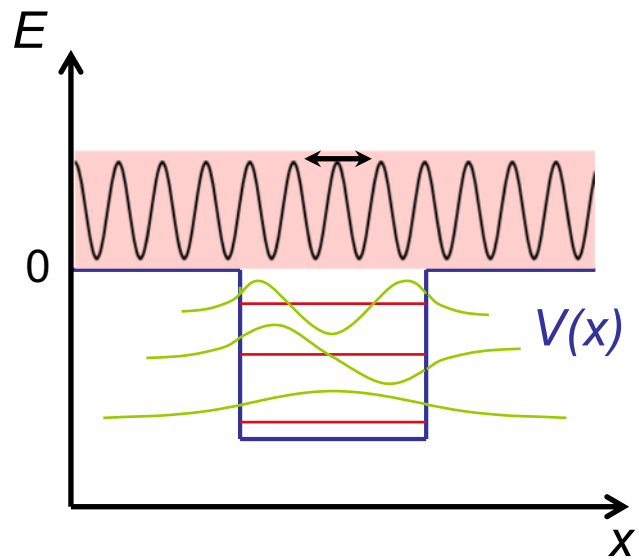


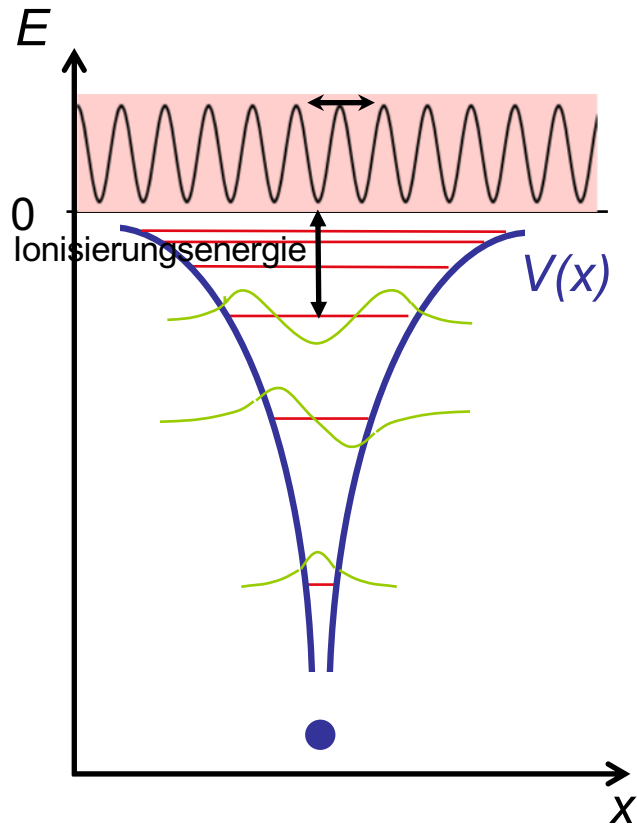
1D-Potentialtopf



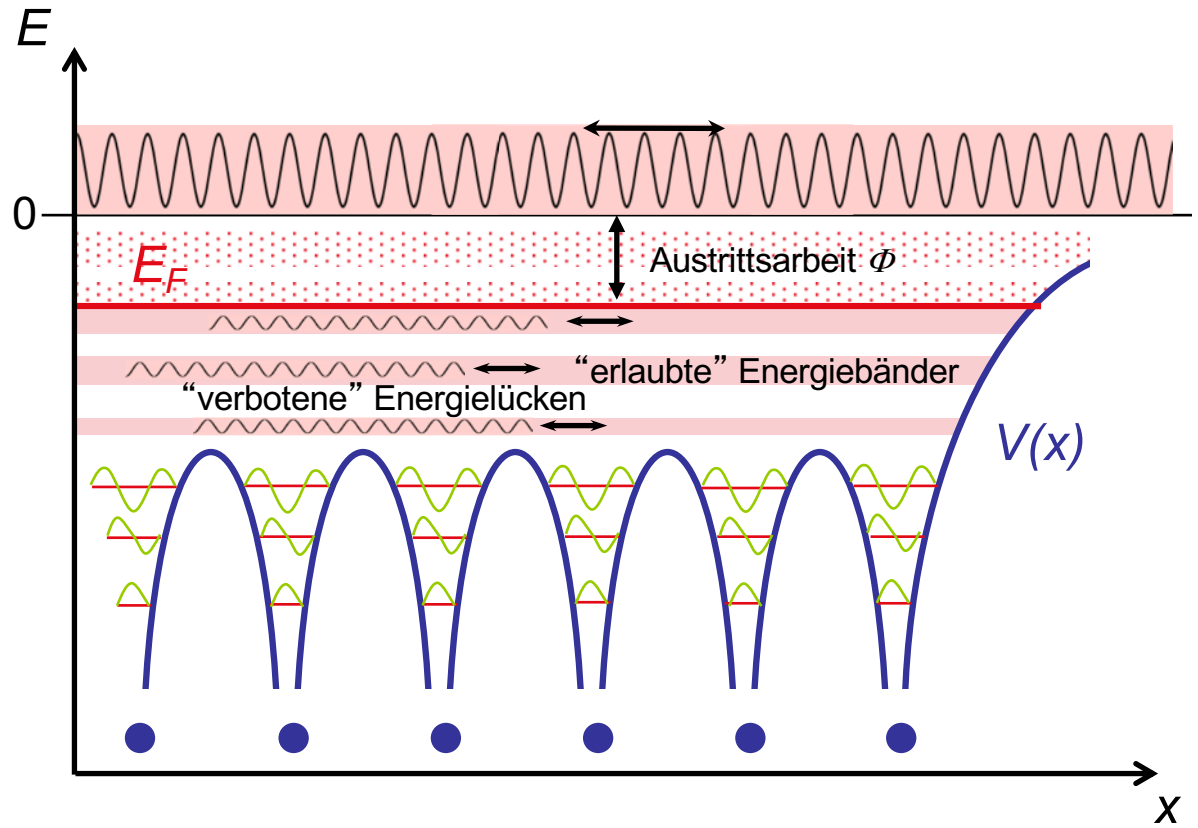
— diskrete Energie-Eigenwerte
— lokalisierte Wellenfunktionen

 kontinuierliches Energiespektrum
laufende Wellen

freies Atom



Periodisches Potential



 diskrete Energie-Eigenwerte
 lokalisierte Wellenfunktionen

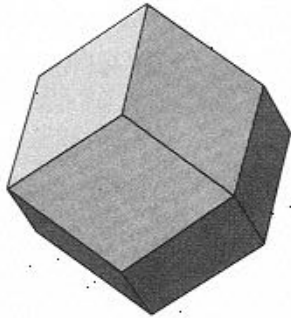
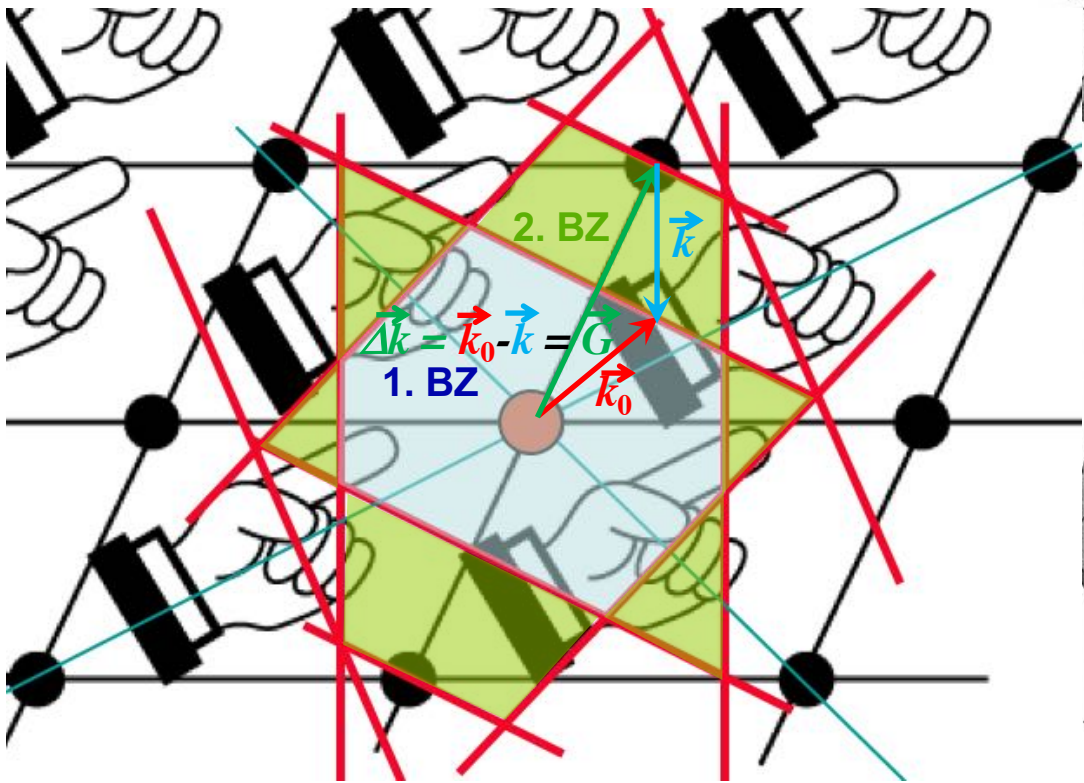
tiefer liegende atomare Orbitale (z.B. 1s, 2s, 2p,....)

 kontinuierliches Energiespektrum
 laufende Wellen

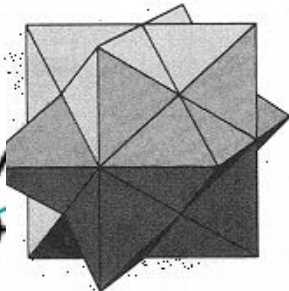
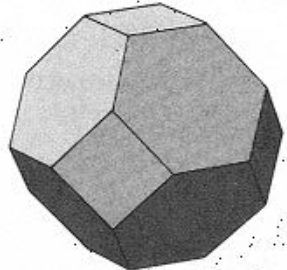
Brillouin-Zonen:

Brillouin Zonenränder im reziproken Raum:

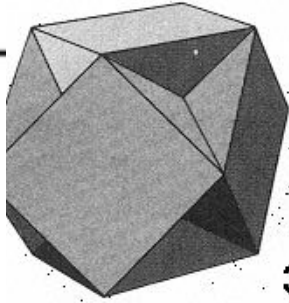
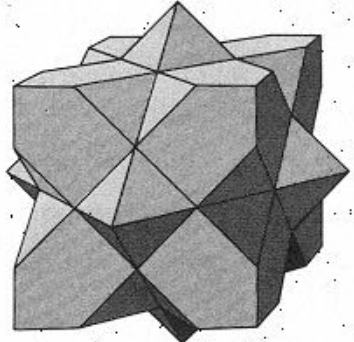
Geometrischer Ort aller Wellenvektoren k_0 , welche die Bragg-Bedingung erfüllen



