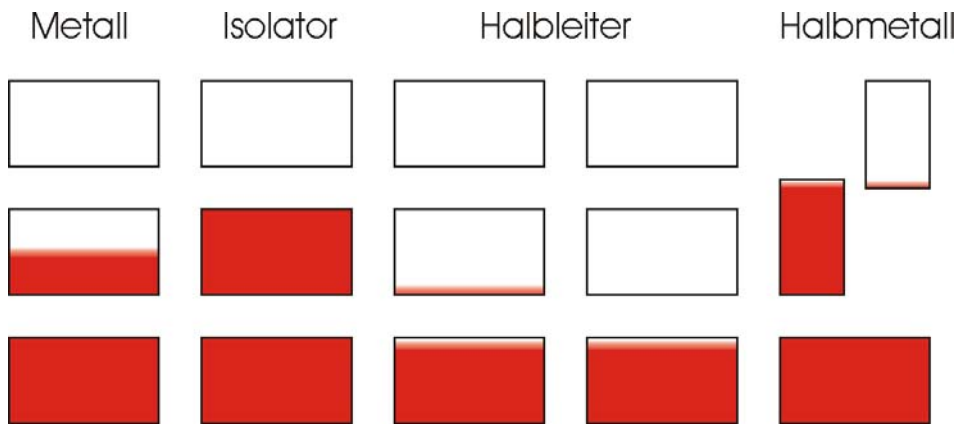


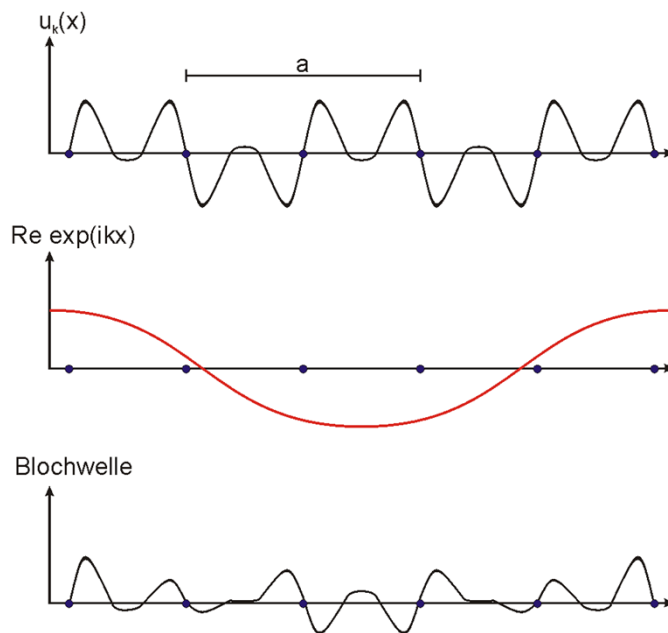
6 / 1

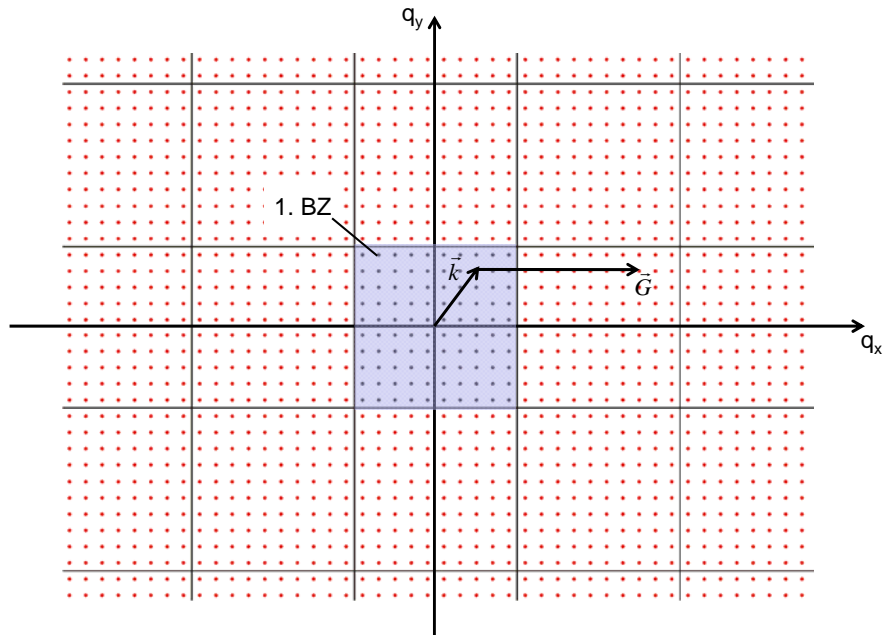
Energiebänder



6 / 2

Bloch-Funktionen





**Allgemeine Symmetrie-Eigenschaften von Elektronen im Gitter:**

$$\text{Gitterperiodisches Potential: } V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} \exp(i\vec{G}\vec{r})$$

