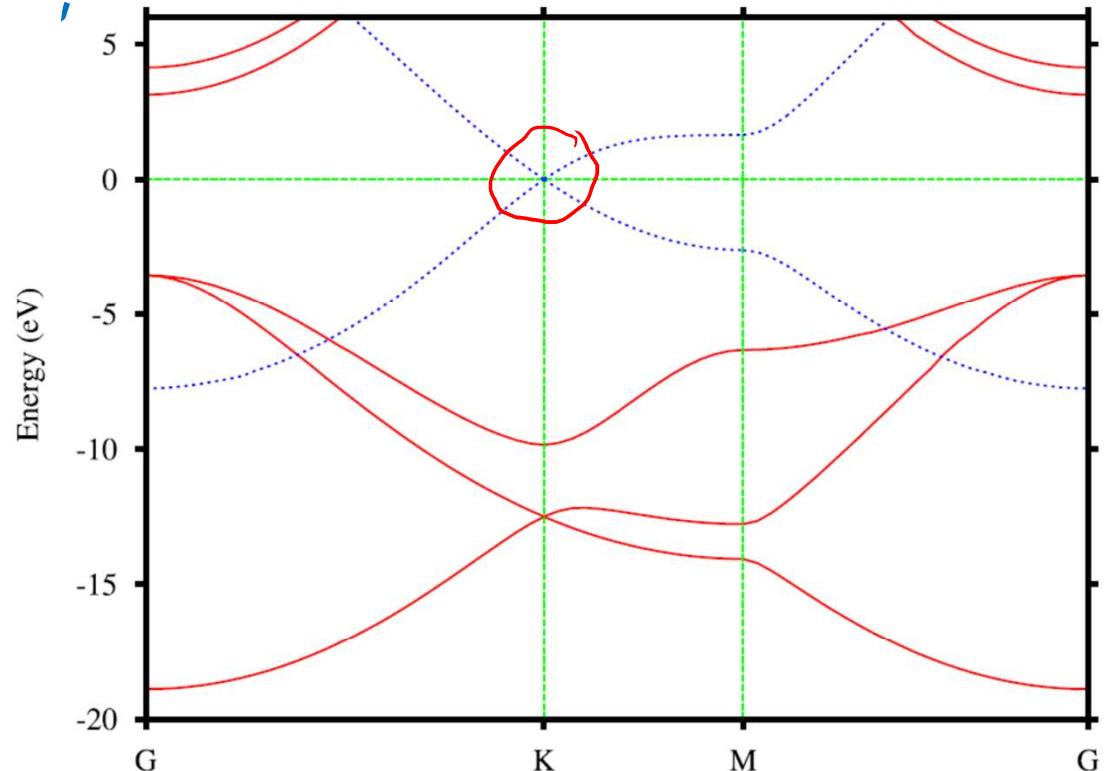
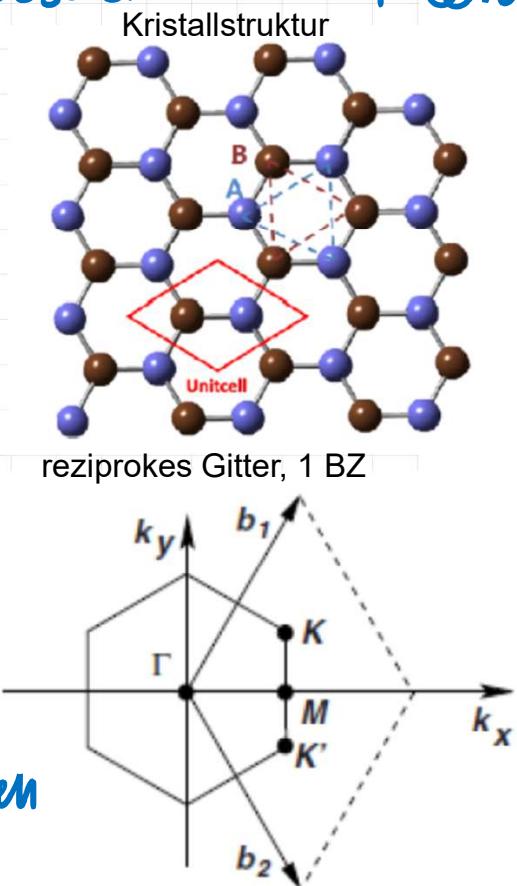
