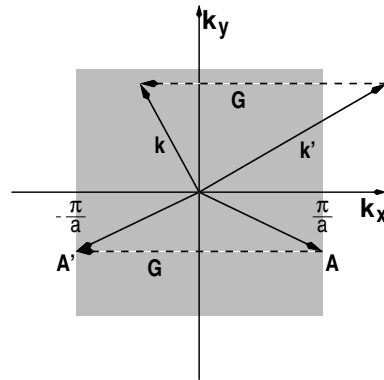
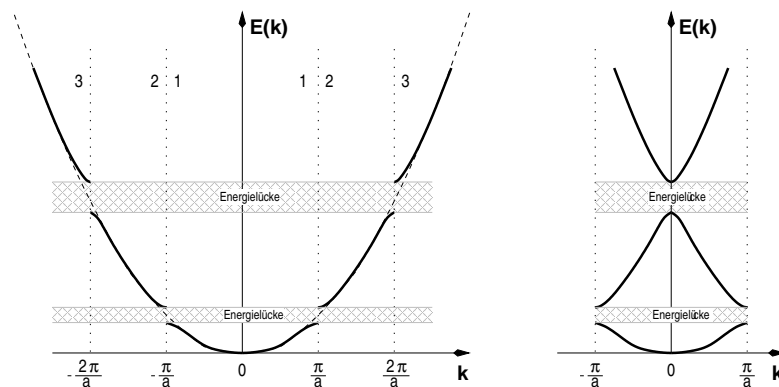


ersten Brillouin-Zone liegt, kann ein reziproker Gittervektor gefunden werden, sodaß  $k = k' + G$  innerhalb der ersten Brillouin-Zone liegt. Jeder Punkt im  $k$ -Raum kann durch Symmetrieoperationen auf einen äquivalenten Punkt in der ersten Brillouin-Zone abgebildet werden, wobei man jedoch darauf achten muß, daß viele Punkte außerhalb der ersten Brillouin-Zone auf dem selben Punkt der ersten Brillouin-Zone abgebildet werden können.



**Abbildung 6.11:** Erste Brillouin-Zone eines zweidimensionalen quadratischen Gitters und Symmetrieoperationen, die jeden Punkt auf die erste Brillouin-Zone abbilden.

Die Abbildung 6.11 zeigt ein zweidimensionales, quadratisches Gitter und wie ein Punkt der durch einen Wellenvektor  $k'$  beschrieben wird und durch einen reziproken Gittervektor  $G$  mit der Operation  $k' + G = k$  in die erste Brillouin-Zone überführt wird.



**Abbildung 6.12:** Zonenschema für fast freie Elektronen im energetisch niedrigsten Bereich. Die linke Abbildung zeigt das Zonenschema in erweiterter und die rechte in reduzierter Form.

Mit Hilfe dieses reduzierten Zonenschemas kann die ganze Bandstruktur der Elektronen innerhalb der ersten Brillouin-Zone beschrieben werden. Diese Darstellung ist sehr kompakt, hat aber den Vorteil, daß die Struktur als Ganzes dargestellt werden kann. Die nebenstehende Abbildung zeigt noch einmal die 'lineare' Bandstruktur um normalen und zusätzlich im reduzierten Zonenschema.

## 6.10 Bandstrukturen im Dreidimensionalen

Bis hier wurden Informationen über die elektrischen Eigenschaften eines Metalls aus der Darstellung der Energie in Abhängigkeit vom Wellenvektor - dem Zonenschema - gewonnen. Diese Darstellung soll nun im Folgenden auf drei Dimensionen erweitert werden; dazu wird auch die Brillouin-Zone erweitert. Zur Erinnerung: das bisher betrachtete lineare Gitter ist mit einem reziproken Gitter verbunden, dessen Wigner Seitz Zelle (erste Brillouin-Zone) von  $-\pi/a$  bis  $\pi/a$  geht. Im Dreidimensionalen wird die

Darstellung der elektronischen Struktur komplex, denn es muß ein Weg gefunden werden die vier Dimensionen  $(E, k_x, k_y, k_z)$  zu beschreiben. Die Lösung dieses Problems liegt darin nicht den gesamten Raum zu beschreiben, sondern nur einige ausgewählte Richtungen, die eine hohe Symmetrie zeigen. Durch diese Herangehensweise ist es möglich eine  $E(k)$  Darstellung zu finden, die zweidimensional darstellbar ist. Man kann sich die Darstellung so vorstellen, daß die  $E(k)$  Verläufe zwischen jeweils zwei Punkten in der Brillouin-Zone, die eine hohe Symmetrie aufweisen, aufgenommen werden. Diese Linien werden dann anhand für verschiedene Punkte in der Brillouin-Zone gewonnen und anschließend so aneinander gereiht, daß die Abszisse der  $E(k)$  Darstellung einer Trajektorie in der Brillouin-Zone von einem ausgewählten Punkt zum nächsten entspricht.

