

## 4.3 Band - Band Übergänge

### 4.3.1 Grundsätzliche Überlegungen und reduziertes Bandschema

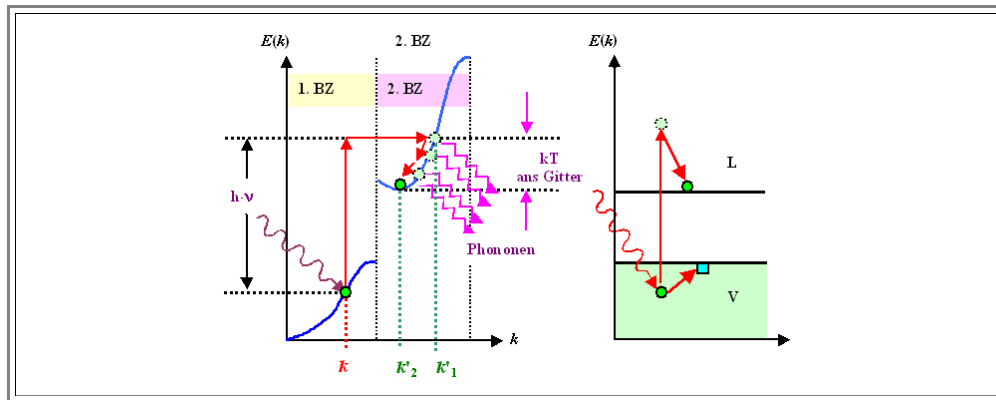
#### Energieerhaltung beim Band - Band Übergang

Wir betrachten jetzt nur noch *Halbleiter*. Sie unterscheiden sich von Isolatoren zunächst *nur* durch die Möglichkeit, daß die bei Raumtemperatur verfügbare thermische Energie  $kT_{RT} \approx 1/40 \text{ eV}$  ausreicht, um einigen Elektronen den Sprung vom (vollen) Valenzband ins Leitungsband zu ermöglichen.

- Der Übergang von Elektronen vom Valenzband ins Leitungsband sowie der umgekehrte Prozeß, der Übergang von Elektronen im Leitungsband zu freien Plätzen im Valenzband, sogenannte *Band-Band-Übergänge*, sind also unmittelbar verantwortlich für die elektrische Leitfähigkeit der Halbleiter. Wir müssen sie etwas näher betrachten.
- Jeder solcher Übergang bedeutet einen Wechsel von einem Zustand mit einem Wellenvektor  $\underline{k}$  zu einem neuen Zustand mit einem Wellenvektor  $\underline{k}'$ . Dabei ändert sich die *Energie* und der *Impuls* des Elektrons.
- Da aber der Energie- und Impulserhaltungssatz auch in der Quantentheorie gilt, müssen wir uns mit den damit verbunden Konsequenzen beschäftigen.

Wir betrachten zunächst den *Energieerhaltungssatz*. Um von der etwas undeutlichen "thermischen Energie" wegzukommen, nehmen wir *Photonen*, also Licht, mit der eindeutig definierten Energie  $E_{\text{Photon}} = h \cdot \nu$ , um Elektronen aus dem Valenz- ins Leitungsband zu lupfen.

- Wir betrachten nun das Schicksal eines von einem Photon getroffenen Elektrons im Detail, sowohl im  $E(\underline{k})$ -Diagramm als auch im Banddiagramm.



Das Photon trifft ein Elektron irgend"wo" im Valenzband. Das "wo" bezieht sich dabei sowohl auf den Ort im Ortsraum als auch im  $\underline{k}$ -Raum. In der Zeichnung hat das "getroffene" Elektron den Zustand  $\underline{k}$ ; damit ist alles über den Zustand "vorher" gesagt. Es gibt nun zwei Möglichkeiten:

- Die Energie des Photons  $h\nu$  reicht aus, um das Elektron mindestens bis zur Leitungsbandunterkante zu heben. Dann wird das mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch passieren. Im Bild reicht die Energie sogar um ein Elektron deutlich über die Leitungsbandkante zu heben (roter Pfeil nach oben).
    - Im  $E(\underline{k})$ -Diagramm gibt es aber  $h\nu$  über dem Zustand  $\underline{k}$  gar keinen Zustand; wir müssen das Elektron also in den energetisch passenden Zustand in der *2. BZ* "transferieren" (roter Pfeil nach rechts). Dadurch hat das Elektron jetzt aber einen anderen (größeren) Wellenvektor.
    - Wir folgen den beiden roten Pfeilen; das Elektron sitzt nun im Zustand  $\underline{k}'_1$  im sonst leeren Leitungsband.
    - Es gibt jetzt jede Menge freie Plätze bei kleineren Energien für unser Elektron - es wird also nicht lange auf seinem ersten Platz bleiben, sondern sich von Platz zu Platz "nach unten" sinken lassen, bis es das Energieminimum des Leitungsbandes bei  $\underline{k}'_2$  erreicht hat; angedeutet durch die kleinen roten Pfeile nach unten.
    - Die Überschussenergie geht dabei portionsweise ins Gitter - der Kristall wird ein bißchen wärmer. In der Zeichnung ist das formal-abstrakt so dargestellt, daß das Elektron beim Hinunterhüpfen ins Leitungsband *Phononen* emittiert.
    - Dieser Prozeß heißt **Thermalisierung** oder **dielektrische Relaxation**. Er erfolgt *sehr schnell* - in ( $10^{-11} - 10^{-13}$ ) s ist alles vorbei.
  - Die Energie des Photons ist zu klein; sie reicht *nicht* aus, um einen Übergang Valenzband - Leitungsband zu induzieren.
    - Dies bedeutet, daß es für  $h\nu < E_G$  *keine* Absorption des Photons geben kann. Für Photonen mit kleinerer Energie ist der (perfekte) Kristall komplett durchsichtig.
    - Wir haben also auch fundamentale optische Eigenschaften im Banddiagramm enthalten!
- Die Darstellung im Banddiagramm rechts ist natürlich einfacher, weil wir uns nicht um die  $\underline{k}$ -Werte kümmern. Wir können dafür eine andere wichtige Sache besser wiedergeben als im  $E(\underline{k})$ -Diagramm:

- Das ins Leitungsband transferierte Elektron hinterläßt einen *unbesetzten Platz im Valenzband*, ein "**Loch**"; als kleines blaues Quadrat eingezeichnet.
- Das gibt dem energetisch direkt über dem *Loch* sitzenden Elektron die Möglichkeit, energetisch etwas tiefer zu sinken, indem es den freien Platz besetzt. Die freiwerdende Energie geht wieder als Wärme ins Gitter.
- Das *Loch* ist jetzt energetisch eins höher gerutscht. Das direkt darübersitzende Elektron.... - der Prozeß wiederholt sich, bis das Loch an der Valenzband*oberkante* sitzt.
- Im Banddiagramm haben wir jetzt ein Elektron an der **Leitungsbandkante** (wir meinen dann immer die *untere* Kante) und ein Loch an der **Valenzbandkante** (wir meinen dann immer die *obere* Kante).
- Die Position von Loch und Elektron ist dann irgend"wo" - denn die Ordinate des Banddiagramms trägt keine Bezeichnung; wir lassen alles unspezifiziert. Das ist auch richtig, denn obwohl Elektron und Loch gleich nach der Generation einen definierten Ort besitzen, sind sie ja beweglich und laufen - per "random walk" - irgendwo hin.
- Damit haben wir *energetisch* alles im Griff. Der Energiesatz ist in jedem Moment erfüllt, die Energie des gesamten System aus Photon, Elektron und Kristall (mit Phononen) ist konstant.
- Wie steht es mit dem **Impulserhaltungssatz**?

## Impulserhaltung beim Band - Band Übergang

Wir müssen nun den Impuls des *Systems vorher* und *nachher* betrachten. Das ist erheblich schwieriger als die Betrachtung der Energie, da der quantenmechanische Impuls von Photon, Kristall und Elektron nicht so unmittelbar klar ist wie die Energie.

- Wir müssen hier etwas an der Oberfläche bleiben, und werden einige "Dinge" einfach postulieren. Trotzdem läßt sich *eine* wichtige Beziehung leicht verständlich machen.
- In der Quantenmechanik ist der Impuls *immer* gegeben durch

$$\text{Impuls} = \underline{p} = \hbar \cdot \underline{k}$$

- und das gilt für Elektronen, Photonen und Phononen. Da die Wellenlängen von (Licht)Photonen immer sehr viel größer sind als die der Elektronen und **Phononen** (Photonen liegen im **1 µm** Bereich, Elektronen und (die hier wichtigen) Phononen eher im **nm** Bereich); der Wellenvektor dann entsprechend viel kleiner, *können wir den Impuls der Photonen in 1. Näherung schlicht vernachlässigen*.
- Im [Link](#) ist das ein bißchen genauer aufgeführt. Es ist hilfreich, sich in diesem Zusammenhang schlicht folgende Regel zu merken:

**Photonen haben Energie, aber kaum Impuls.**  
**Phononen haben Impuls, aber kaum Energie.**  
**Elektronen haben Impuls und Energie.**

Damit können wir den Impuls der Photonen erst mal "vergessen"; und Phononen sind bei der primären Generation auch noch nicht beteiligt. Es geht damit nur noch um den Impuls des Elektrons vorher (im Valenzband; Wellenvektor  $\underline{k}$ ) und nachher (im Leitungsband; Wellenvektor  $\underline{k}'$ ); dafür schreiben wir  $\Delta \underline{p}$ , die Differenz des Impulses vorher – nachher.