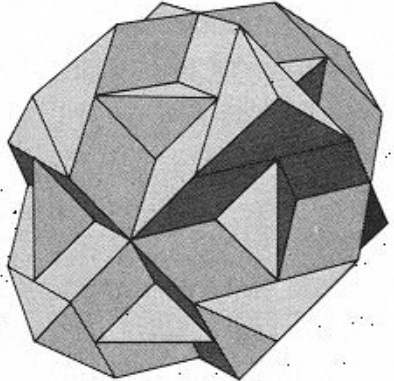
1. BZ



2. BZ



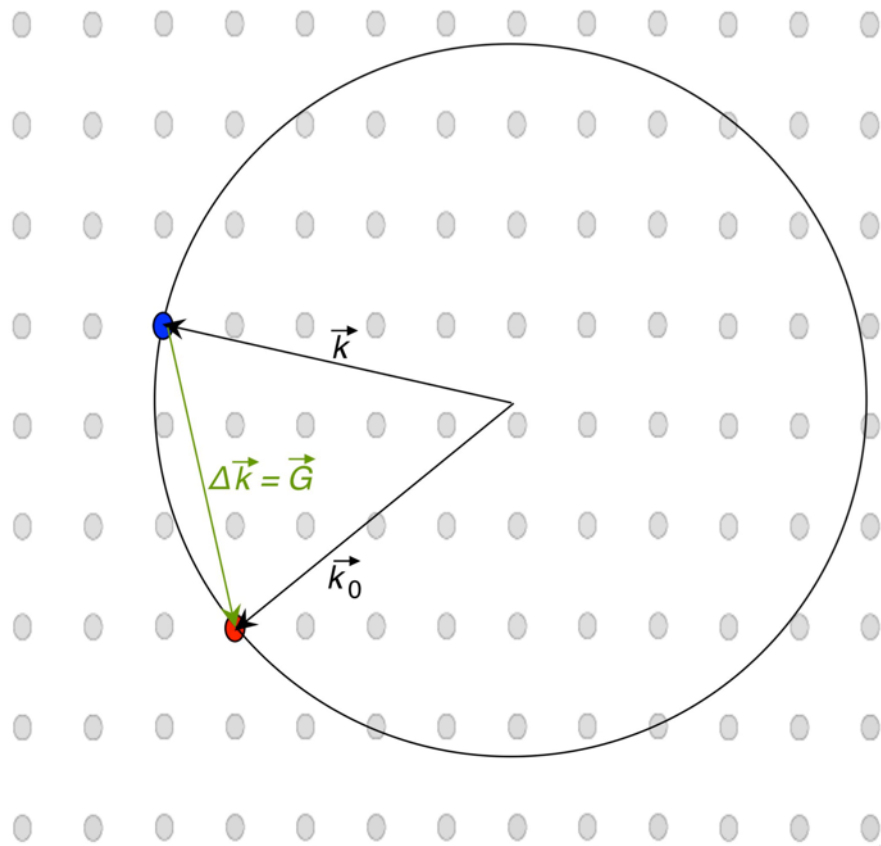
3. BZ



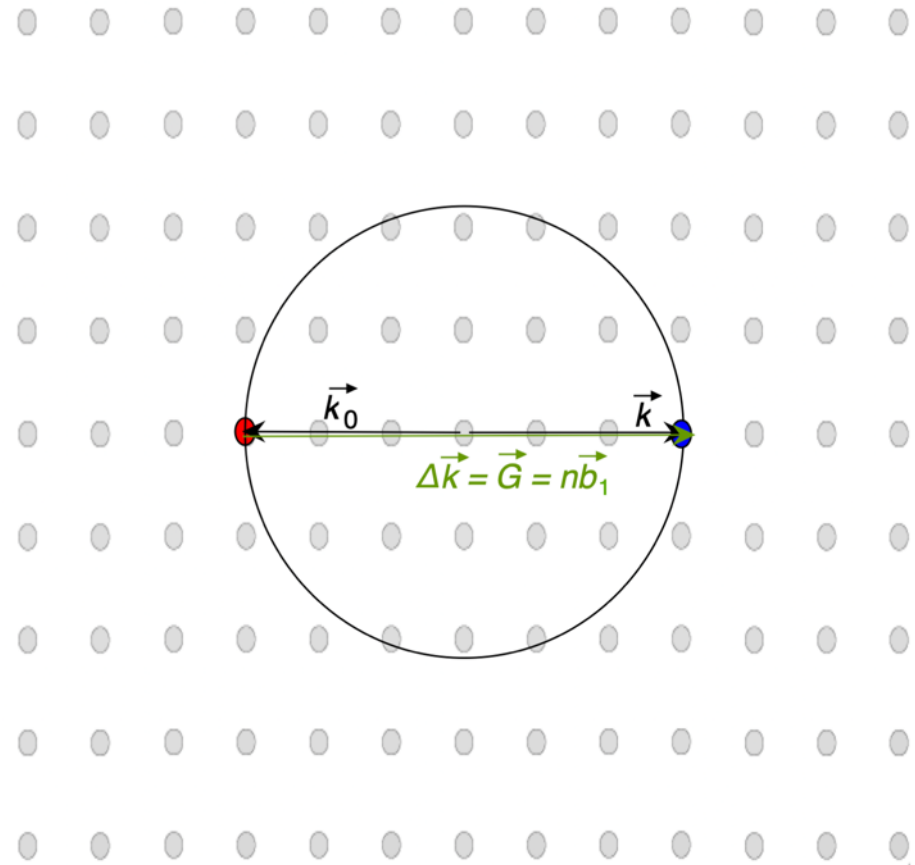
bcc

fcc

Bragg Reflexion

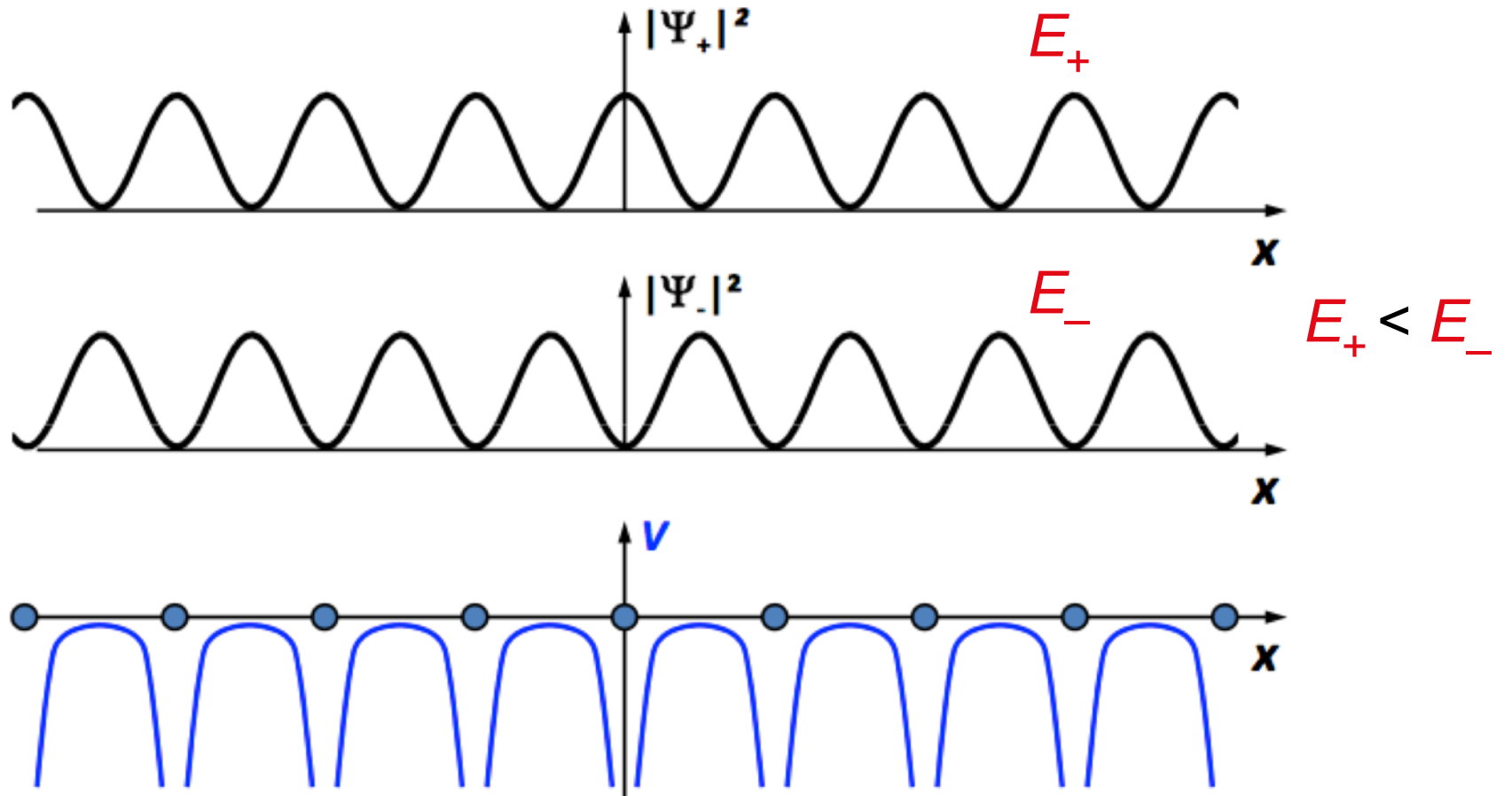


Reziprokes Gitter

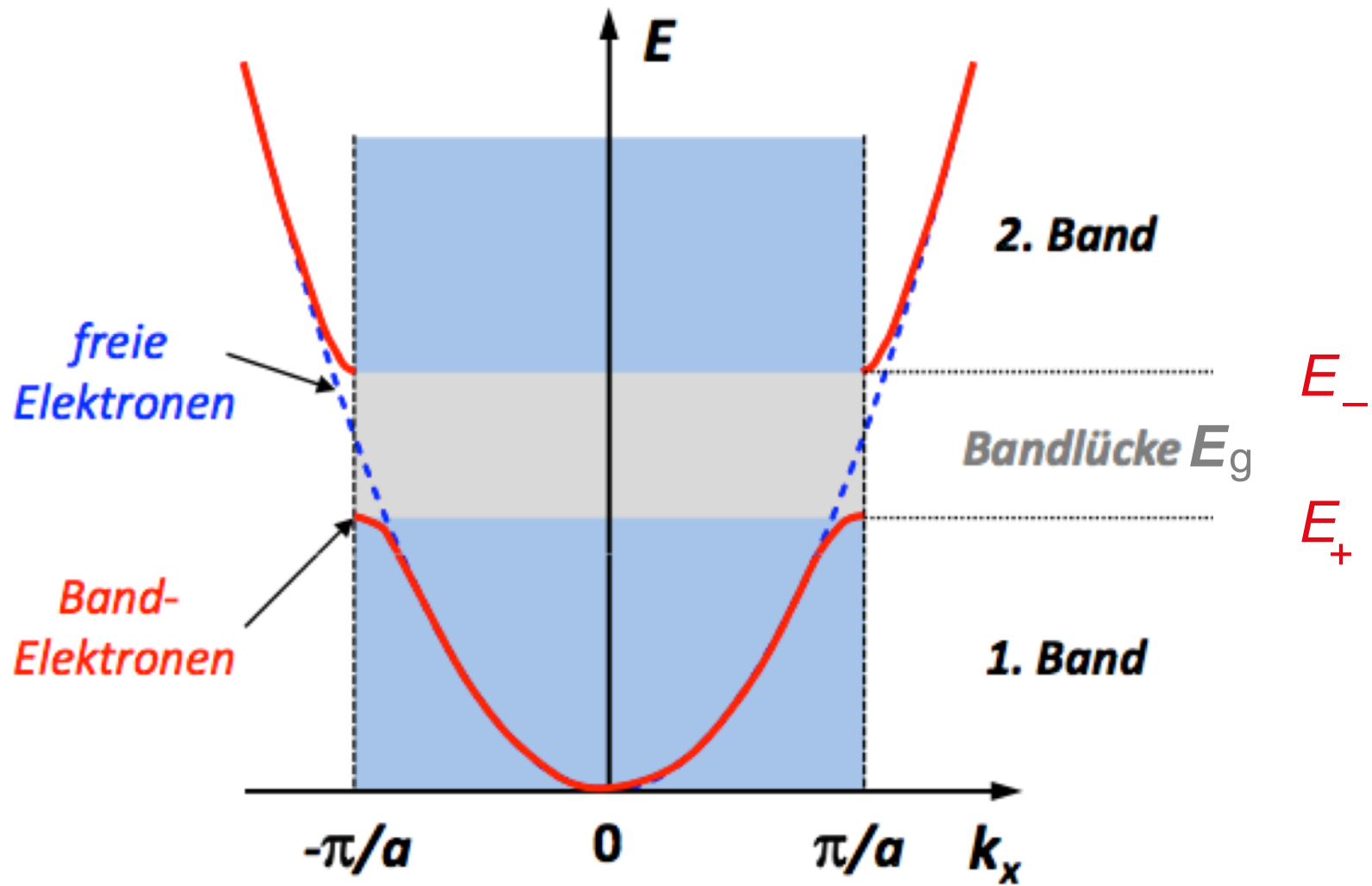


vollständige Rückwärts-Reflexion:
stehende Wellen

Stehende Wellen in 1D für $k = \pm b/2 = \pm \pi/a$

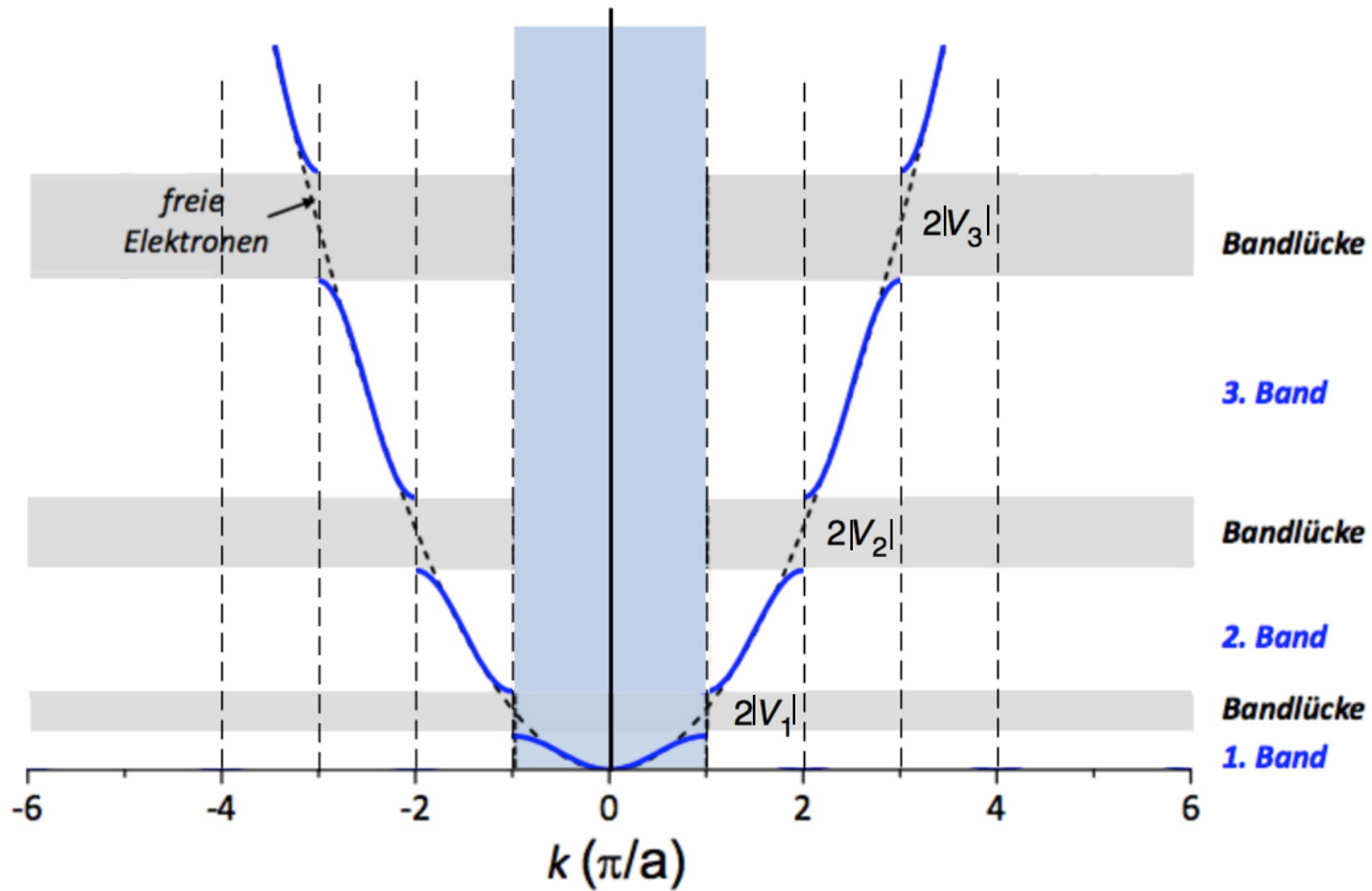