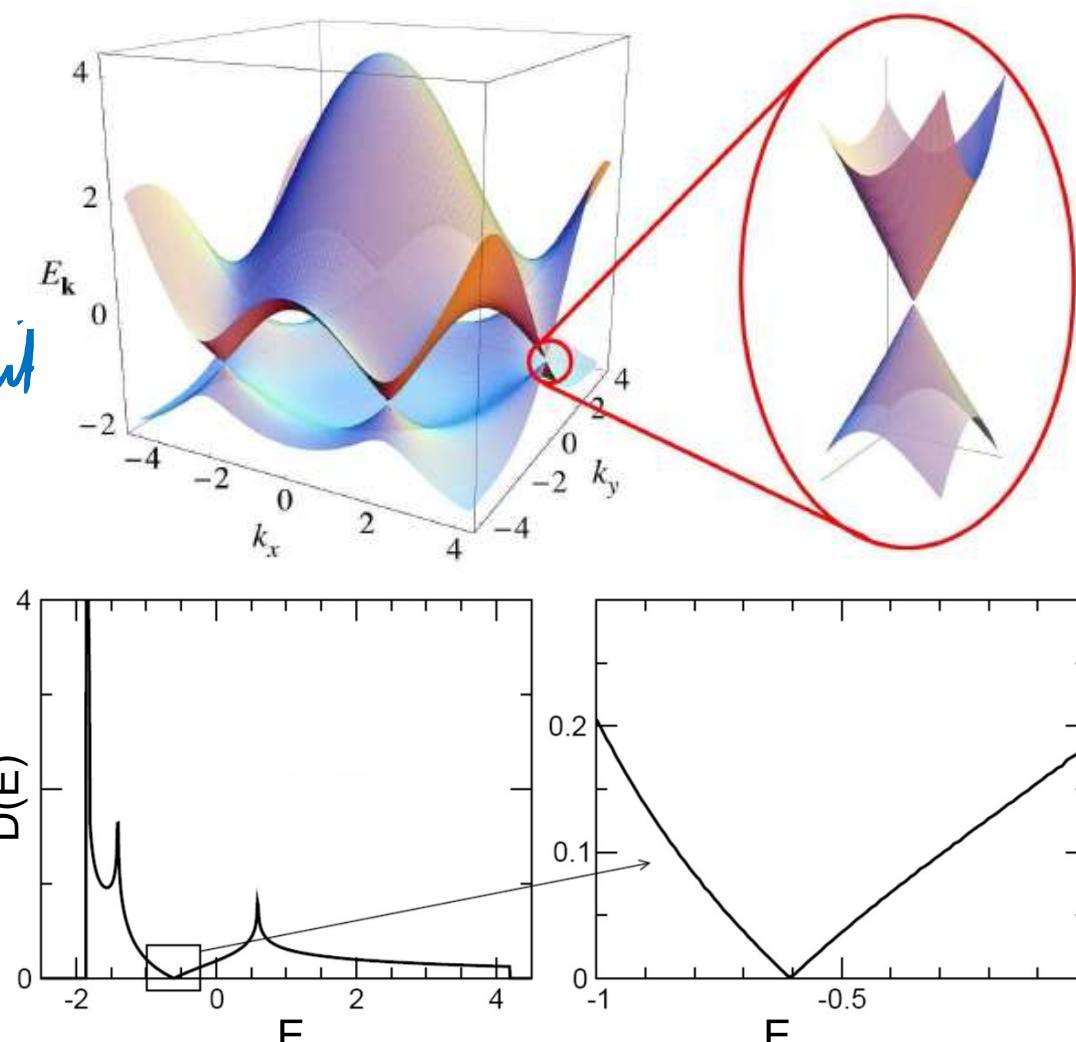


