

Zusammenfassung vom 18.10.2011

Klassifizierung der Materialien aufgrund der Bandfüllung

Anzahl Zustände : jedes Energieband hat $2N$ Zustände

Isolator: letztes aufgefülltes Band ist **exakt voll** (bei $T = 0$ K)
große Bandlücke: $E_g \geq 1$ eV

Halbleiter : letztes aufgefülltes Band ist **exakt voll** (bei $T = 0$ K)
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

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