Stehende Wellen in 1D für $k = \pm b/2 = \pm \pi/a$

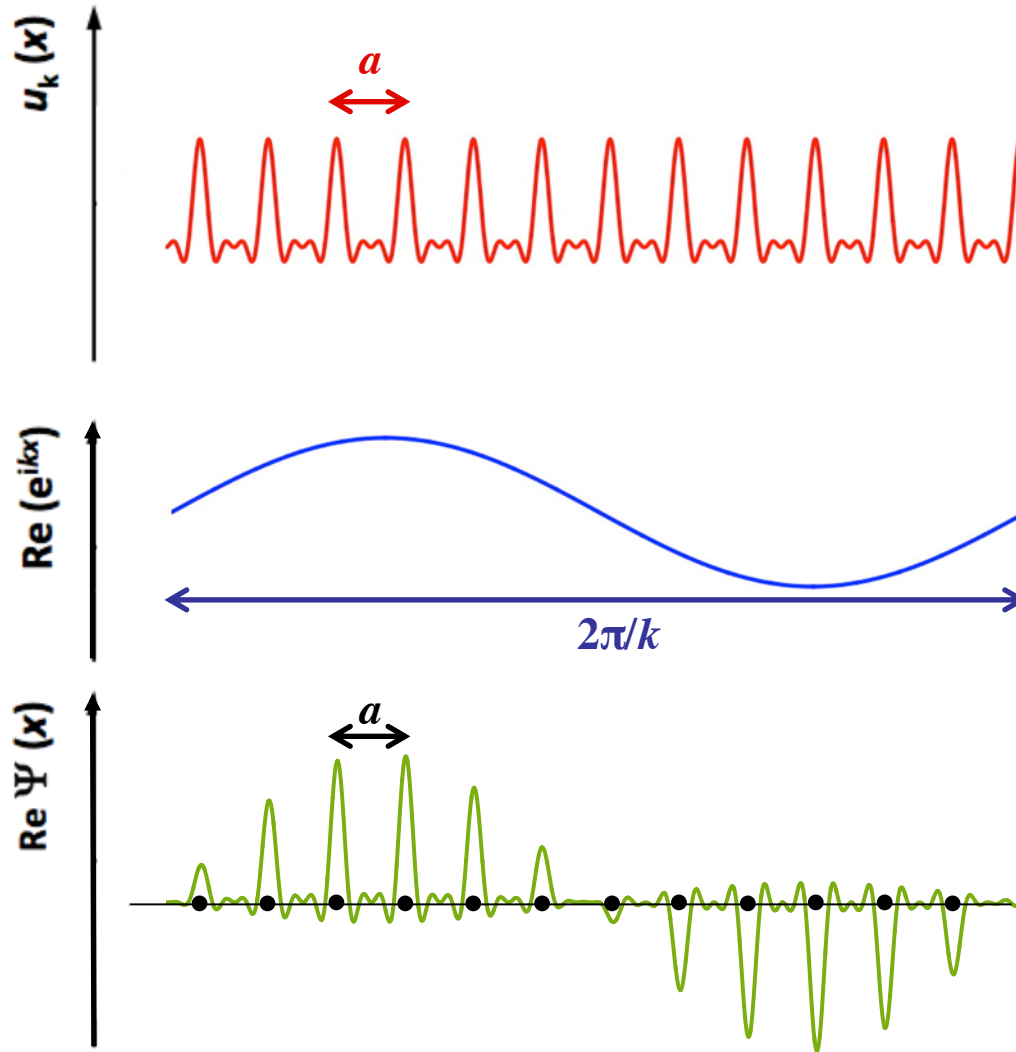


Energiebänder und Energielücken

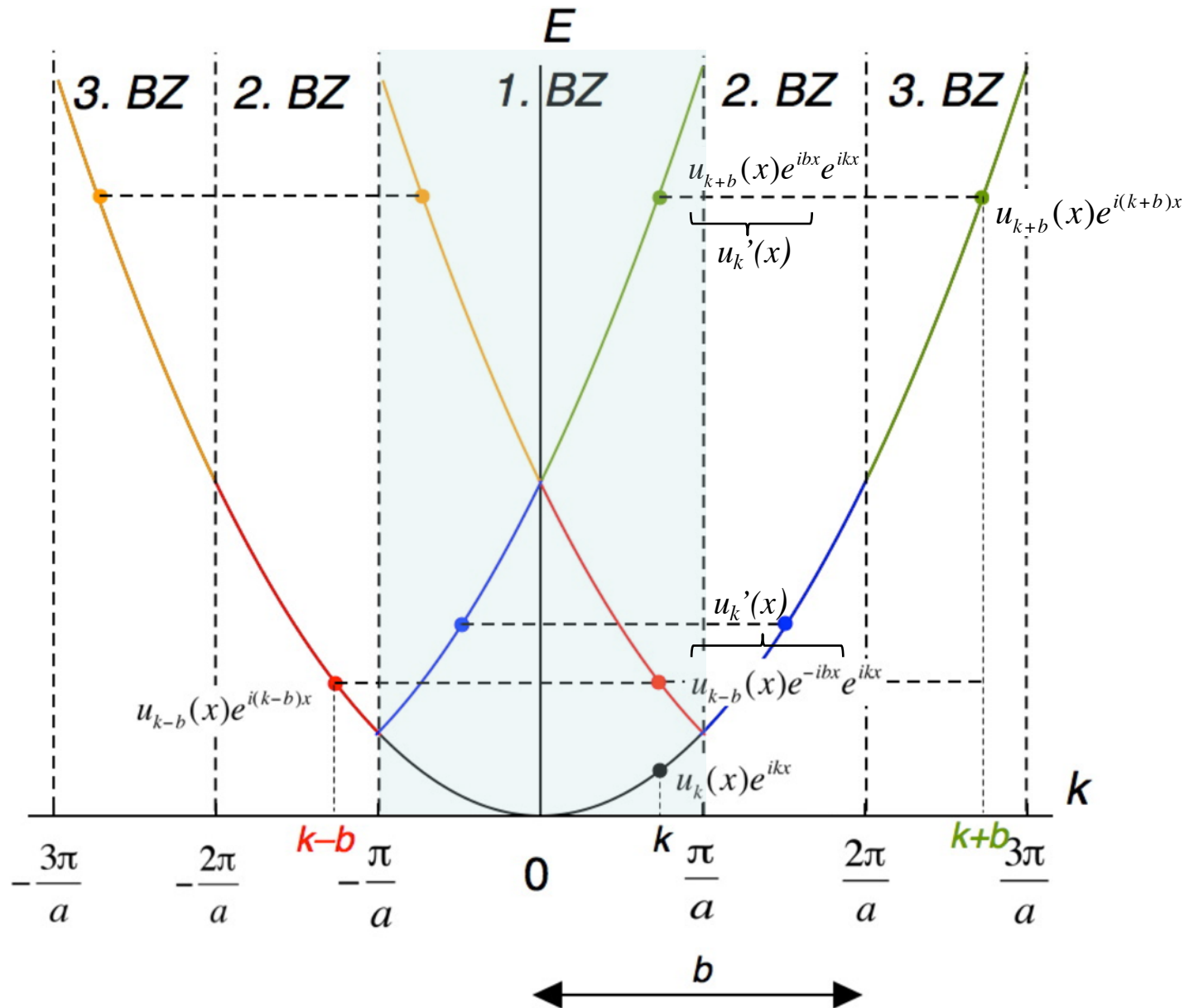
im 1D periodischen Potential $V(x) = \sum_n \exp(2\pi i n x / a) V_n$



Bloch-Welle

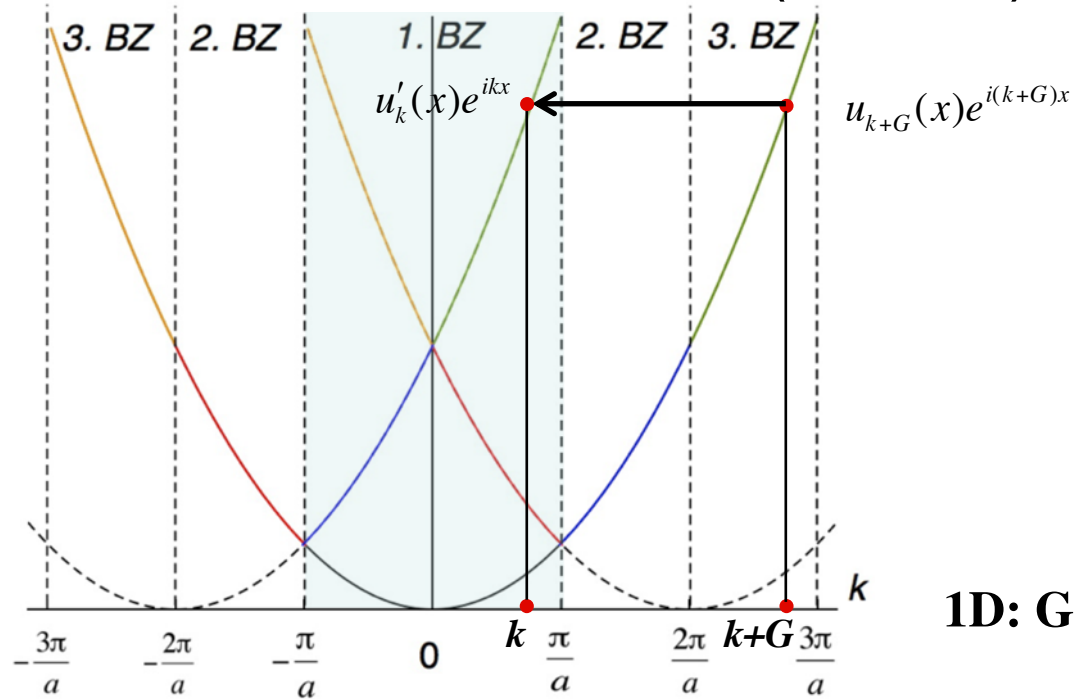


Reduziertes Zonenschema (für $V=0$)

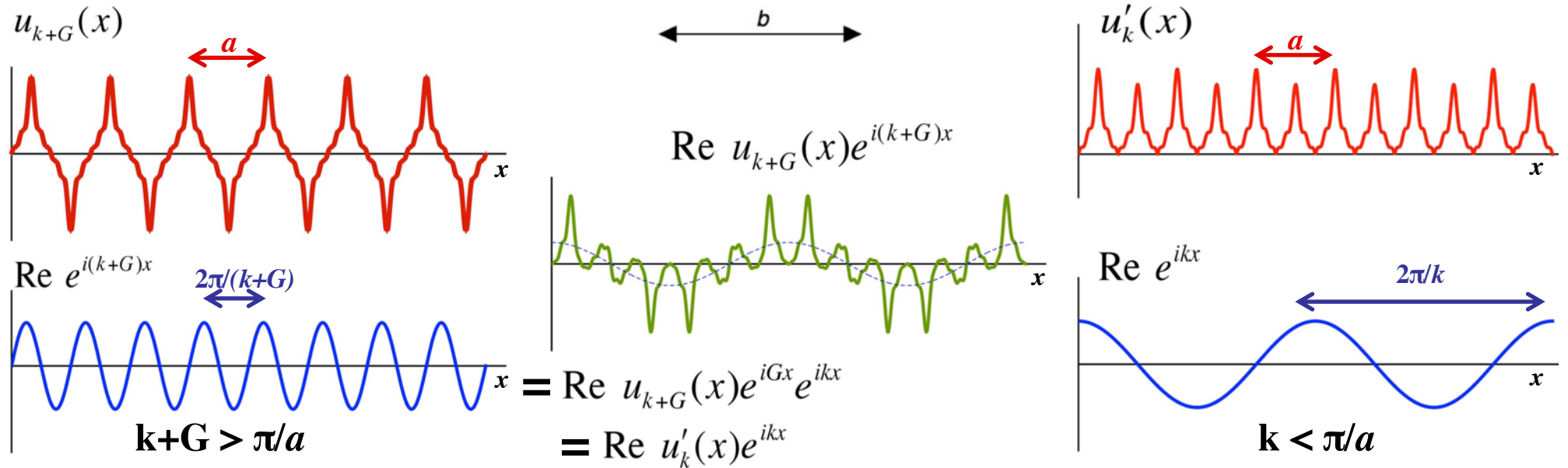


Reduziertes Zonenschema (für $V=0$)