Für die beiden wichtigsten Raumgruppen ist im Folgenden die Brillouin-Zone gezeigt. Abbildung 6.13 zeigt die Brillouin-Zone eines kubisch flächenzentrierten Gitters im reziproken Raum.

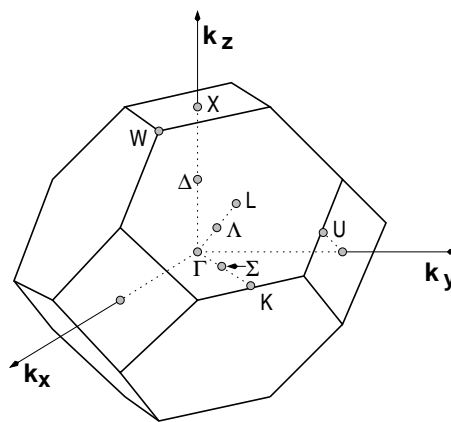


Abbildung 6.13: Brillouin-Zone eines kubisch flächenzentrierten Gitters im reziproken Raum.

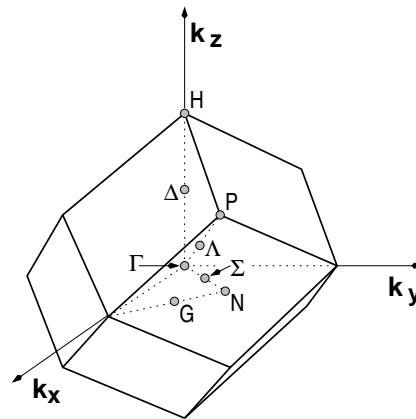
Ausgezeichnete Punkte hoher Symmetrie sind in dieser Darstellung eingetragen. Römische Buchstaben werden üblicherweise für Symmetriepunkte und Griechische für Symmetrierichtungen verwendet. Die Tabelle 6.2 listet die wichtigsten Standard-Symbole und die zugehörige Lage im  $k$ -Raum auf.

$\Gamma$	$\langle 0, 0, 0 \rangle$
X	$\langle 1, 0, 0 \rangle$
W	$\langle 1, \frac{1}{2}, 0 \rangle$
K	$\langle \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0 \rangle$
L	$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle$

Tabelle 6.2: Ausgewählte Lagen in der in Abbildung 6.13 abgebildeten Brillouin-Zone.  $\Gamma$  stellt das Zentrum der Brillouin-Zone dar

In gleicher Weise kann die Brillouin-Zone eines kubisch raumzentrierten Gitters dargestellt werden. Die Symmetriepunkte sind in diesem Fall in Tabelle 6.3 und Abbildung 6.14 angeführt und dargestellt.

$\Gamma$	$\langle 0, 0, 0 \rangle$
H	$\langle 1, 0, 0 \rangle$
P	$\langle 1, 1, 1 \rangle$
N	$\langle 1, 1, 0 \rangle$

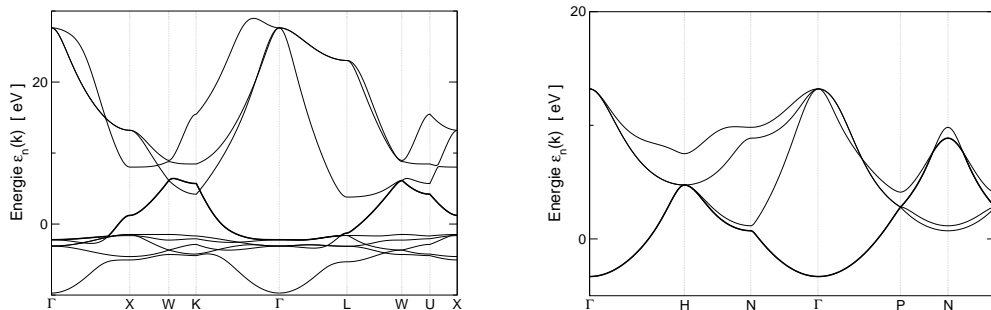


**Tabelle 6.3:** Ausgewählte Lagen in der in Abbildung 6.14 abgebildeten Brillouin-Zone.

**Abbildung 6.14:** Brillouin-Zone eines kubisch raumzentrierten Gitters im reziproken Raum.

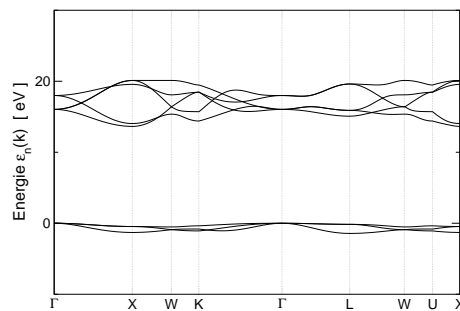
An dieser Stelle sei noch einmal erwähnt, daß ein kubisch raumzentriertes Gitter im realen Raum eine Brillouin-Zone im reziproken Raum aufweist, die eine kubisch flächenzentrierte Symmetrie aufweist - und umgekehrt.