**Einelektronenwellenfunktionen sind gitterperiodisch modulierte ebene Wellen (Bloch-Funktionen):**

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_n)$$

Darstellung über Fourierreihen im reziproken Raum:

$$\text{Wellenfunktionen: } \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

$$\text{Schrödingergleichung: } \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon \right) c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

Für jedes  $\vec{k}$  in 1. Brillouinzone eine Lösung  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  mit:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} \exp(-i\vec{G}\vec{r})$$

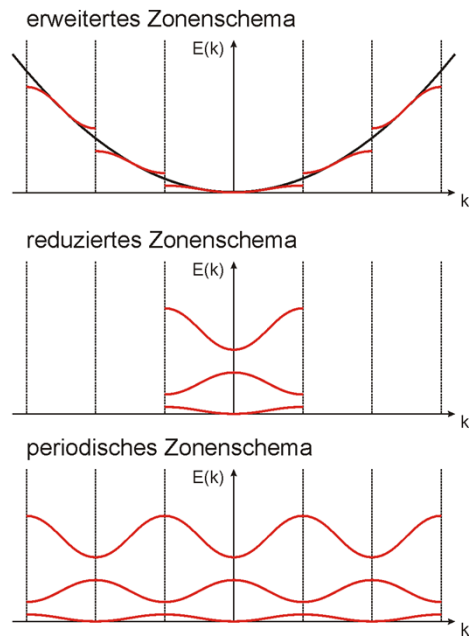
Bloch-Funktionen und Energie-Eigenwerte periodisch im  $\vec{k}$  Raum:

$$\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k} + \vec{G})$$

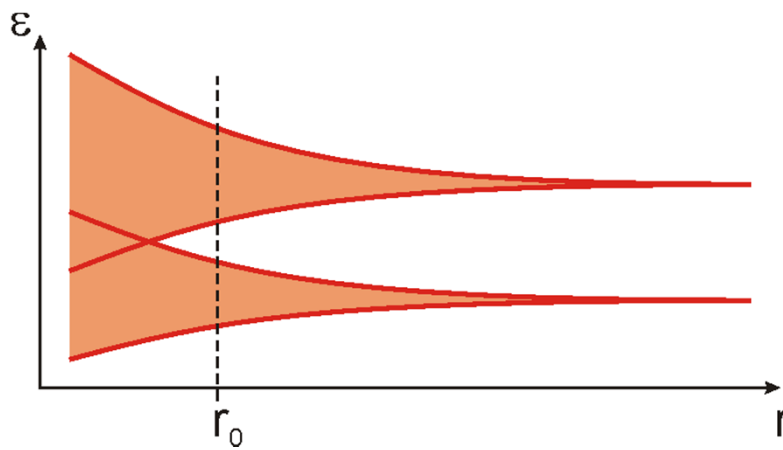
6 / 5

## Bandstruktur



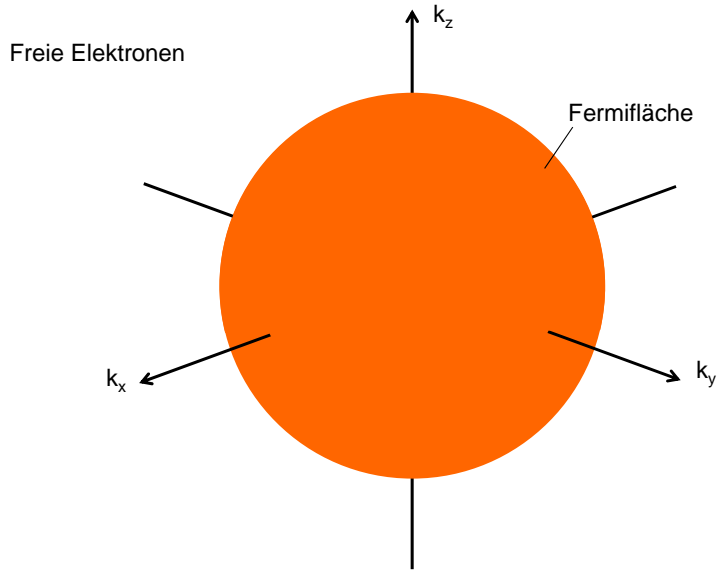
6 / 6

## Elektrische Leitfähigkeit



6 / 7

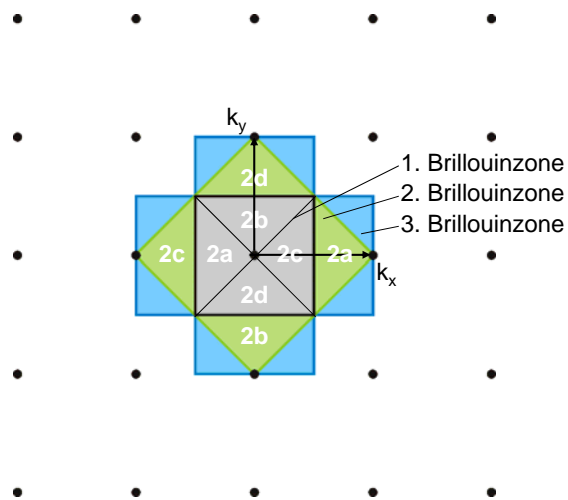
## Fermiflächen



6 / 8

## Brillouinzone

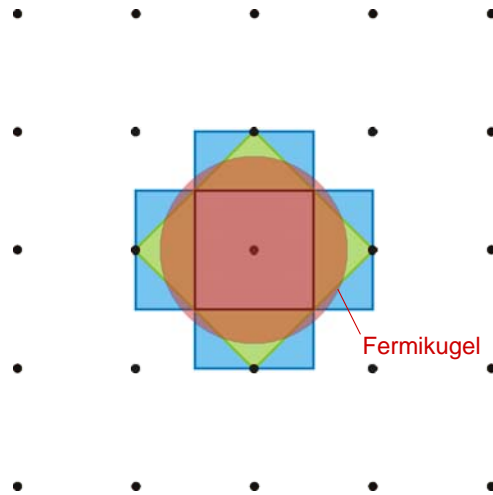
Beispiel: 2D quadratisches Gitter



6 / 9

## Brillouinzonen und Fermiflächen

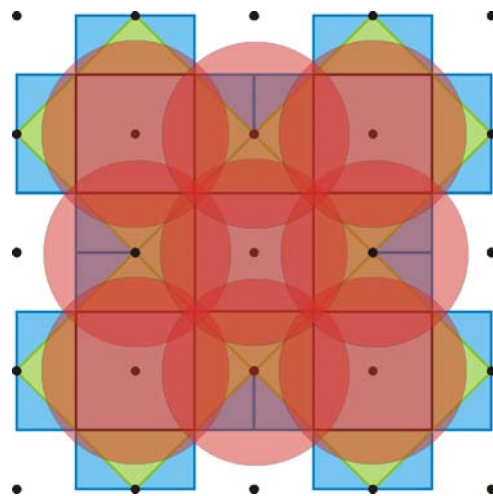
Beispiel: 2D quadratisches Gitter + freies Elektronengas  
„erweitertes Zonenschema“



6 / 10

## Brillouinzonen und Fermiflächen

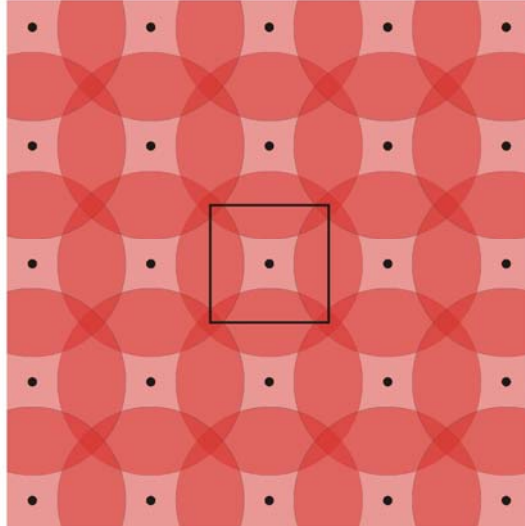
Beispiel: 2D quadratisches Gitter + freies Elektronengas  
gitterperiodische Fortsetzung