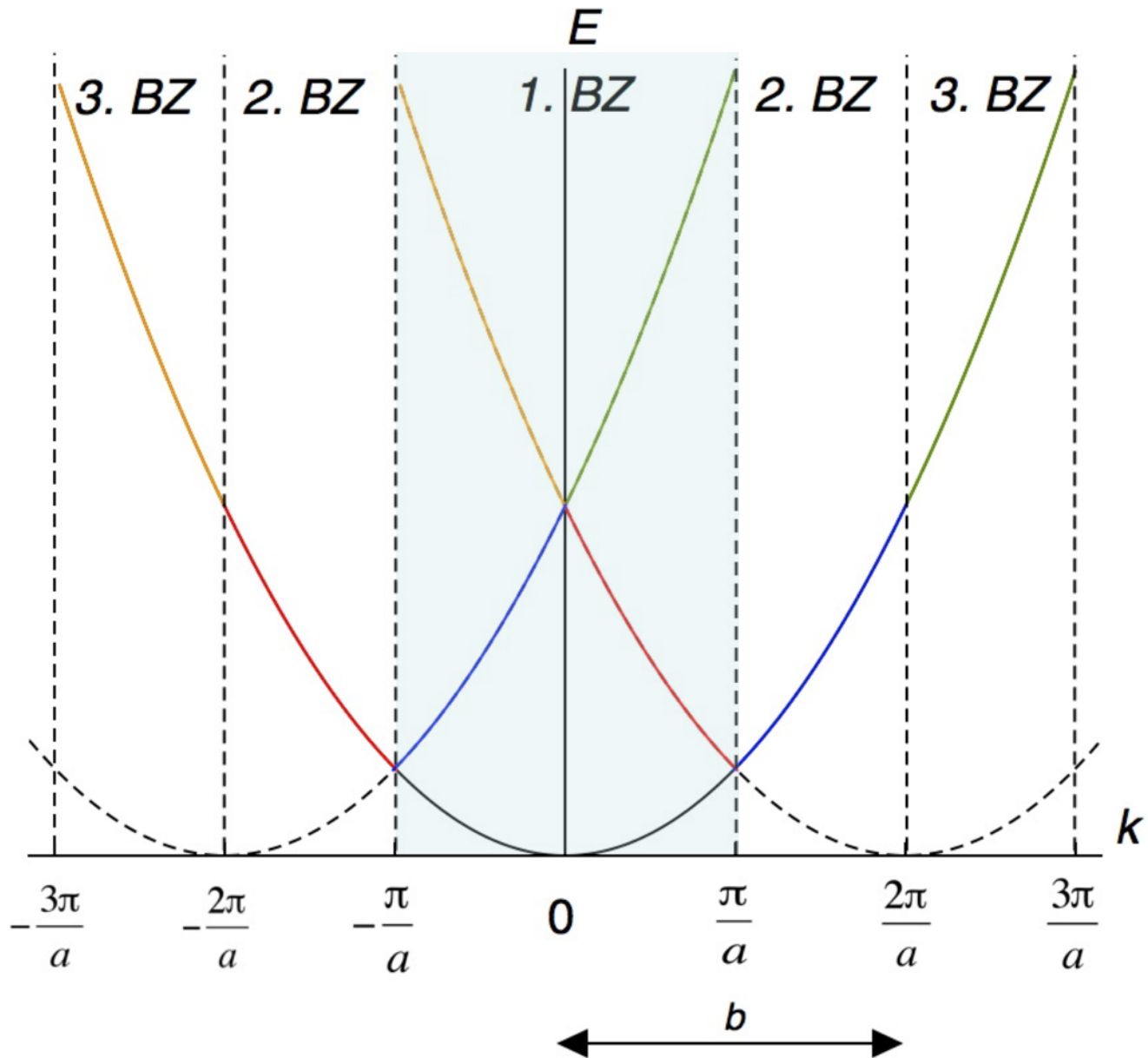
„Zurückklappen“



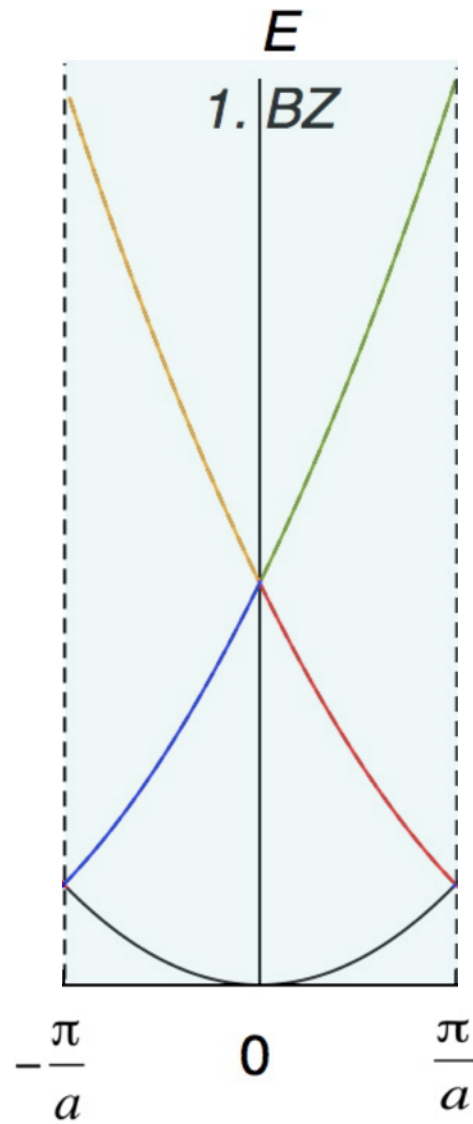
1D: $G = nb = n2\pi/a$



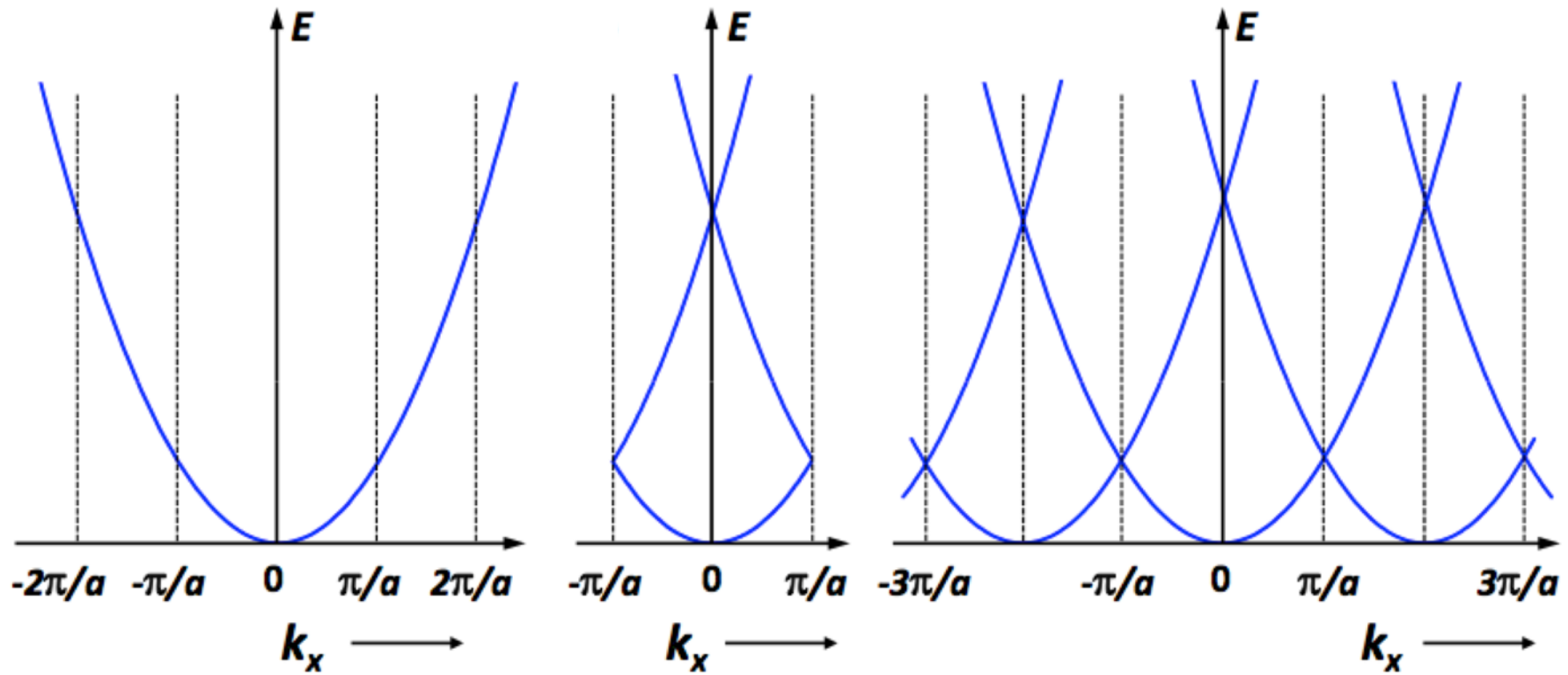
Periodisches Zonenschema (für $V=0$)



Reduziertes Zonenschema (für $V=0$)



Zonenschemata (für $V=0$)

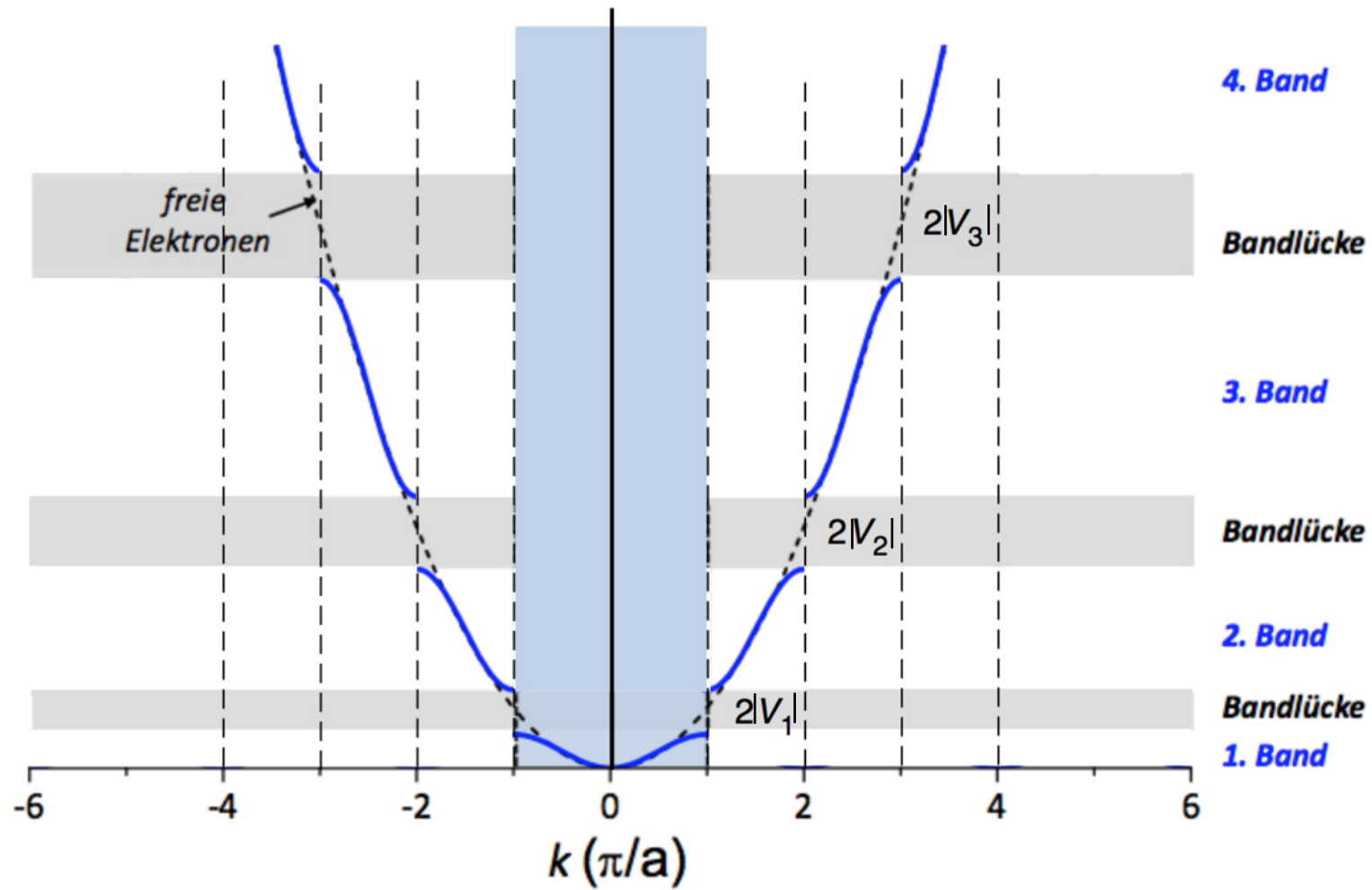


Ausgedehntes Zonenschema

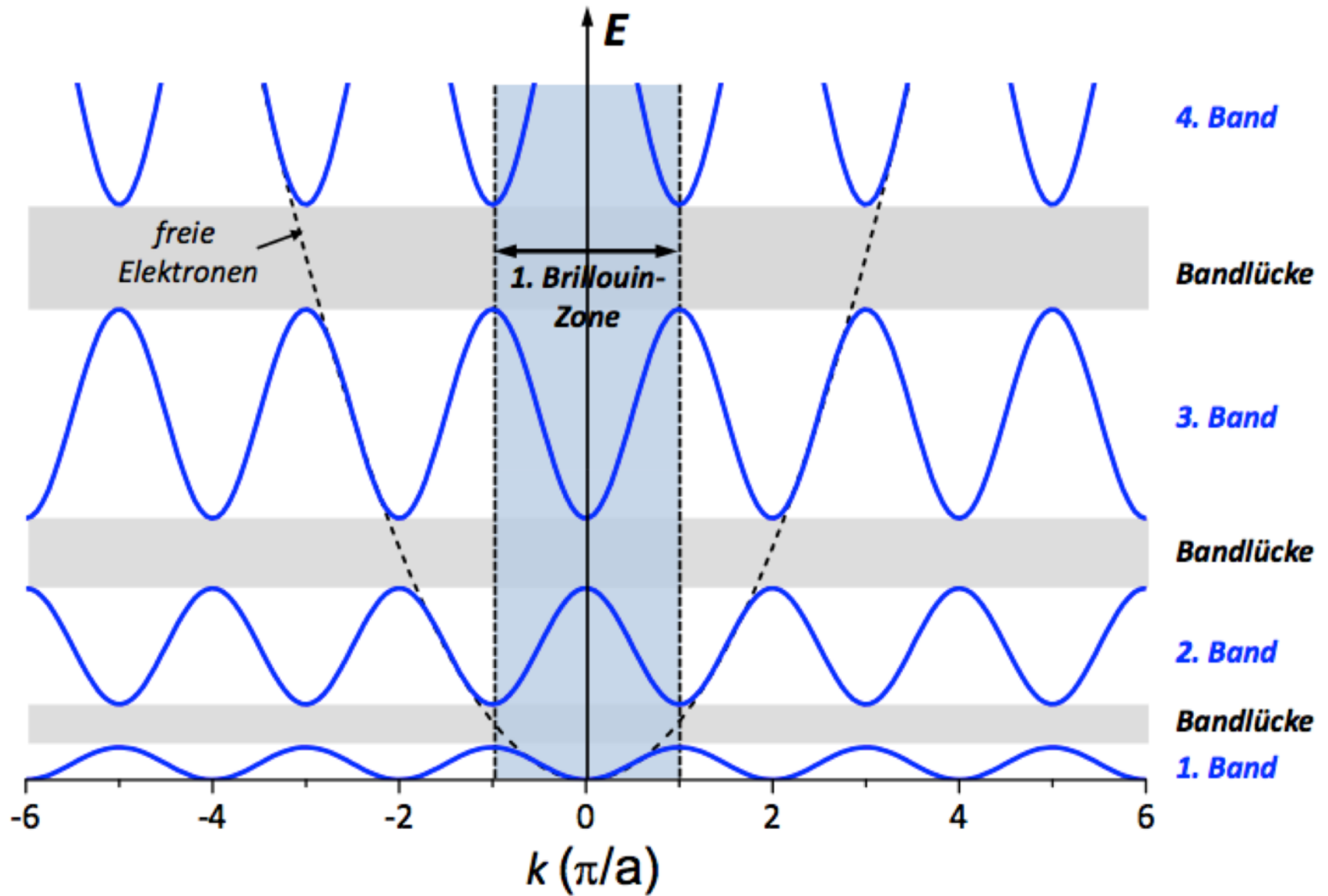
Reduziertes Zonenschema

Periodisches Zonenschema

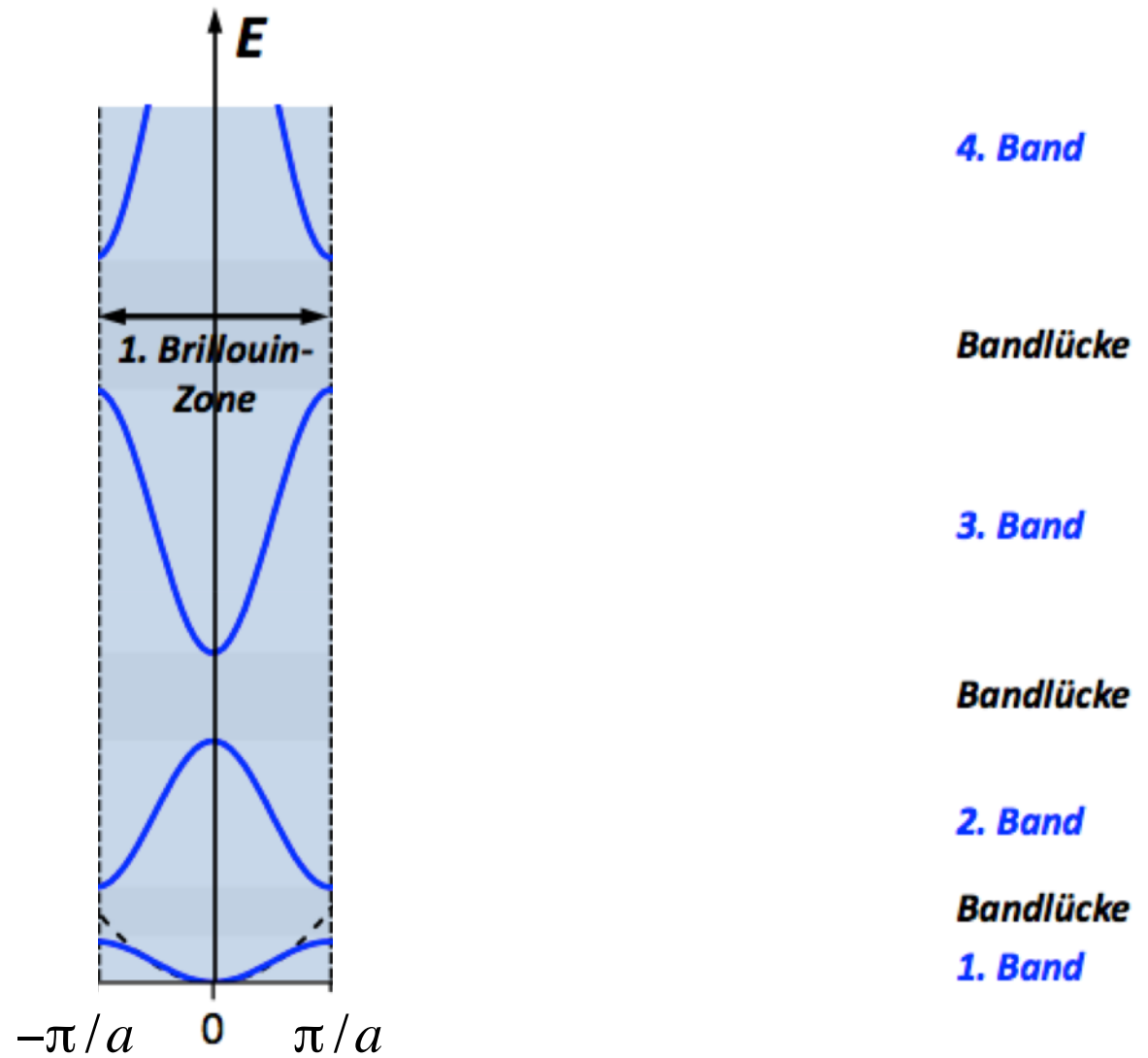
Ausgedehntes Zonenschema für ein 1D periodisches Potential $V(x) \neq 0$