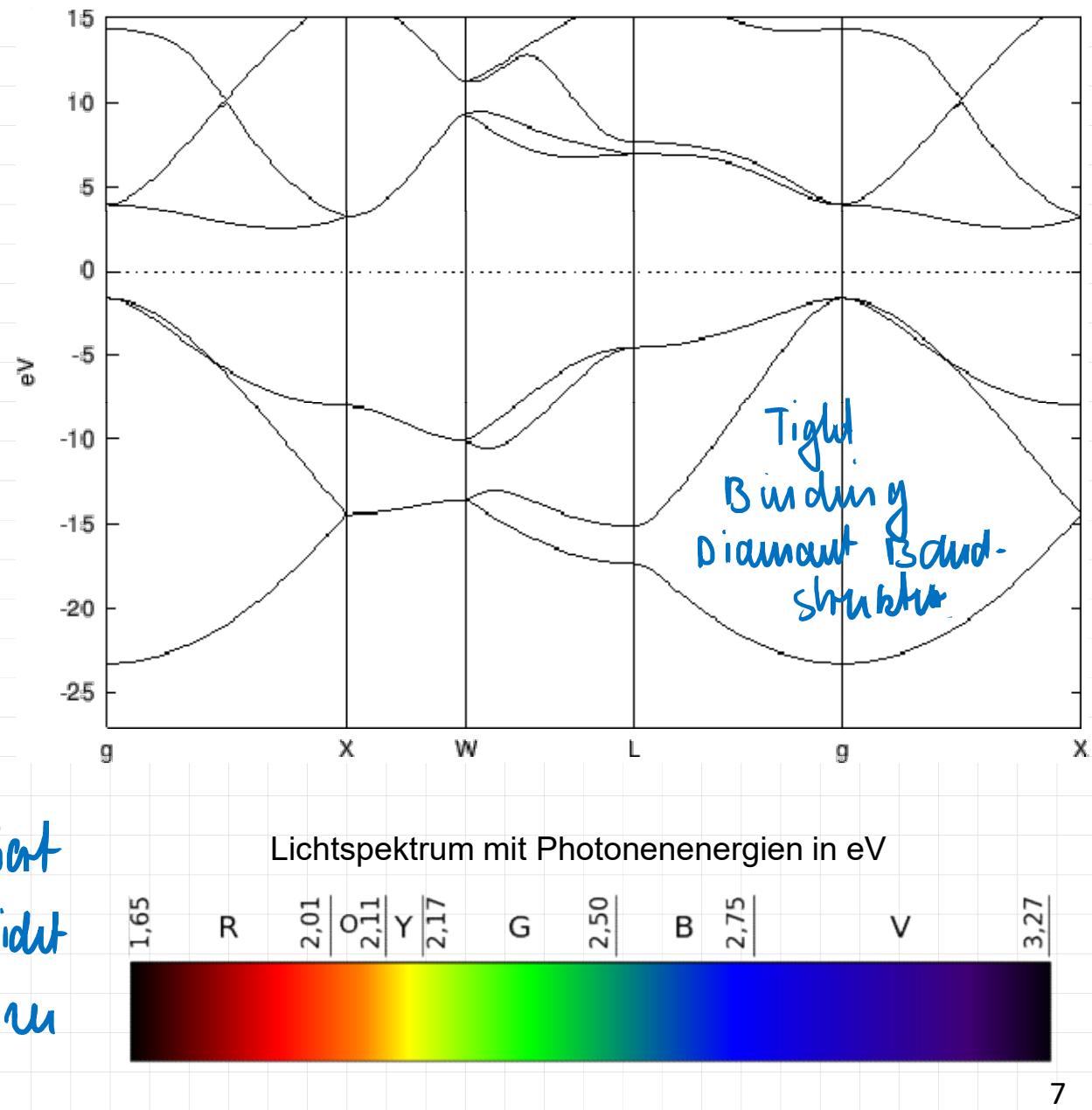
FIG. 1. (Color online) Band structure of a single graphene layer. Solid red lines are σ bands and dotted blue lines are π bands.

