Zusammenfassung vom 19.10.2010

Klassifizierung der Materialien aufgrund der Bandfüllung

Anzahl Zustände : *jedes Energieband hat 2N Zustände*

Isolator: *letztes aufgefülltes Band ist exakt voll*
große Bandlücke: $E_g \geq 1$ eV

Halbleiter : *letztes aufgefülltes Band ist exakt voll*
kleine Bandlücke: $E_g \leq 1$ eV

Metall : *letztes aufgefülltes Band ca. halb voll*

Halbmetall: *das Maximum des letzten gefüllten Bandes liegt lokal im k-Raum etwas höher als das Minimum des nächst höheren Bandes. Darum ist das letzte gefüllte Band nicht ganz voll und das nächst höhere zu einem kleinen Teil gefüllt.*

Zonenschema:

erweitertes Zonenschema: *jedes Teilband ist in einer eigenen Brillouin-Zone dargestellt*

reduziertes Zonenschema: *alle Teilbänder sind in der 1. B.Z. dargestellt*

periodisches Zonenschema: *alle Teilbänder sind in jeder B.Z. dargestellt*

Zusammenfassung vom 19.10.2010

Konstruktion der Fermi-Fläche im reziproken Gitter durch „Falten“ in die erste Brillouin-Zone

➔ *Brillouin-Zonen (= Wigner-Seitz-Zellen) im reziproken Gitter konstruieren*

➔ *Fermi-Kugel im reziproken Gitter zentriert um die 1. Brillouin-Zone einzeichnen*

➔ *Fermi-Kugel von der n. B.Z. auf die 1. B.Z. abbilden, indem die Teilbereiche der n. B.Z. entlang eines reziproken Gittervektors in die 1. B.Z. verschoben werden (= „Falten“ in die 1. B.Z.)*

➔ *Erweiterung auf periodisches Zonenschema, um Fermi-Fläche zu finden*

Harrison-Konstruktion der Fermi-Fläche

➔ *Fermi-Kugeln im reziproken Gitter um jeden Gitterpunkt einzeichnen*

➔ *Fermi-Fläche in der n. Brillouin-Zone ist die Oberfläche desjenigen Teilbereichs des Volumens, der gleichzeitig in n Fermi-Kugeln liegt*

Einfluss des Potentials auf Fermi-Fläche

➔ *Entartungen am Zonenrand werden aufgehoben*

➔ *Fermi-Fläche bricht auf*

➔ *Fermi-Fläche wird i.d.R. so verbogen, dass sie den Rand der Brillouin-Zone senkrecht schneidet*

➔ *Rundung von Kanten und Ecken der Fermi-Fläche*