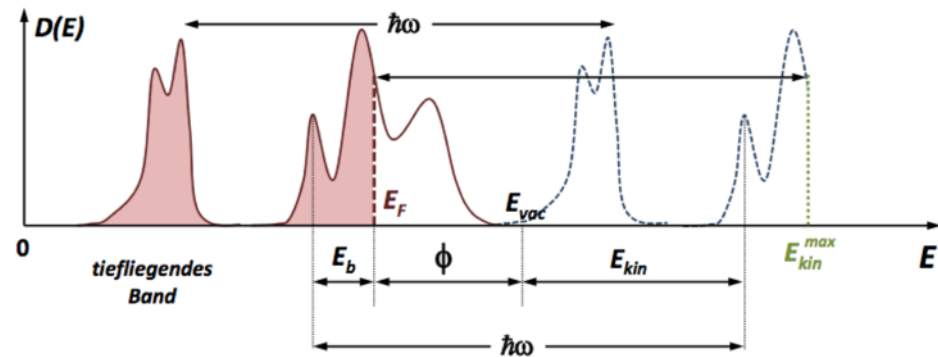
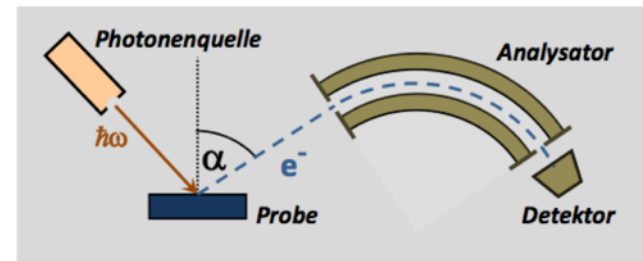
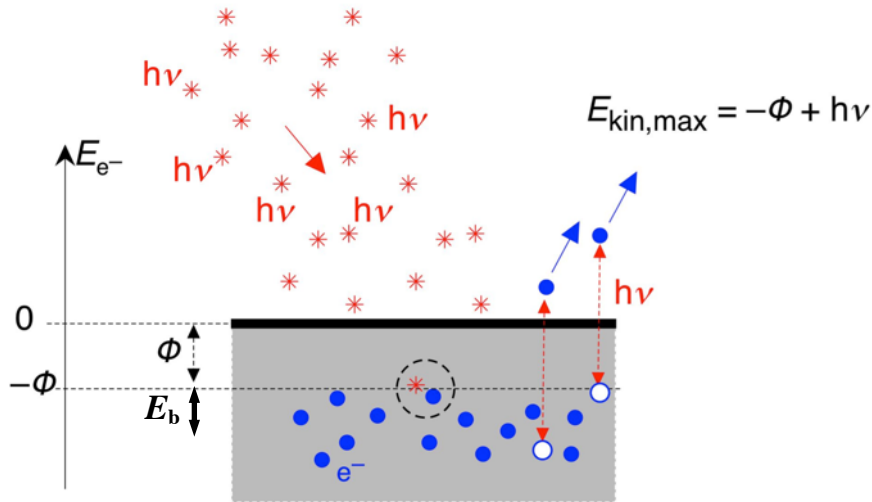
Periodisches Zonenschema für ein 1D periodisches Potential $V(x) \neq 0$



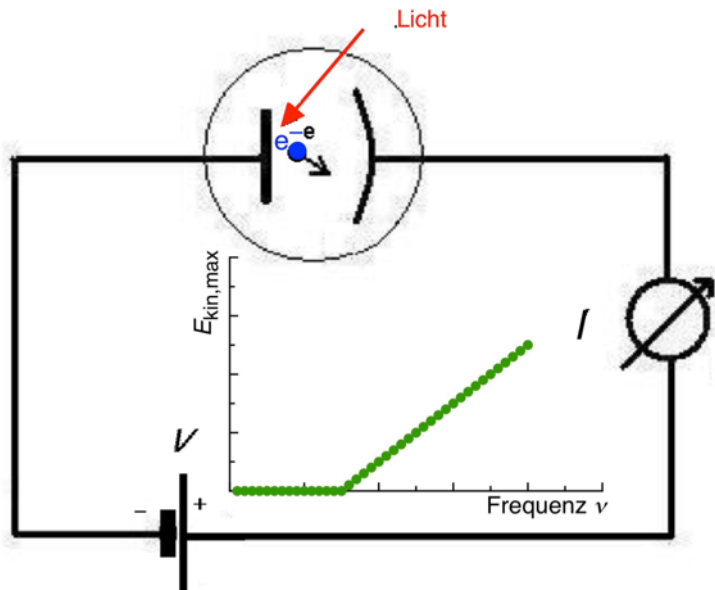
Reduziertes Zonenschema für ein 1D periodisches Potential $V(x) \neq 0$



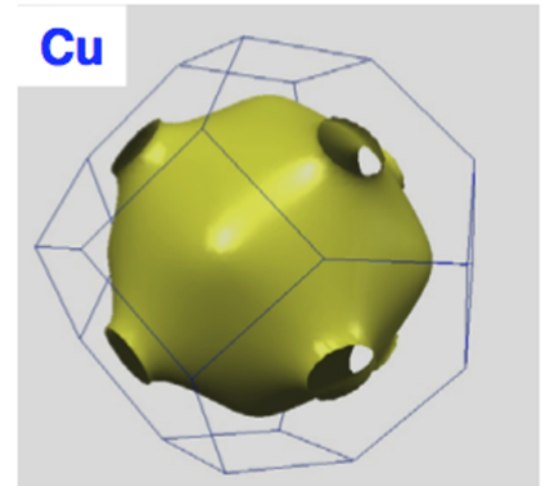
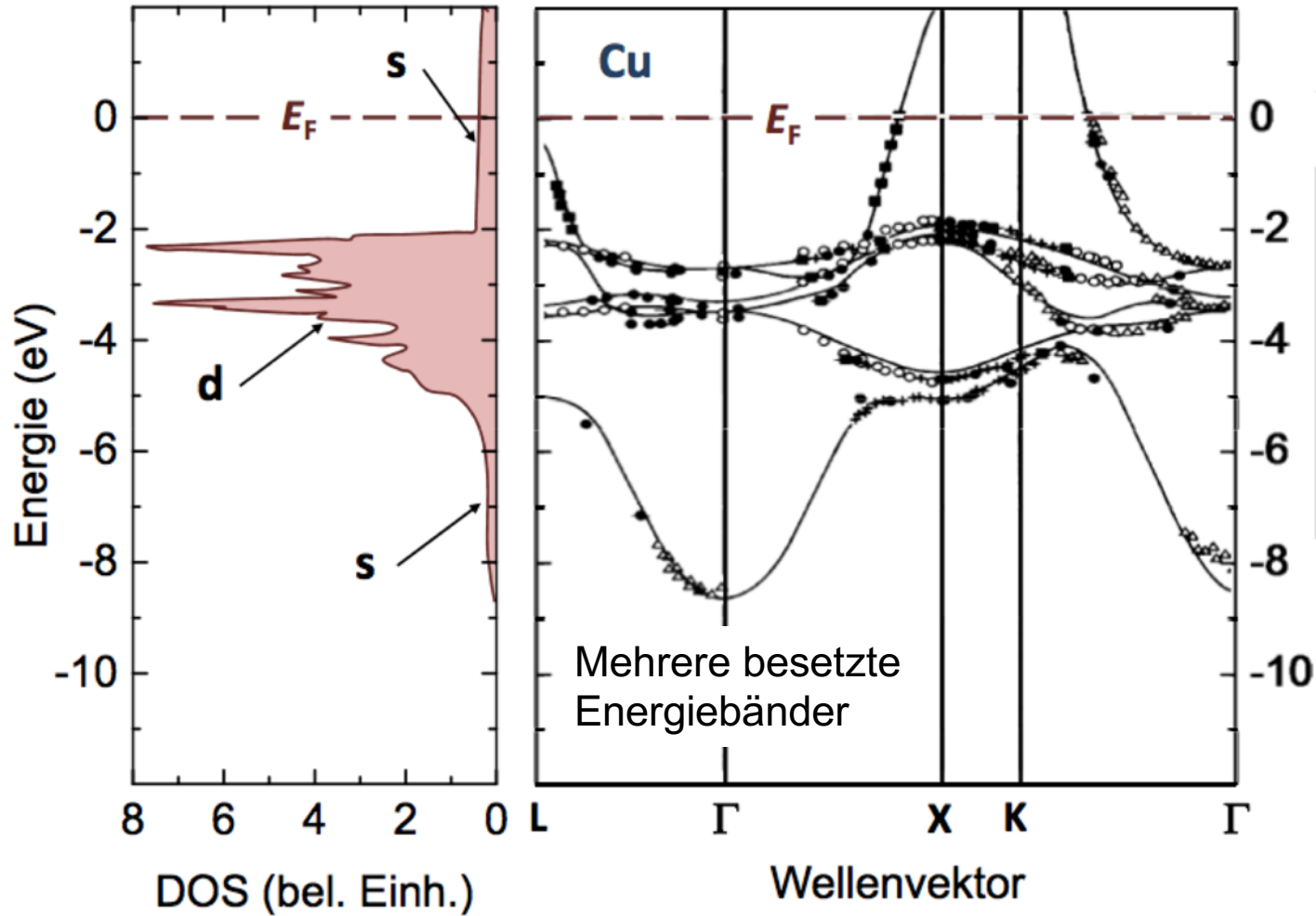
Messung der Energiebänder und der elektronischen Zustandsdichten: Photoemission (Photoeffekt)



Oben: Prinzipieller Aufbau eines Photoemissionsexperiments mit Photonenquelle, Probe, Analysator und Detektor. Unten: Schematische Darstellung der Bandstruktur (über alle \mathbf{k} gemittelt) und der relevanten Energien bei der Photoemissionsspektroskopie. Die Austrittsarbeit ist $\phi = E_{vac} - E_F$. Die Elektronen werden aus den besetzten Bändern in das Quasikontinuum der unbesetzten Zustände angeregt.



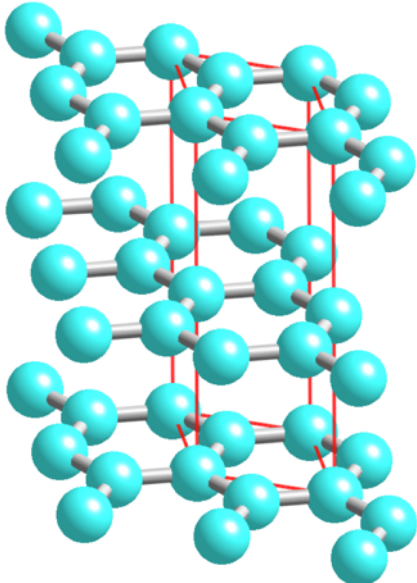
Kupfer



Fermi-Fläche (1. BZ)

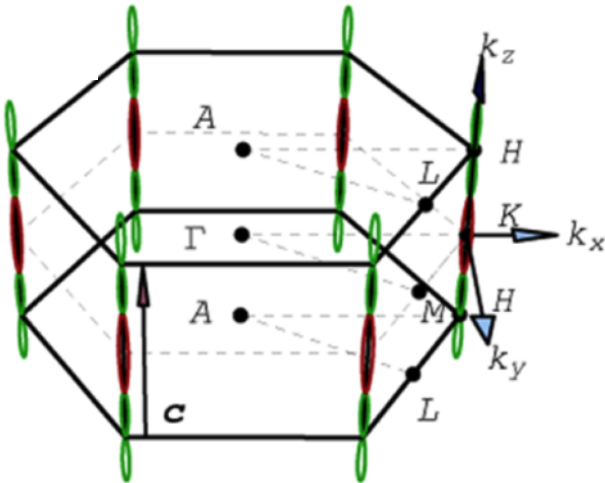
Bandstruktur $E(\mathbf{k})$ von Kupfer entlang der Richtungen hoher Symmetrie. Links ist die resultierende Zustandsdichte gezeigt (die Symbole entsprechen experimentellen Daten aus R. Courths und S. Hüfner, Phys. Rep. **112**, 55 (1984)).