Dirac Punkt. Elektronen mit \vec{k} -Vektoren
 nahe dem Dirac-Punkt erfüllen die
 relativistische Dirac-Gleichung und
 verhalten sich in Gr wie masselose
 Teilchen, die sich mit Lichtgeschwindigkeit
 bewegen. Die Zustandsdichte $D(E)$
 zeigt ausgeprägte Spalten an Sattelpunkten der Bandstruktur.
 Gr ist ein Halbleiter mit einer
 Bandlücke von $0 \text{ eV} = E_g$



A. H. Castro Neto et al., Rev. Mod. Phys. 81 (2009) 109.

⑥ Diamant hat eine zweiatomige Basis und besteht aus C-Atomen $[He] 2s^2 2p^2$. Die insgesamt 8 Valenzelektronen in der primitiven Zelle bilden 8 Bänder, 4 besetkt und 4 unbesetzt. Diamant hat eine indirekte Bandlücke von 5,4 eV und ist ein Isolator. Jeder gute Isolator, ohne Defekte und als Euleri statt, sichtbares Licht kann nicht absorbiert werden, da die Photonenenergie nicht ausreicht um Interbandübergänge zu induzieren.



8.7 Messung der Bandstruktur und Zustandsdichte - Photoemission

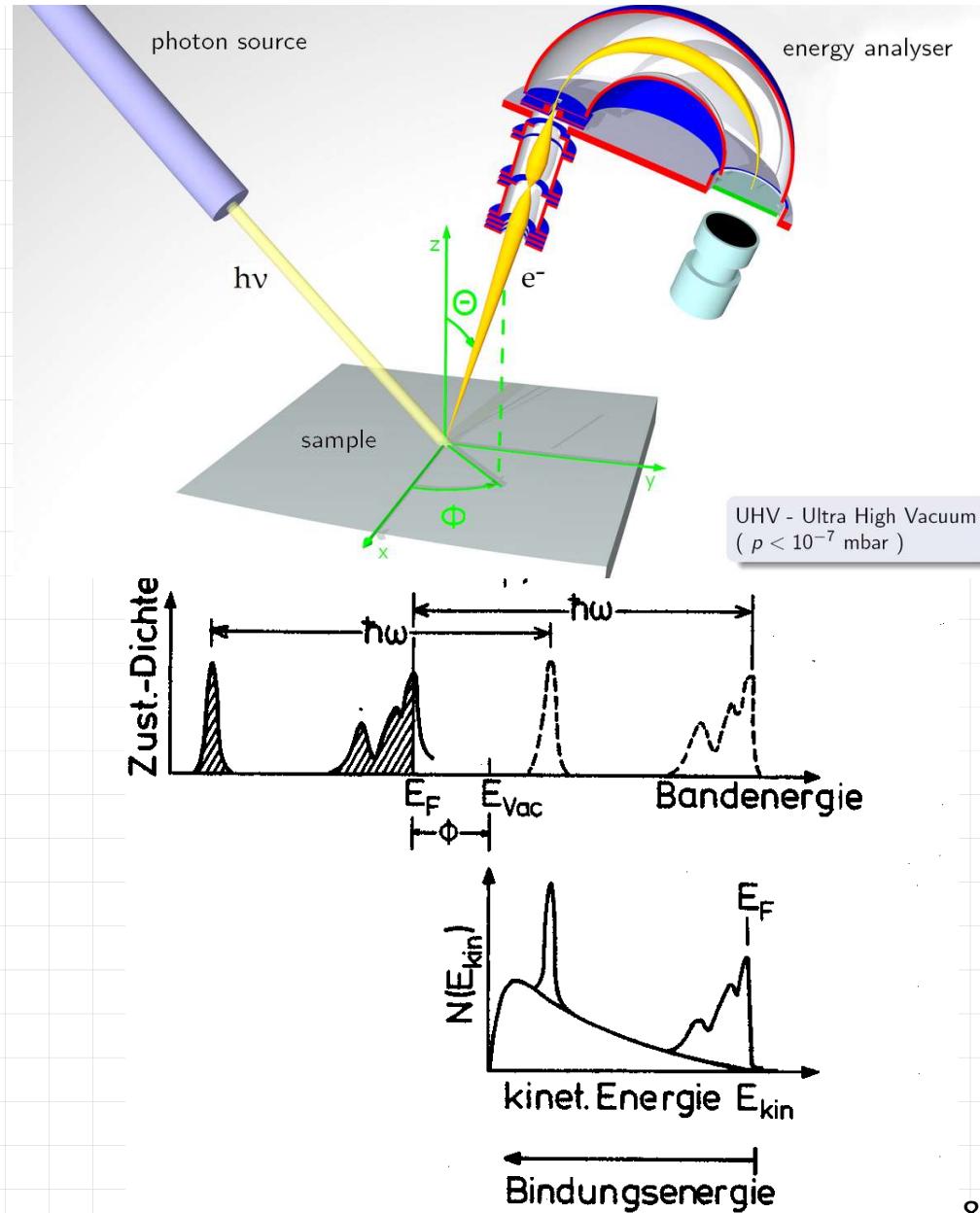
Photonen der Energie $\hbar\omega$ lösen e^- aus Kristall aus, deren Energie mit einem Analysator bestimmt wird. Es ist