6 / 11

## Brillouinzonen und Fermiflächen

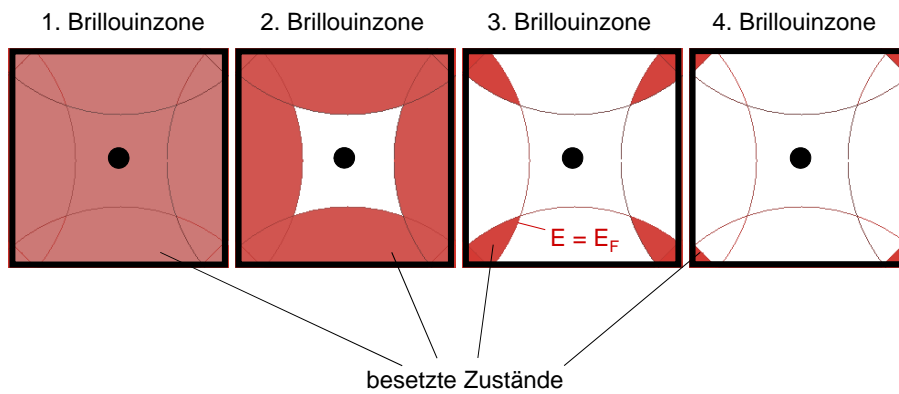
Beispiel: 2D quadratisches Gitter + freies Elektronengas  
„periodisches Zonenschema“



6 / 12

## Brillouinzonen und Fermiflächen

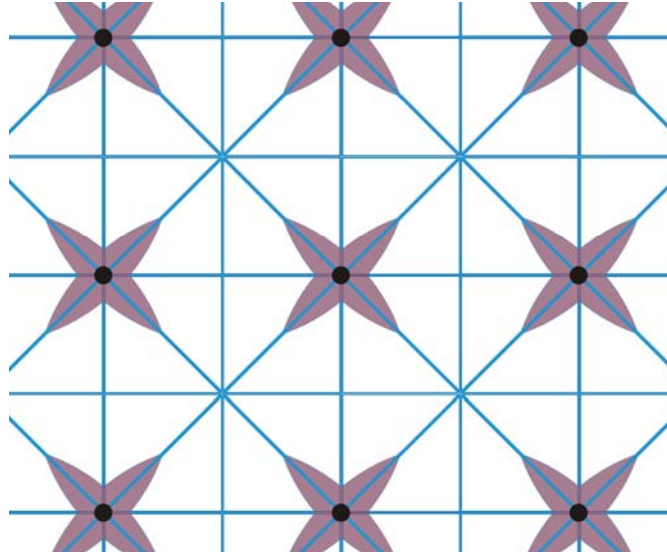
Beispiel: 2D quadratisches Gitter + freies Elektronengas  
„reduziertes Zonenschema“



6 / 13

## Brillouinzonen und Fermiflächen

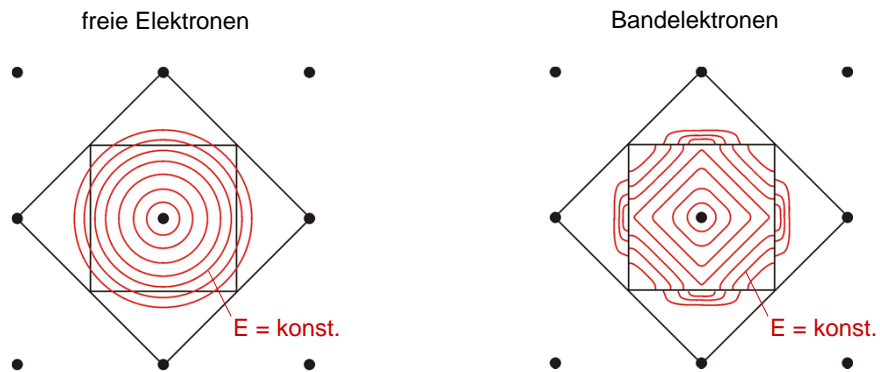
Beispiel: 2D quadratisches Gitter + freies Elektronengas  
3. Brillouinzone im „periodischen Zonenschema“