Graphit mit winkelaufgelöster Photoemission

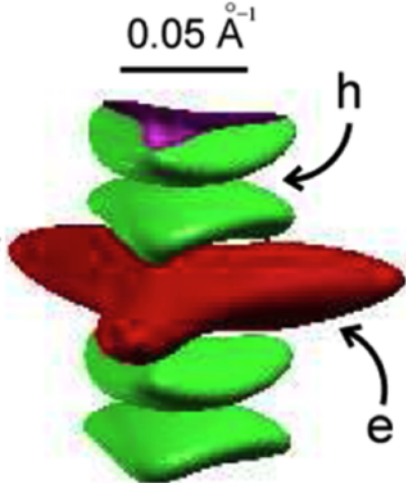


Kristallstruktur

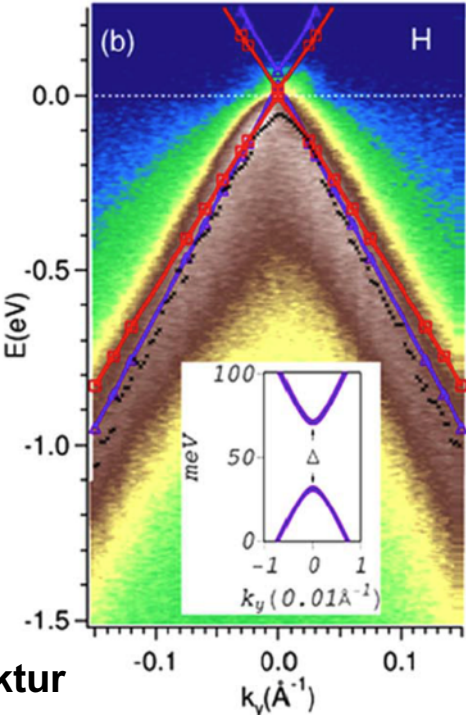
Graphit



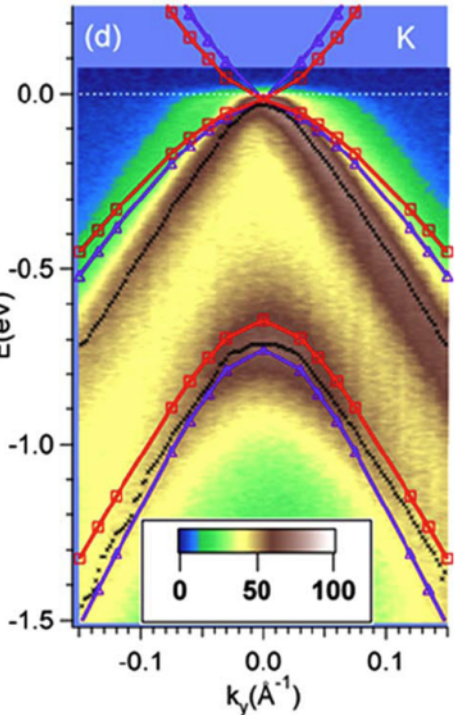
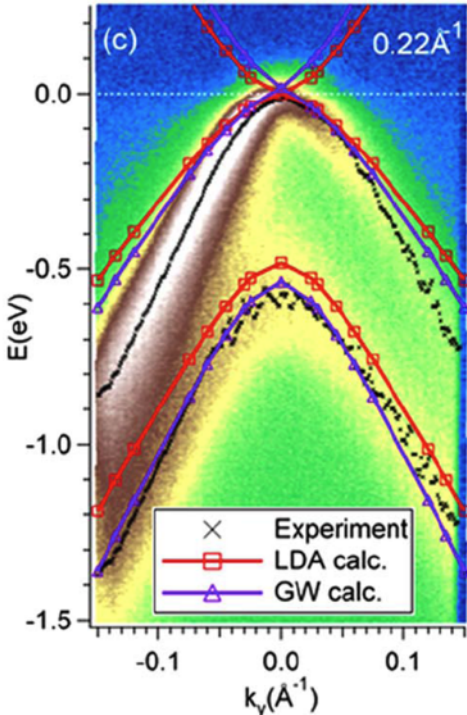
Brioullin-Zone



Fermi-Körper



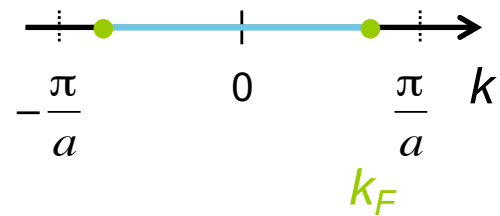
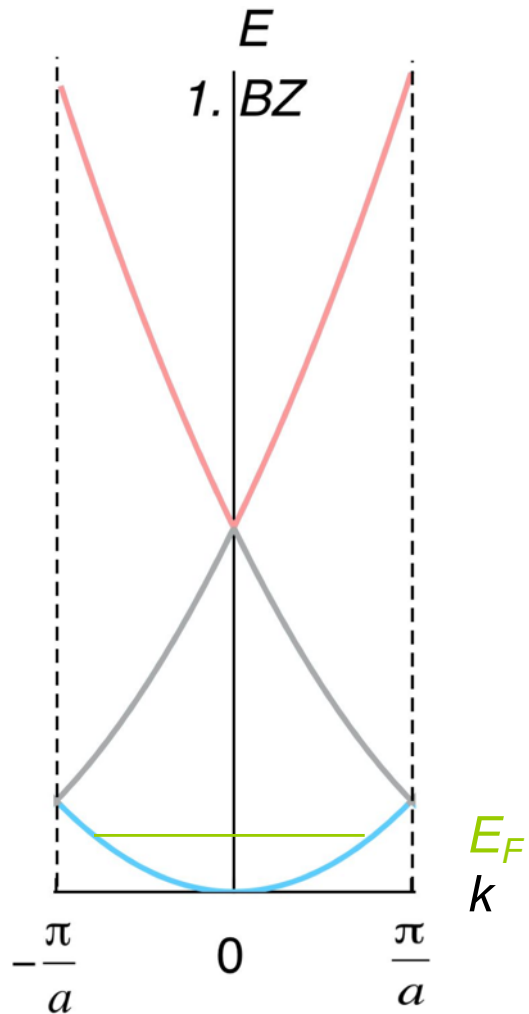
Bandstruktur



Flächen konstanter Energie

1D

freie Elektronen

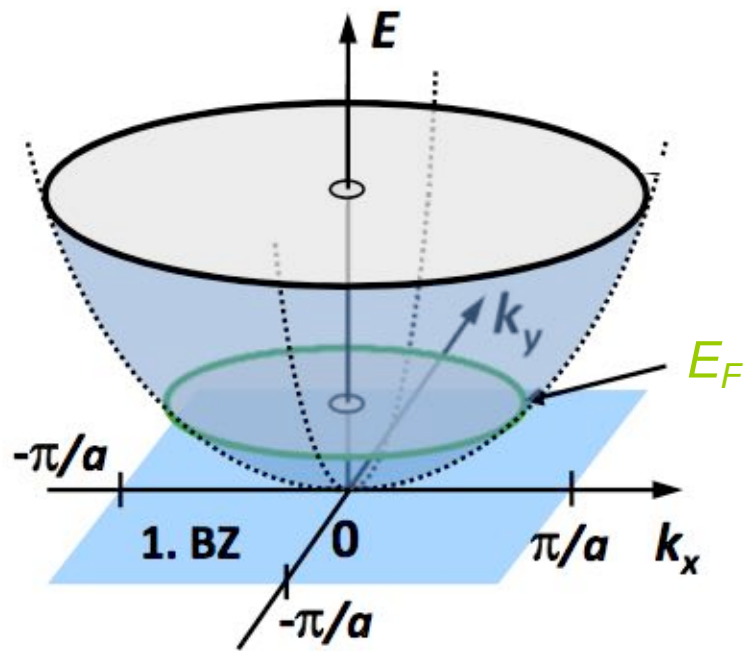


Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

2D

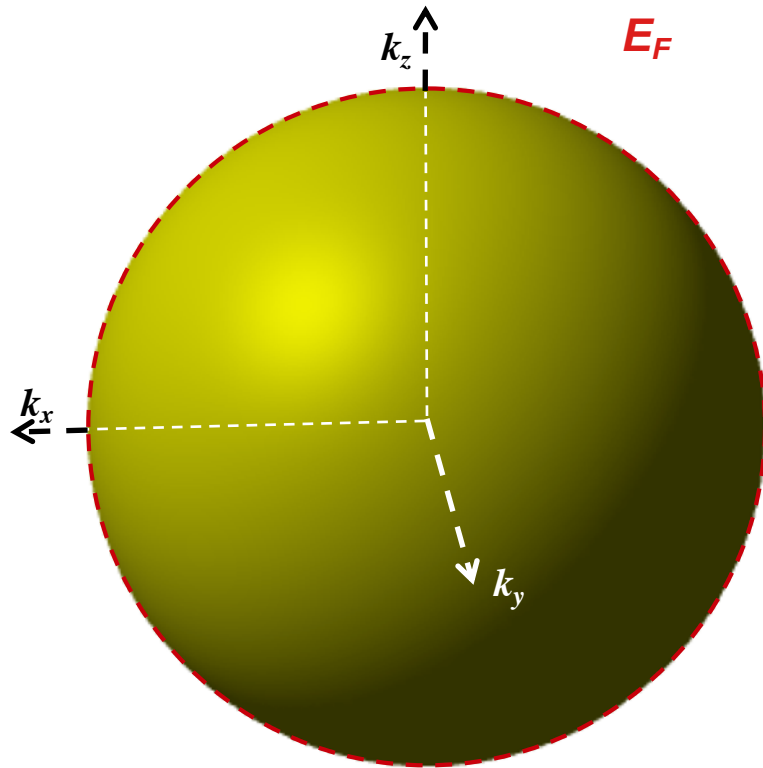
freie Elektronen



Flächen konstanter Energie

3D

freie Elektronen

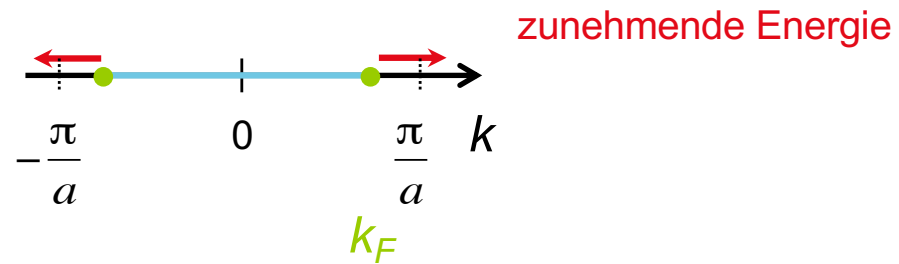
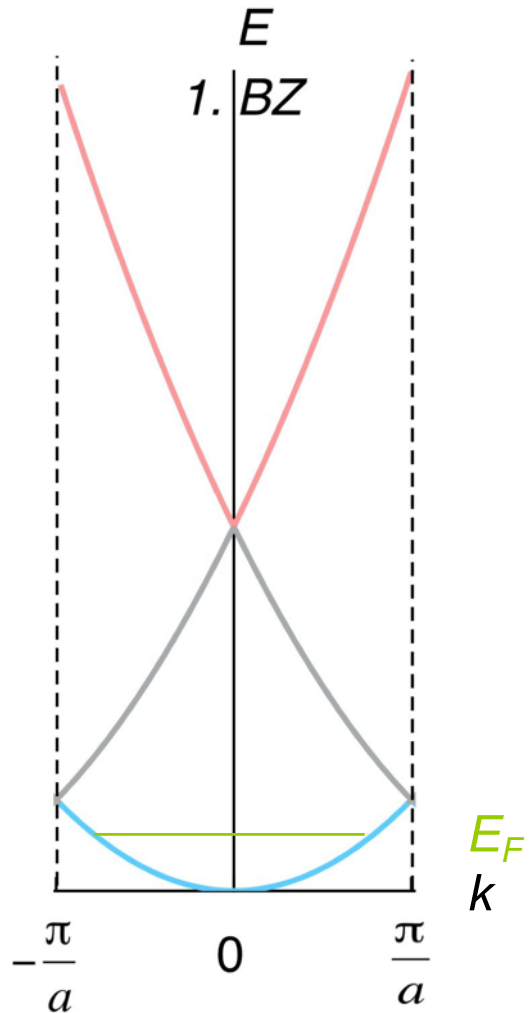


Freie Elektronen

Flächen konstanter Energie

1D

freie Elektronen

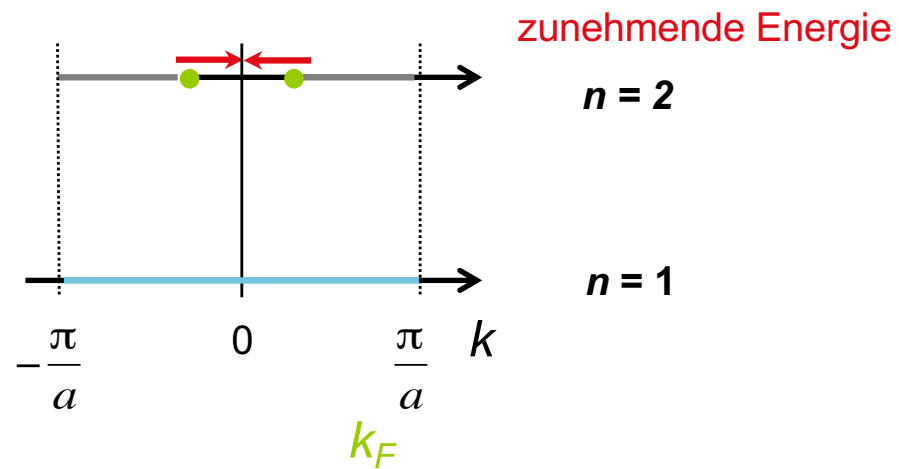
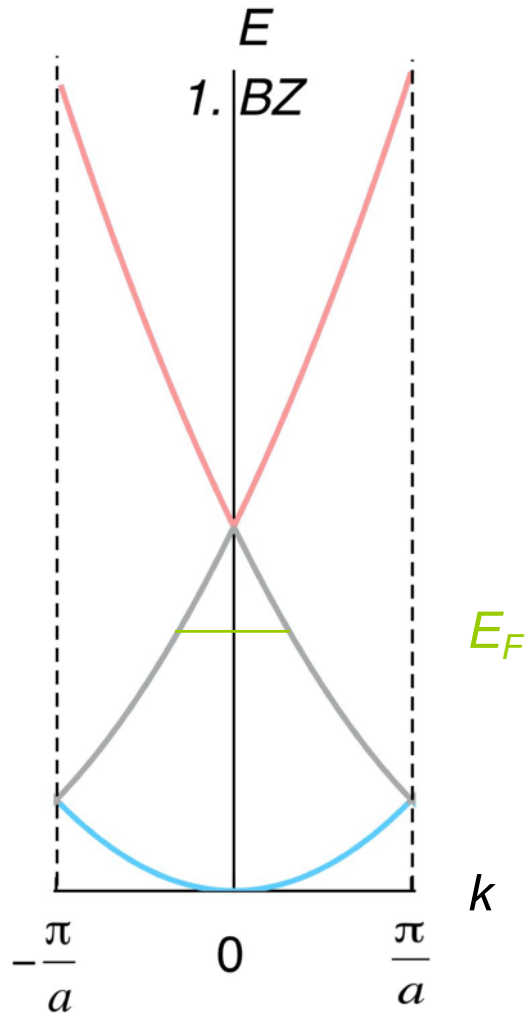


Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

1D

freie Elektronen

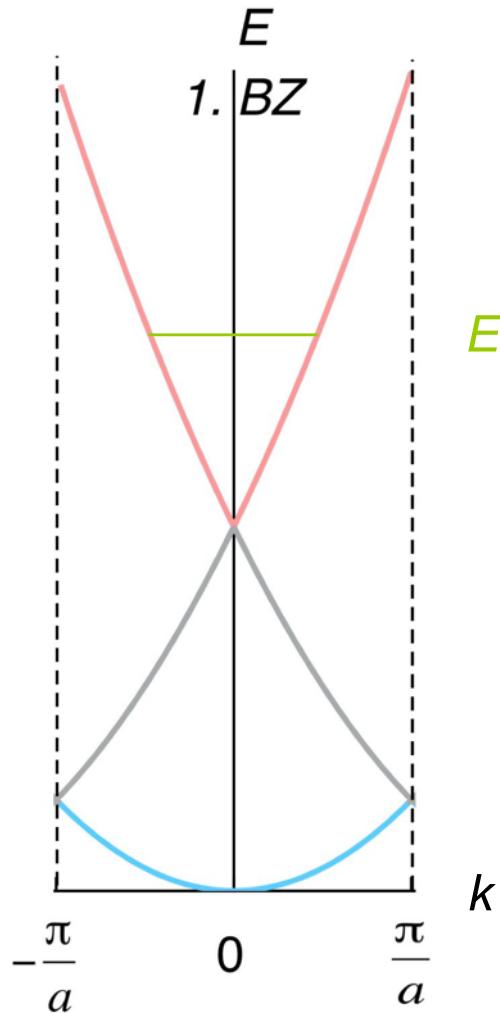


Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

1D

freie Elektronen



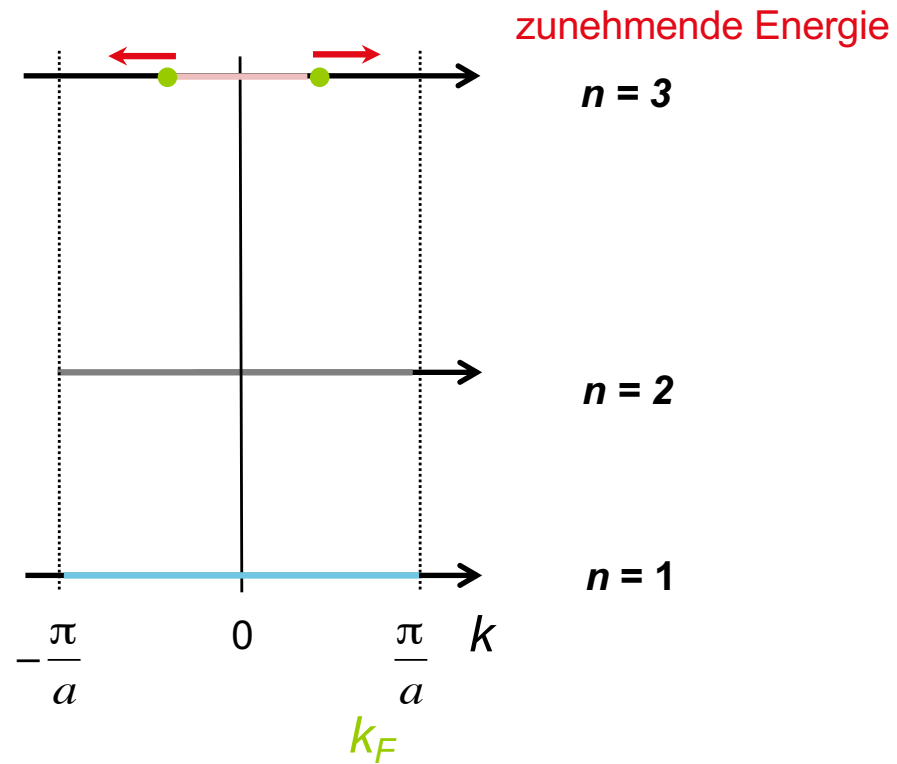
E_F

k

$-\frac{\pi}{a}$

0

$\frac{\pi}{a}$



zunehmende Energie

$n = 3$

$n = 2$

$n = 1$

$-\frac{\pi}{a}$

0

$\frac{\pi}{a}$

k

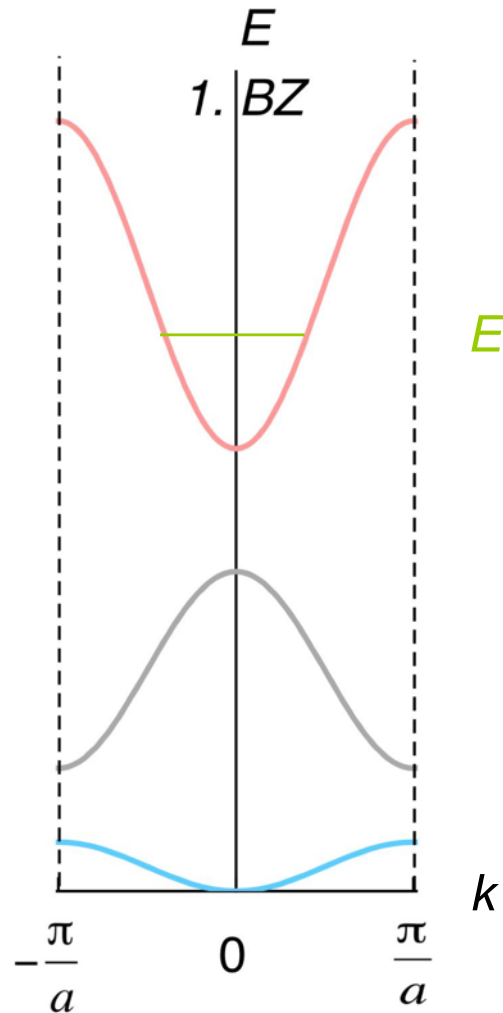
k_F

Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

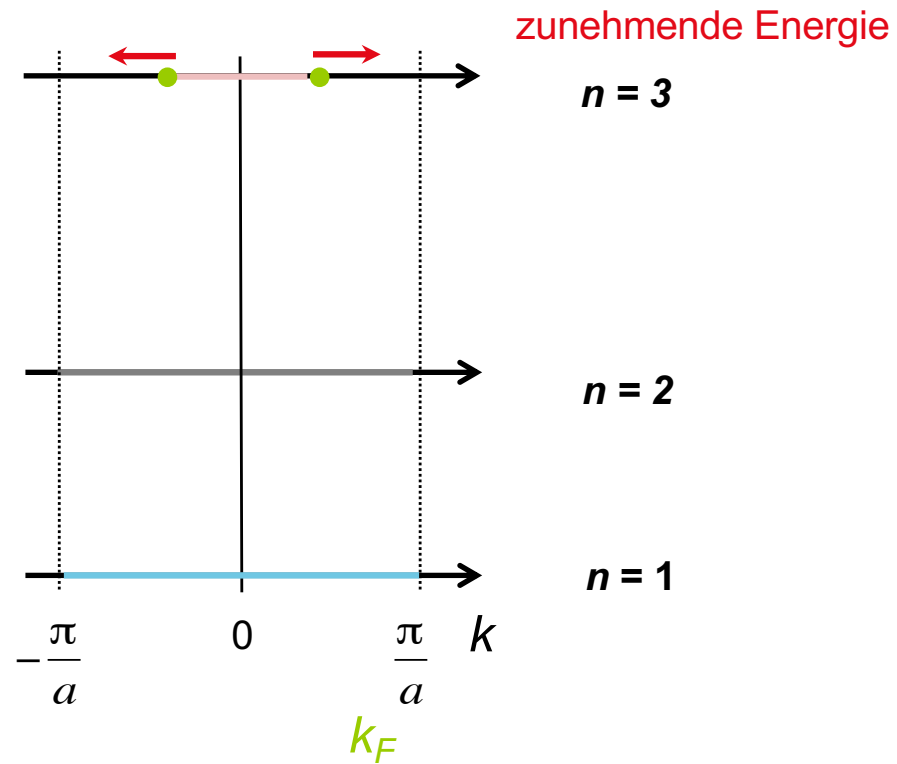
1D

periodisches Potential $V(x) \neq 0$



E_F

k



zunehmende Energie

$n = 3$

$n = 2$

$n = 1$

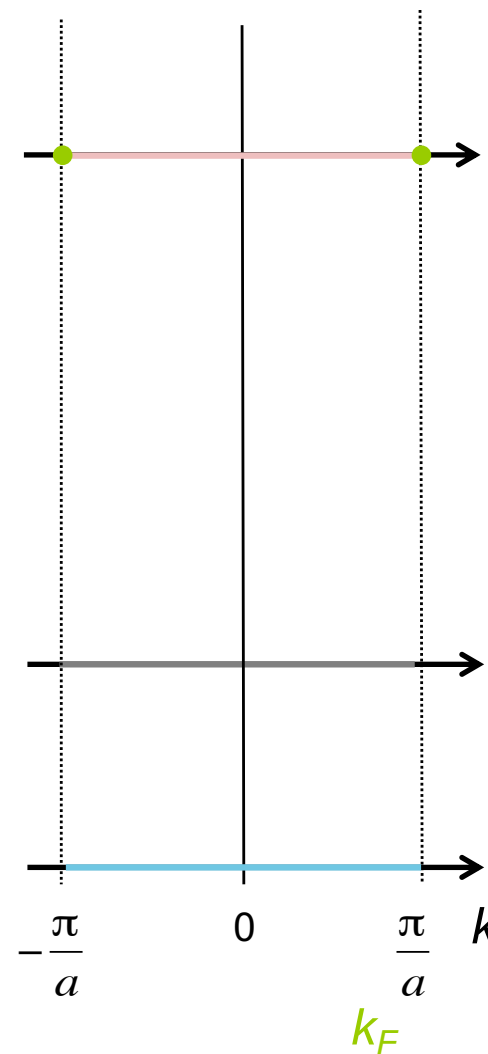
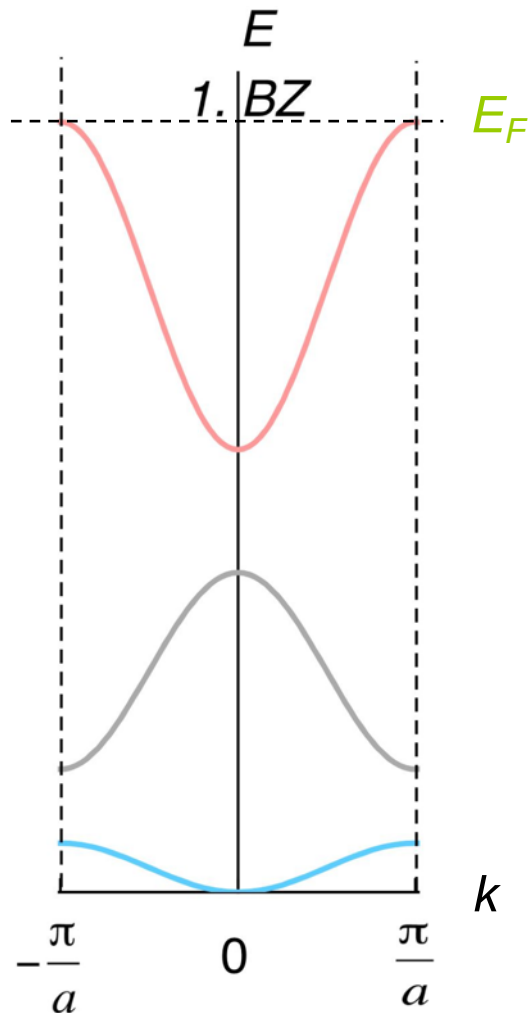
k_F

Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

1D

periodisches Potential $V(x) \neq 0$



k_F am Zonenrand:

Energie nimmt in keine Richtung von k zu; die Energiebänder haben dort horizontale Tangenten ($dE/dk = 0$, stehende Wellen)

$n = 3$

$n = 2$

$n = 1$

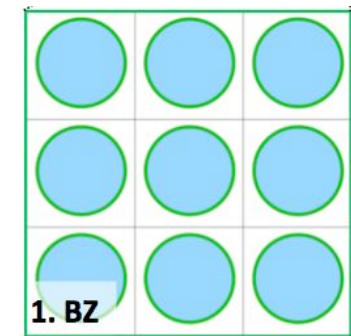
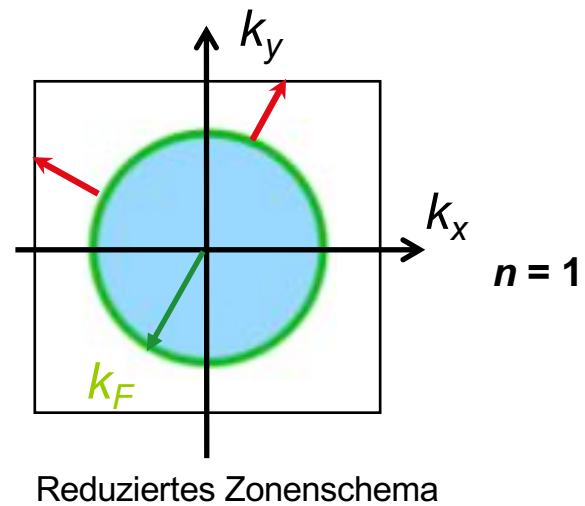
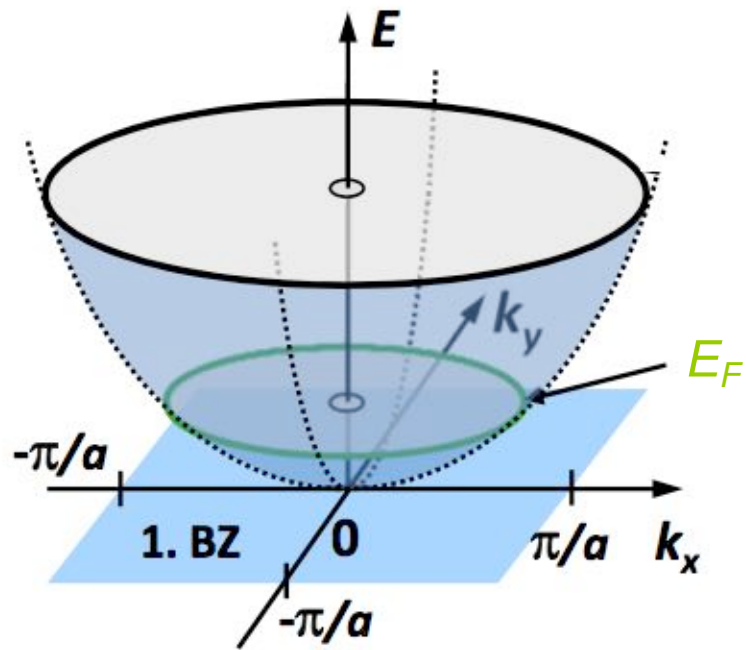
Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