$$\hbar\omega = \phi + E_{kin} + E_b$$

Austrittsarbeit ↑
↑ Bindungsenergie

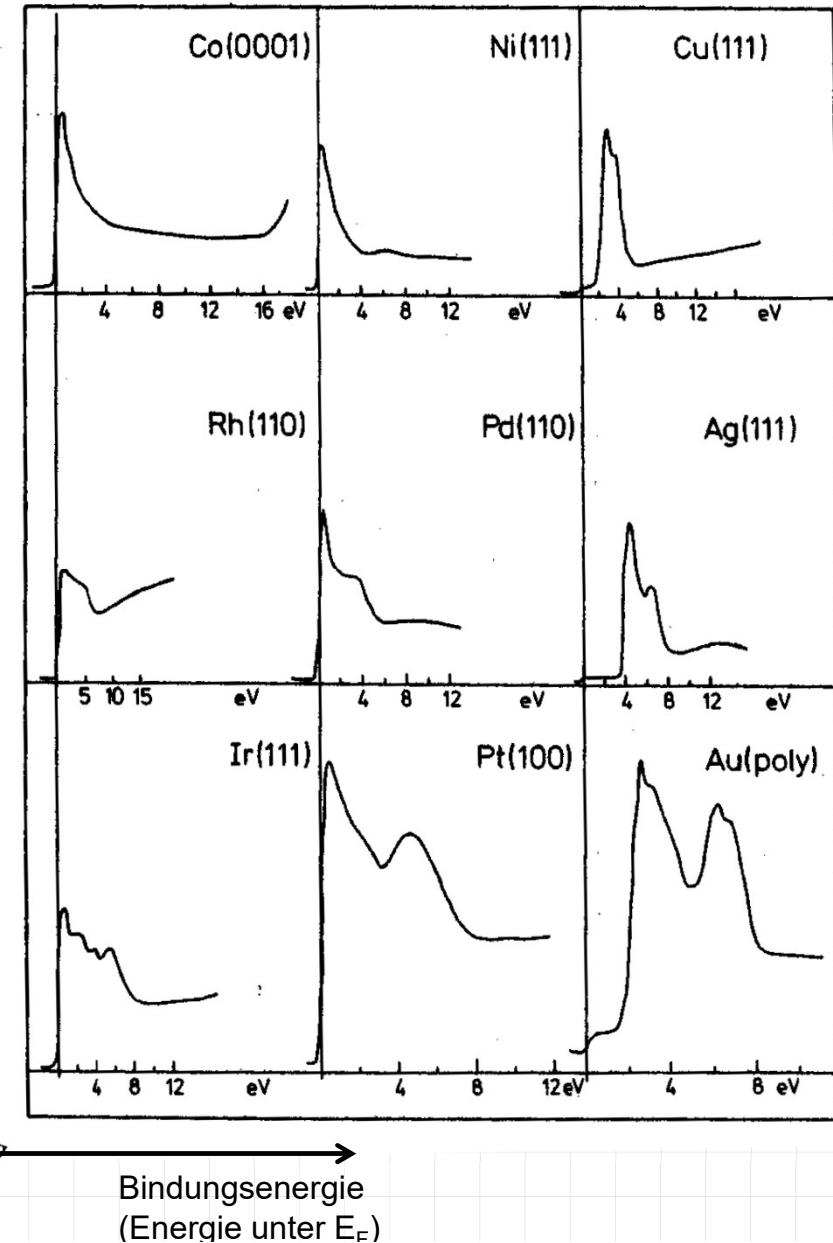
gemessene kinetische Energie

- Zur Bestimmung von $D(E)$ wird über alle Winkel des Halbraums oberhalb der Probe integriert. Nun erhält