6 / 14

## Brillouinzonen und Fermiflächen

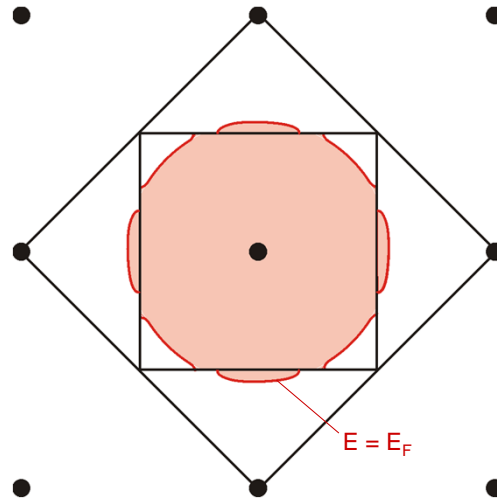
Beispiel: 2D quadratisches Gitter



6 / 15

## Brillouinzonen und Fermiflächen

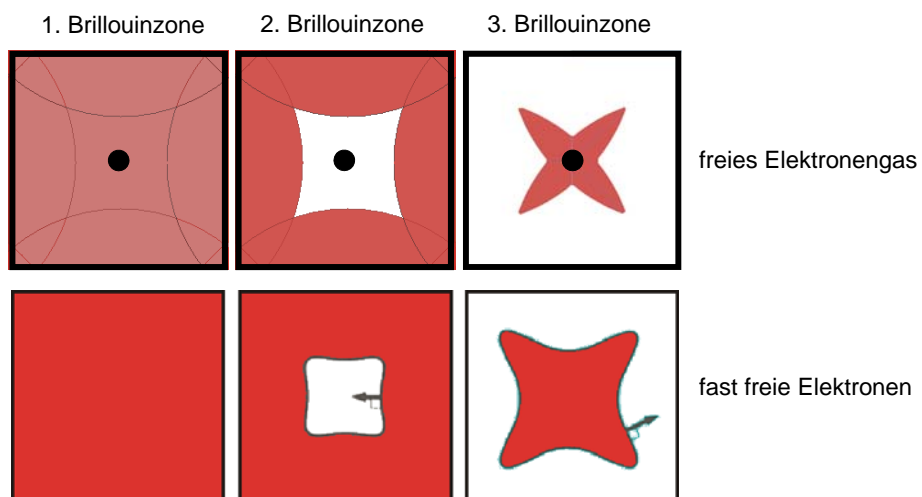
Beispiel: 2D quadratisches Gitter + fast freie Elektronen