- Wir haben

$$\Delta \underline{p} = \hbar \cdot (\underline{k} - \underline{k}')$$

- Diese Differenz ist auf jeden Fall ungleich Null, d.h. der Impulserhaltungssatz ist für das Elektron ohne *dritten Partner* nicht zu erfüllen.

Der dritte Partner in einem perfekten Kristall kann aber nur der Kristall selbst sein. Er hat die Masse  $\infty$  verglichen mit einem Elektron, und könnte eigentlich damit jeden beliebigen Impuls aufnehmen - so wie die Hauswand beim Ballspiel.

- Kann er aber nicht*. In der Quantenmechanik sind die Dinge gequantelt, und die Differenz ( $\underline{k} - \underline{k}'$ ) kann nur *diskrete* Werte annehmen.
- Welche das sind können wir hier nicht herleiten. Wir können aber das Ergebnis, auch als **Kristallimpulserhaltungssatz** bekannt, zur Kenntnis nehmen; es lautet

$$\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G}$$

**$\underline{G}$  = reziproker Gittervektor**

Das sollte uns nun sehr bekannt vorkommen. Es ist die gute alte *Bragg-Bedingung* mit einer Verallgemeinerung:

●  $|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|$  muß *nicht mehr erfüllt sein!*, wir lassen jetzt auch **inelastische Streuung** zu.

● Das ist nun wirklich einfach, hat aber einschneidende Konsequenzen.

▶ Wenn wir die Darstellung des Band-Band-Übergangs im  $E(\mathbf{k})$ -Diagramm oben wieder betrachten, bedeutet Impulserhaltung nun, daß der nach rechts weisende rote Pfeil *die Länge eines reziproken Gittervektors* haben muß.

● Das hat er aber sicher nicht, denn in der Zeichnung wäre der kürzestmögliche reziproke Gittervektor so lang wie beide Brillouin zonen zusammen (man betrachte ein früheres Bild, falls das nicht unmittelbar einsichtig ist).

● Die Konsequenz ist einfach: der oben gezeichnete Band-Band-Übergang *kann gar nicht stattfinden*, er verletzt den Kristallimpulserhaltungssatz!

▶ Um Energie- *und* Kristallimpulserhaltung gleichzeitig zu erfüllen. müssen wir nun im  $E(\mathbf{k})$ - Diagramm solange mit *zwei* vorgegeben Strecken (den beiden roten Pfeilen) an der Dispersionskurve rauf- und runterfahren, bis wir einen  $\mathbf{k}$ -Wert finden, bei dem alles paßt.

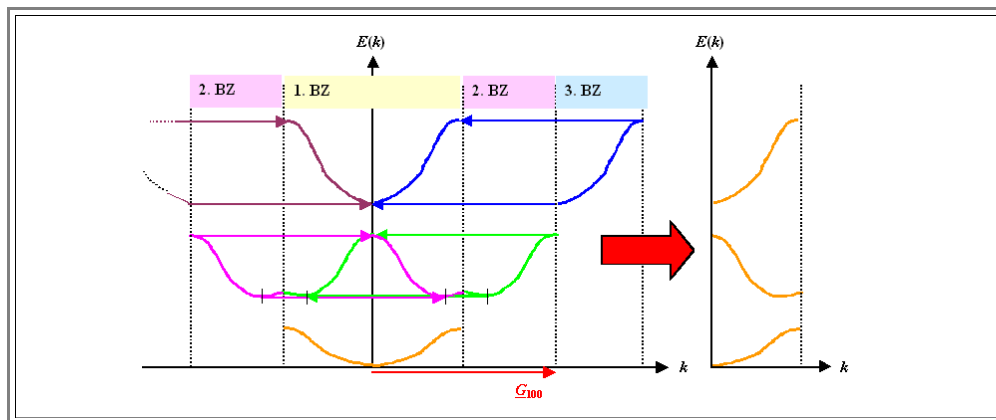
● Das tun wir aber nicht, sondern wir lassen uns etwas einfallen, was die Arbeit sehr stark erleichtert: Wir benutzen ab sofort ein **reduziertes Bandschema** oder *Banddiagramm*.