In der folgenden Abbildung 6.15 sind die Bandstrukturen der Metalle Cu (fcc) und Na (bcc) gezeigt.



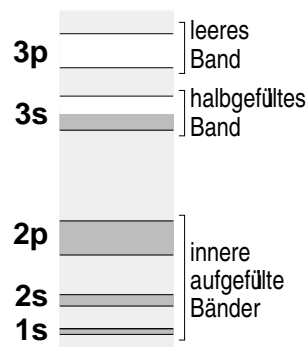
**Abbildung 6.15:** Bandstrukturen von Kupfer (links) und Natrium (rechts). Das stark eingezeichnete Band ist das Valenzband. Mit freundlicher Unterstützung von Manuel Richter und FPLO

Die Abszissen, im Fall von Natrium ist das  $\Gamma$ -H-N- $\Gamma$ -P-N-P, beschreiben die Trajektorie durch die Brillouin-Zone. Diese 'Spagetti-Bilder' zeigen verschiedenen Energiebänder, deren Energie stark vom Ort abhängig ist. Fett eingezeichnet sind die Valenzbänder und das sind ja bekanntlich die Relevanten. Die Energie von 0eV kennzeichnet die Fermienergie. In beiden Metallen kreuzt das Valenzband die Fermienergie, was ein Zeichen für die Leitfähigkeit ist. Würde kein Band diese Energie kreuzen, so würde es sich um einen Isolator handeln, wie es im Bandstrukturbild von Ar (fcc) der Fall ist. Dies ist in Abbildung 6.16 dargestellt



**Abbildung 6.16:** Bandstruktur von Argon. Das Valenzband ist dick dargestellt. Mit freundlicher Unterstützung von Manuel Richter und FPLO

Das Valenzband liegt an der Fermienergie, das darüber liegende Leitungsband ist weit entfernt und leer. Doch zurück zu den Metallen: Ein weiteres Merkmal für ein Metall ist die Steigung des Valenzbandes an der Fermienergie, diese ist viel größer im Fall von Kupfer im Vergleich zu Natrium. Natrium besitzt 11 Elektronen, diese füllen die inneren Bänder  $1s$ ,  $2s$  und  $2p$  vollständig auf. Die  $s$ -Bänder sind mit 2 Elektronen voll besetzt, das  $p$ -Band mit 6 Elektronen. Das  $3s$ -Band ist mit 1 einem Elektron genau halb gefüllt. Dieses Band ist das Valenzband (im Bandstrukturbild fett eingezeichnet).



**Abbildung 6.17:** Eindimensionale Bandstruktur von Natrium, beziehungsweise Besetzung der Zustände.

Wegen des Pauli-Prinzips geht eine mögliche Anregung der Elektronen nur für freie Zustände, also z.B. innerhalb des  $3s$ -Bandes. Argon hingegen hat 18 Elektronen in folgender Konfiguration:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ . Sämtliche Bänder sind vollständig aufgefüllt oder gänzlich leer. Damit kann kein Elektron ohne immens große Anregung in eine Leerstelle angeregt werden. Argon ist ein Isolator. Ein angelegtes Feld kann die Elektronen im Valenzband nicht beschleunigen, da es keine freien Plätze gibt. Die einzige Möglichkeit einen Strom fließen zu lassen besteht darin, ein Elektron auf das leere Leitungsband anzuheben. Im Fall von Argon sind dazu etwa  $15\text{eV}$ , im Fall von Diamant  $6\text{eV}$  erforderlich. Beide sind gute Isolatoren. Bei Silizium und Germanium hat man ähnliche Bandschemata, die Abstände zwischen dem Valenzband und dem Leitungsband sind jedoch vergleichsweise klein. (Si:  $1,14\text{eV}$ ; Ge:  $0,67\text{eV}$ ) Durch thermische Anregung ( $\approx 1\text{eV}$ ) kann das oberste Elektron im Valenzband in das Leitungsband angeregt werden. Dort führt das Elektron zu metallischer Leitung. Mit zunehmender Temperatur ( $\hat{=}$  steigender thermischer Anregung) nimmt auch die Leitfähigkeit zu. So steigt die Zahl der Elektronen um  $10^6$ , wenn bei einem Halbleiter die Temperatur von  $T=250\text{K}$  auf  $450\text{K}$  erhöht wird. Die Leitfähigkeit von Halbleitern kann auch durch Dotieren der Halbleiter mit Elementen mit zusätzlichen Elektronen erhöht werden. Doch dies führt an dieser Stelle zu weit (vgl. Vorlesung über die Funktionswerkstoffe der Elektrotechnik).

### ZUM NACHDENKEN:

- Warum reicht die erste Brillouin-Zone aus, um die Eigenschaften eines Kristalls zu beschreiben?
- Welche Informationen sind in Bandstruktur-Bildern enthalten?