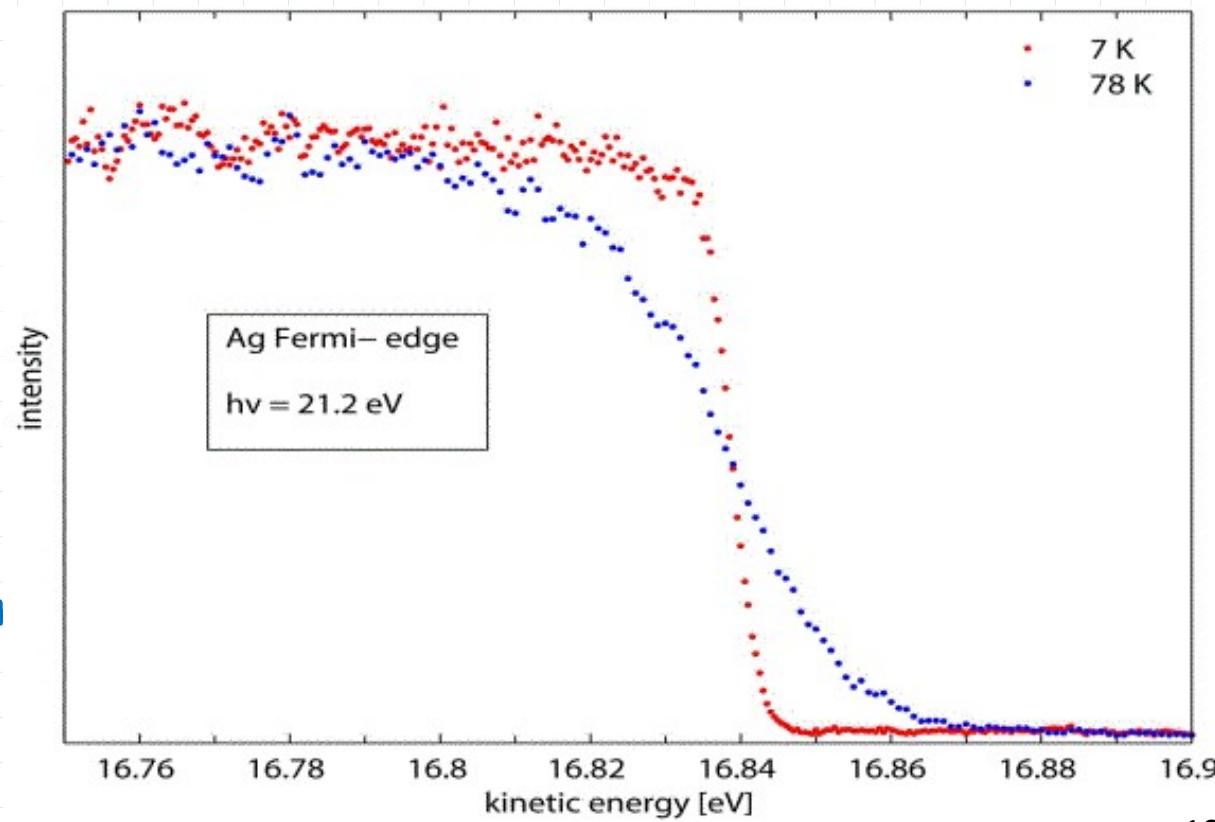


die Zustandsdichte der besetzten Bänder. Die Zustandsdichte unbesetzter Bänder kann mit Bremsstrahlung isodromaten spektroskopie oder Rastertunnel spektroskopie bestimmt werden

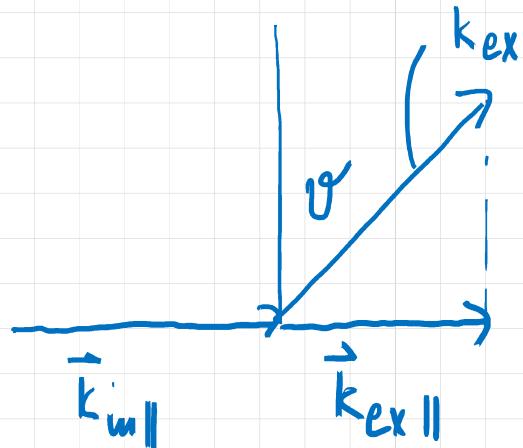
- Das gemessene Spektrum ist eine Überlagerung von $D(E)$ und von wahren Sekundär- e^- , die bereits inelastisch gestreut haben.
Die gemessenen e^- stammen typischerweise aus einer Tiefe unter 10 \AA , da die mittlere freie Weglänge der e^- klein ist.
- Lichtquellen sind typisch:
 - Gasentladungslampen (He_I 21,2 eV, He_II 40,8 eV)
 - Synchrotronstrahlungsquellen