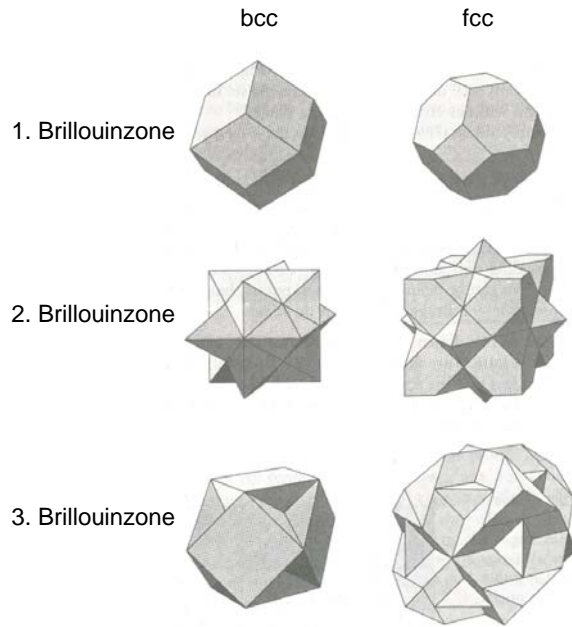
6 / 16

## Brillouinzonen und Fermiflächen

Beispiel: 2D quadratisches Gitter

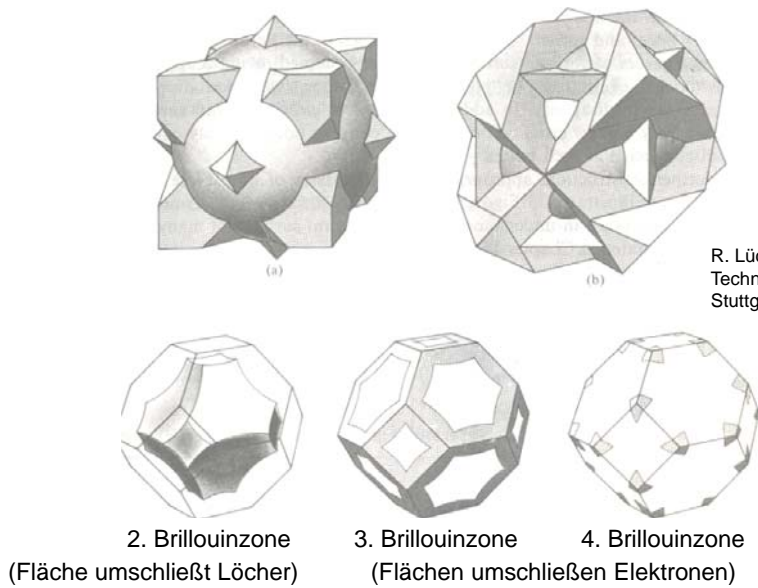






R. Lück, Doktorarbeit,  
Technische Hochschule,  
Stuttgart, 1965

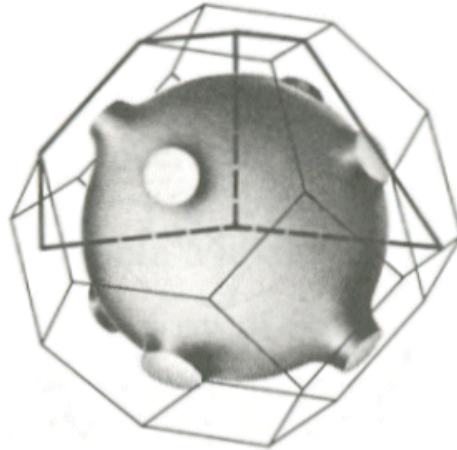
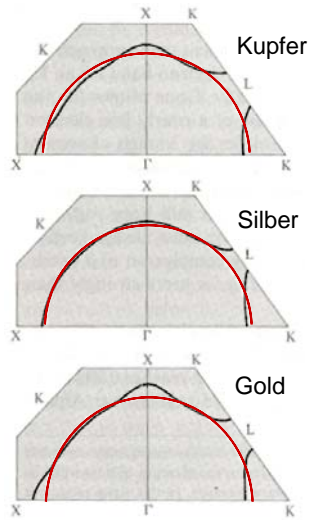
fcc + freies Elektronengas



R. Lück, Doktorarbeit,  
Technische Hochschule,  
Stuttgart, 1965

6 / 19

### Brillouinzonen und Fermiflächen in 3D



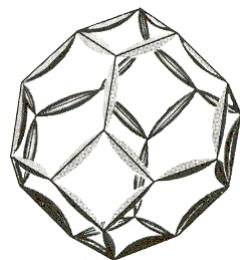
D. Shoenberg, D.J. Roaf, *Phil. Trans. Soc.*, **255** (1962) 85

6 / 20

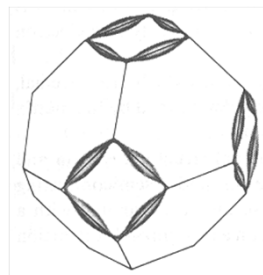
### Brillouinzonen und Fermiflächen in 3D

3. Brillouinzonen von:

fcc-Gitter mit  
3-wertigem freien Elektronengas



Aluminium

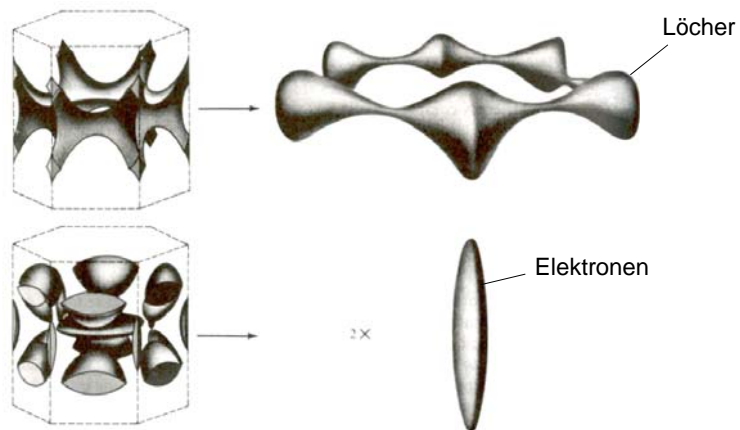


N.W. Ashcroft, *Phil.Mag.* **8**, 2055 (1963)

Brillouinzonen von:

hcp-Gitter ( $\rightarrow$  2 Atome/EZ) mit  
freien Elektronengas (2 El./Atom)

Beryllium



T.L. Loucks, P.H. Cutler, *Phys. Rev.*, **133** (1964) A819