## Reduziertes Banddiagramm

▶ Die  $E(\mathbf{k})$ -Diagramme wie schon mehrfach gezeigt, lassen sich sehr viel platzsparender zeichnen, wenn man eine kleine Vereinbarung bezüglich eines zeichentechnischen "Tricks" trifft:

● Wir malen alle Zweige der  $E(\mathbf{k})$  Kurven in den diversen Brillouin Zonen in die **1. Brillouin Zone**. Man weiß ja, zu welcher **BZ** irgendein Ast gehört - man muß nur von unten kommen abzählen.

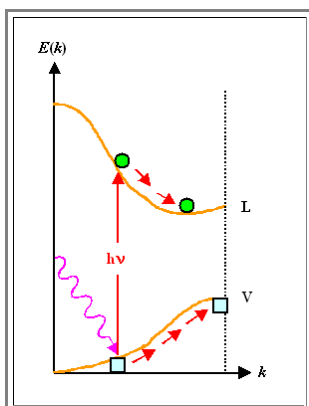
● Praktisch geht das ganz einfach: Wir verschieben jeden Ast solange um reziproke Gittervektoren nach innen, bis er in die **1. BZ** fällt. Das sieht so aus:



▶ Diese "Spar"-version der Dispersionskurven heißt **reduzierte Darstellung** oder reduziertes *Banddiagramm*.

● Nebenbei erwähnt: Die reduzierte Darstellung des Banddiagramms ist nicht nur ein Zeichentrick, sondern geht etwas tiefer. Man kann zeigen, dass die Addition eines reziproken Gittervektors zum Wellenvektor einer beliebigen Kristallwellenfunktion (fast) nichts ändert. Das ist hier aber nicht so wichtig, wer will kann sich das Ganze im [Link](#) noch etwas genauer anschauen.

▶ Damit sparen wir nicht nur eine Menge Platz, sondern die von Impuls- und Energieerhaltungssatz aus *erlaubten Übergänge liegen jetzt einfach senkrecht übereinander*.



● Das ist leicht einzusehen: Jeder Übergang der energetisch paßt, erfüllt automatisch den Kristallimpulserhaltungssatz, denn die diversen Äste der  $E(\mathbf{k})$  Kurve unterscheiden sich ja genau durch einen reziproken Gittervektor.

● Die Absorption eines Photons sieht jetzt also so aus wie links dargestellt. Die Länge des Pfeils mit der Energie  $h\nu$  muß nur noch an die passende Stelle zwischen den zwei Ästen gezeichnet werden.

● Wir wollen diese Vereinbarung, für Band-Band-Übergänge das *reduzierte Bandschema* zu verwenden, zukünftig automatisch einhalten. Sie ist im übrigen auch durch die harte Theorie zu rechtfertigen, die unter der Bezeichnung "**Bloch Theorem**" bekannt ist.

● Band-Band-Übergänge zeichnen wir zukünftig auch im einfachen Banddiagramm nur noch senkrecht nach oben - *und nach unten*.

- Die typischen Kurve eines reduzierten Banddiagramms wie nebenstehend gezeigt, taucht in der Natur häufiger auf. Wir beobachten sie bei genauem Hinsehen auch bei [Objekten, die der Halbleiterphysik eher fern stehen](#). Ein aufmerksamer Betrachter kann auch noch Hinweise auf Komplikationen finden, die wir erst in den folgende Kapiteln behandeln werden.

➤ Denn alles was wir bisher gelernt haben gilt selbstverständlich nicht nur für die **Generation** von Elektronen, d.h. für die Schaffung eines Elektron-Loch Paares durch den Übergang eines Elektrons vom Valenz- ins Leitungsband, sondern auch für die **Rekombination**, die Wiedervereinigung von Elektron und Loch.

- Versuchen wir, das im obigen Bild einzutragen, *bekommen wir ein Problem*.

- Nach der **Thermalisierung** von Elektron und Loch, sitzen sie im gezeichneten Beispiel nicht mehr *senkrecht übereinander*! Ein Übergang nach unten und damit Rekombination ist ohne Verletzung des Kristallimpulserhaltungssatzes nicht möglich!

➤ Das ist eine ziemlich aufregende Erkenntnis - mit weitreichenden Konsequenzen. Wir werden ihr ein eigenes Unterkapitel widmen.

## Fragebogen / Questionnaire

Multiple Choice Fragen zu 4.3.1