- Die gemessenen Zustandsdichten der Übergangsmetalle zeigen sehr schön die hohen Zustandsdichten der d-Bänder man erkennt, dass diese für Ag, Au und Cu einige eV unter der Fermikante liegen, für die anderen Metalle liegt die Fermikante in den d-Bändern.
- Sehr schön lässt sich bei hoher Auflösung die temperaturbedingte Aufweichung der Fermikante messen.
- Mittels winkelaufgelöster Photoemissionspektroskopie (Angle Resolved Photo Emission Spectroscopy, ARPES) ist es möglich experimentelle Band-



strukturen zu bestimmen. Besonders einfach für 2D Materialien, wo



$$E_b(\vec{k}_{||}) \Rightarrow \text{Bandstruktur}$$

$$E_b = t_h w - \phi - E_{kin}$$

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2 k_{ex}^2}{2m} \Rightarrow k_{ex} = \sqrt{\frac{t_{kin} 2m}{\hbar^2}}$$

$$k_{ex\parallel} = k_{ex} \cdot \sin \vartheta,$$

Richtung von $k_{ex\parallel}$ aus Richtung des Detektors

$$\vec{k}_{in\parallel} + \vec{k}_{\text{Photon}} = \vec{k}_{ex\parallel} + \vec{G}$$

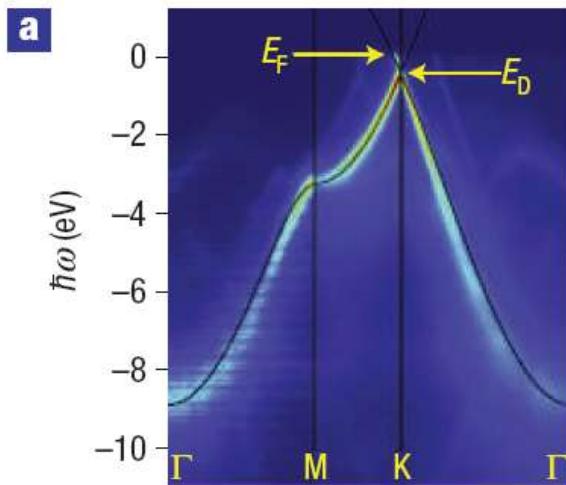
≈ 0

Kristallimpuls \parallel zu Grenzfläche erhalten

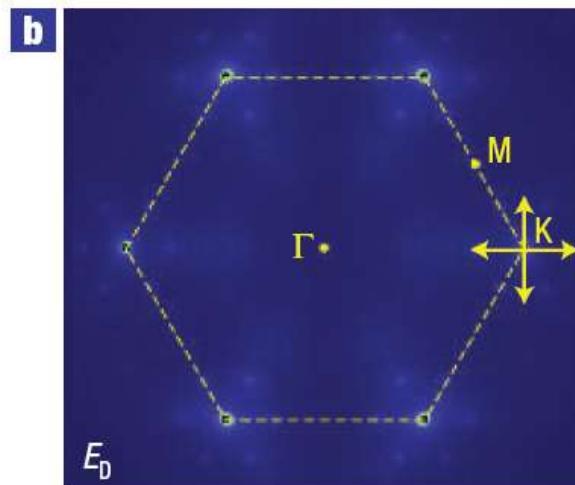
$$\vec{k}_{ex\parallel} \in 1. \text{ BZ} \Rightarrow \vec{G} = 0$$

$\vec{k}_{ex\parallel} \notin 1. \text{ BZ}$ \Rightarrow wähle \vec{G} , so dass $\vec{k}_{in\parallel} \in 1 \text{ BZ}$ (Rückfaltung)

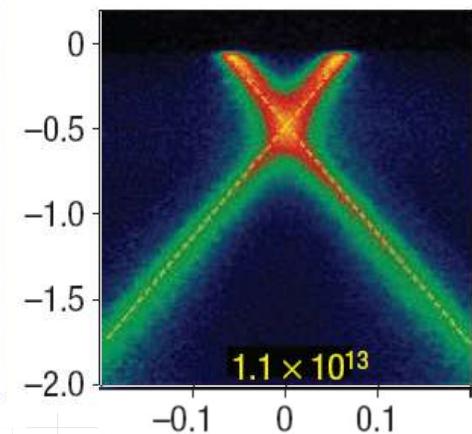
Beispiel:
Bandstruktur von
Graphen auf SiC



Dispersion $E(k)$ des besetzten π -Bandes längs Hochsymmetrie-Richtungen der 2D-Brillouinzone



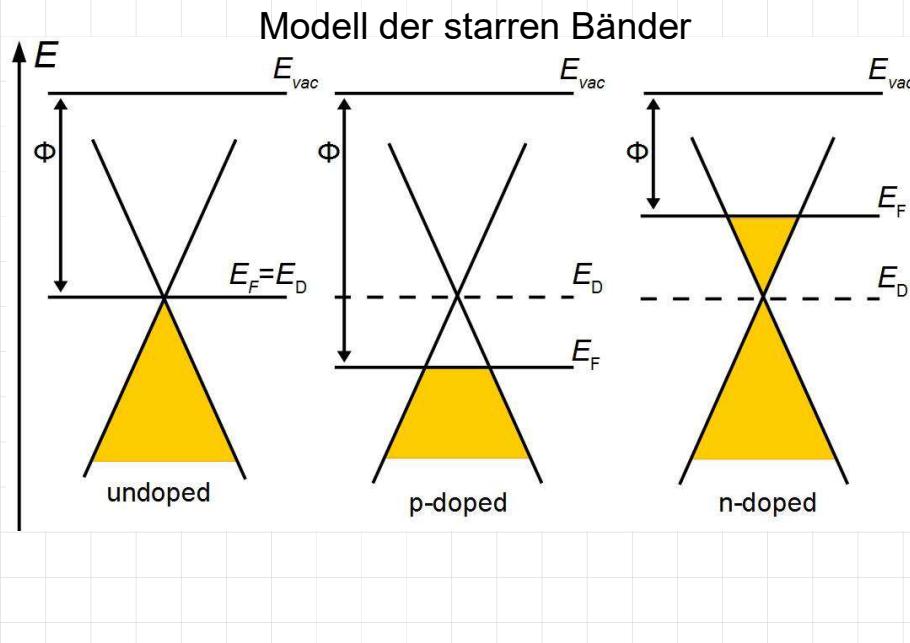
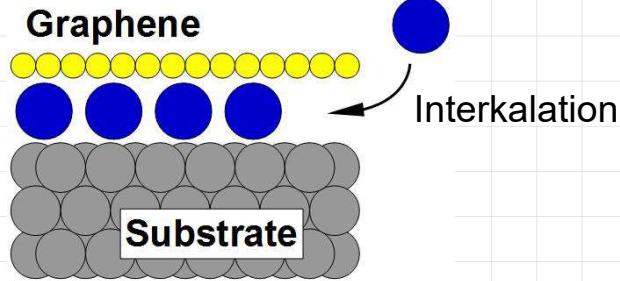
Fermifläche von Graphen (leicht dotiert)



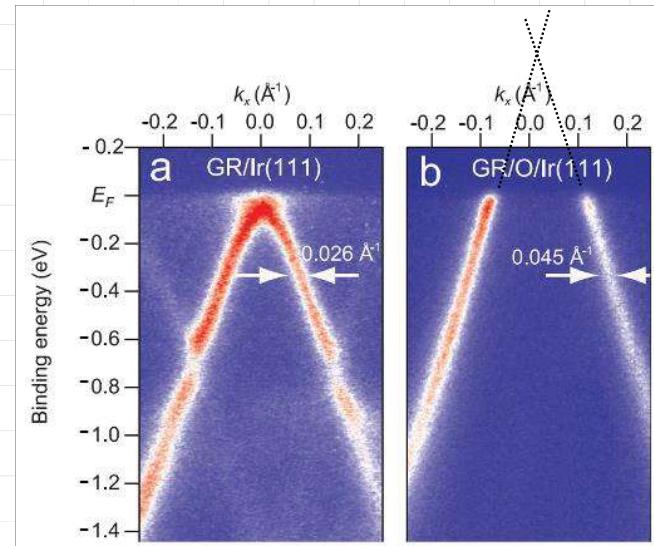
Schnitt durch den K-Punkt längs vertikaler Linie in (b) (leicht dotiert)

Beispiel: Dotierung von Graphen (= Verschiebung der

Bänder) durch Interkalation von elektro negativen (O) oder elektro positiven (s) Elementen.



O- Intercalation



Cs - Intercalation