2D

freie Elektronen

Fermi-Grenze innerhalb der 1. BZ:



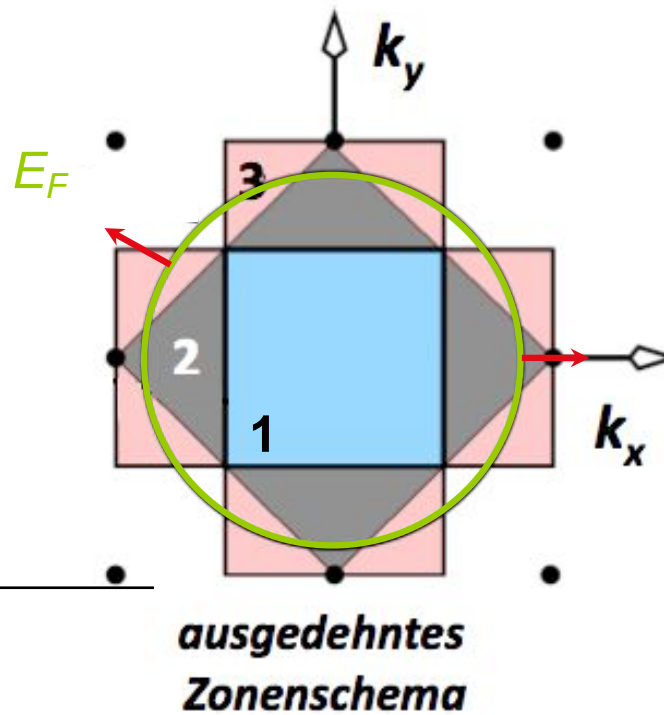
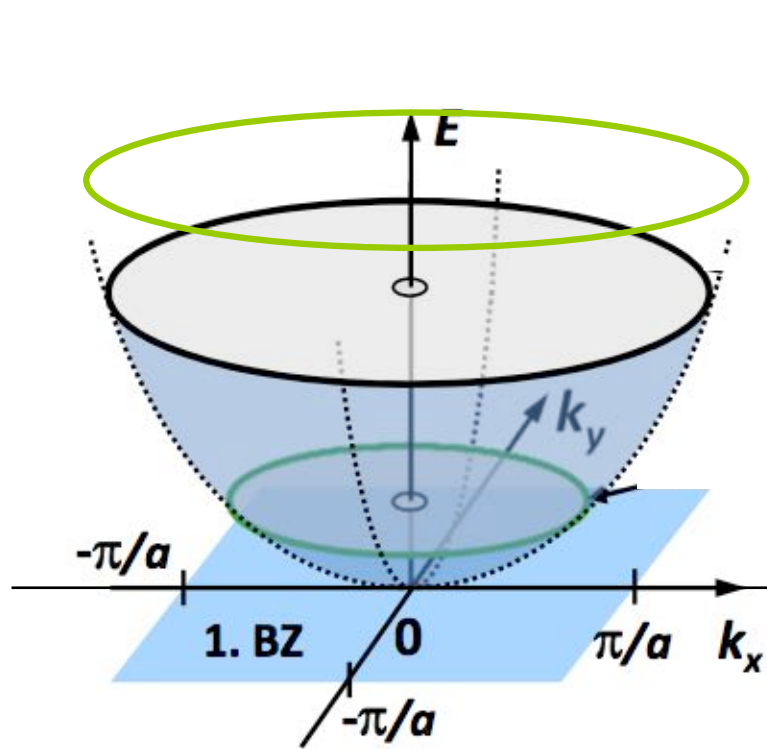
zunehmende Energie
senkrecht zum Fermi-Kreis

Flächen konstanter Energie

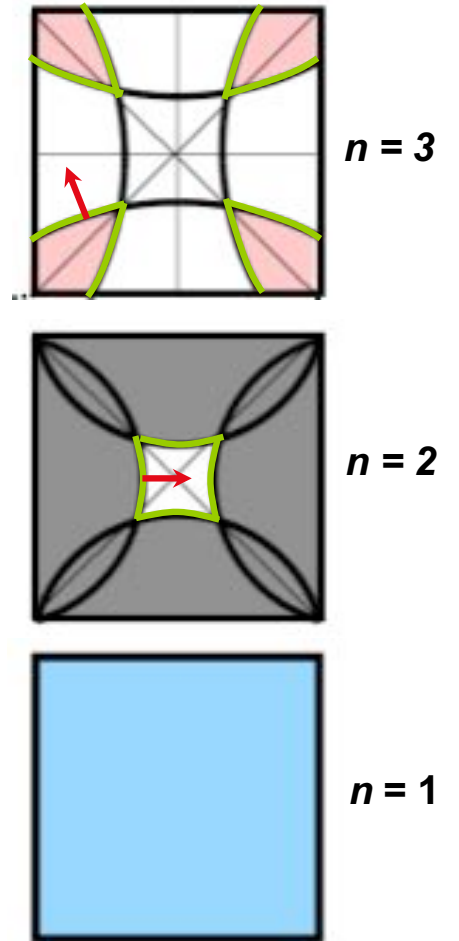
2D

freie Elektronen

Fermi-Grenze ausserhalb der 1. BZ:



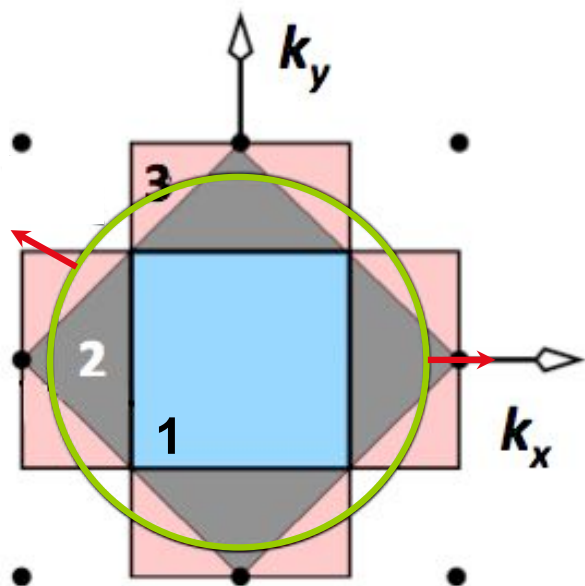
zunehmende Energie
senkrecht zum Fermi-Kreis



Reduziertes Zonenschema

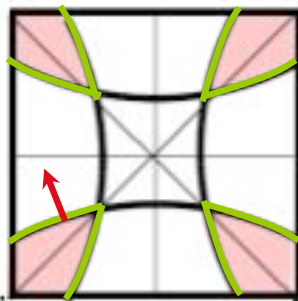
Flächen konstanter Energie 2D freie Elektronen

Fermi-Grenze ausserhalb der 1. BZ:

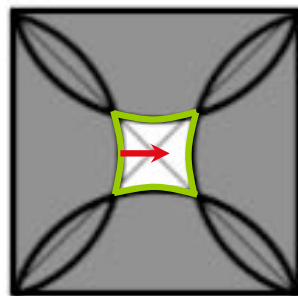


*ausgedehntes
Zonenschema*

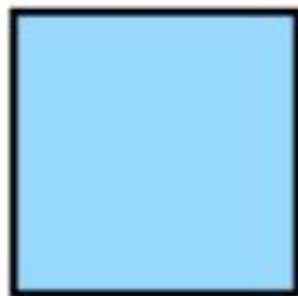
zunehmende Energie
senkrecht zum Fermi-Kreis



$n = 3$

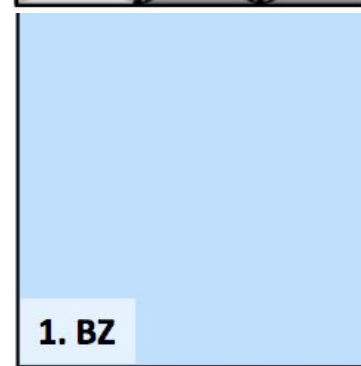
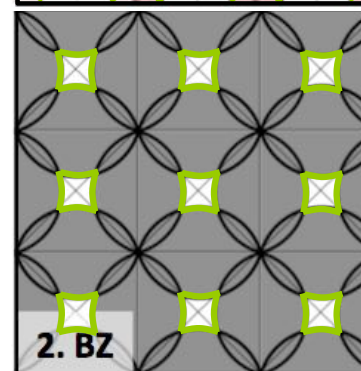
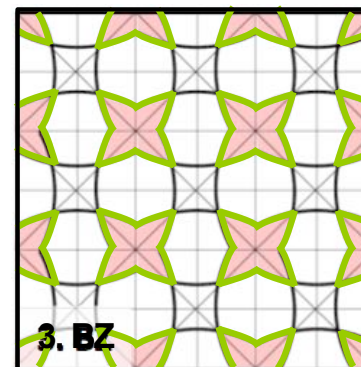


$n = 2$



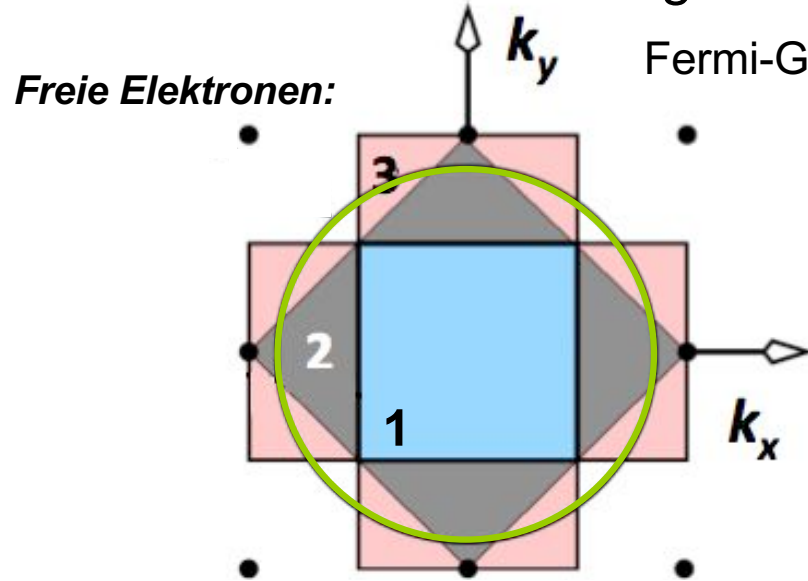
$n = 1$

Reduziertes Zonenschema



Periodisches Zonenschema

Flächen konstanter Energie 2D periodisches Potential $V(r) \neq 0$

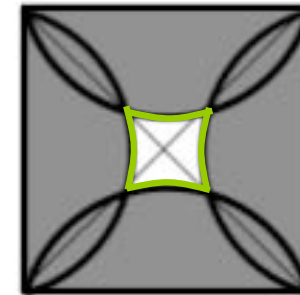


Fermi-Grenze ausserhalb der 1. BZ:

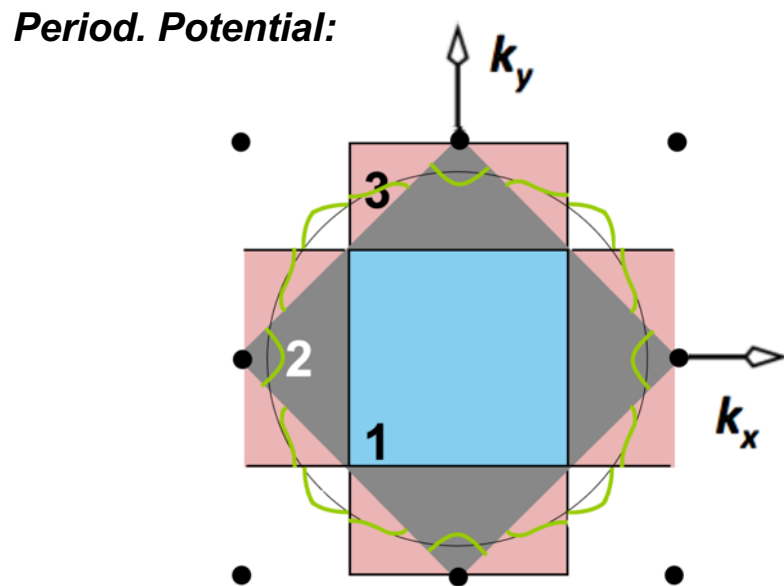
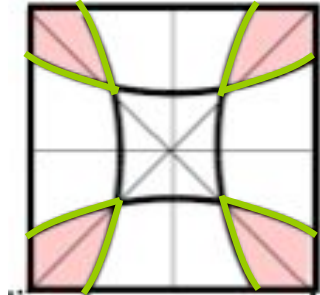
$n = 1$



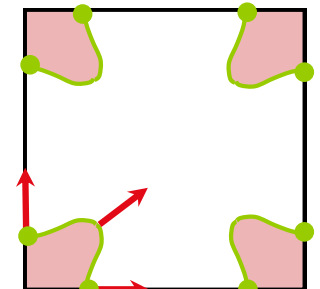
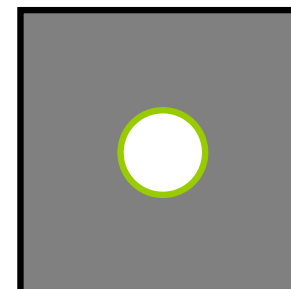
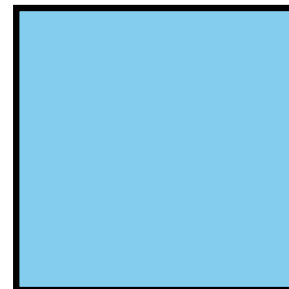
$n = 2$



$n = 3$



• k_F am Zonenrand:
Fermi-Linien sind senkrecht zum Zonenrand, da die Energiebänder dort horizontale Tangenten haben ($dE/dk = 0$, stehende Wellen)



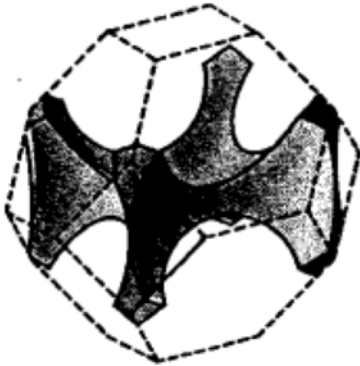



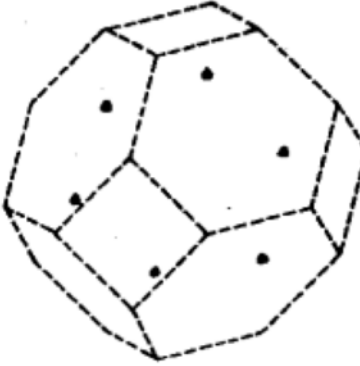
zunehmende Energie
senkrecht zur Fermi-Linie

Ausgedehntes Zonenschema

Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie 3D

periodisches Potential $V(r) \neq 0$

	First zone	Second zone	Third zone	Fourth zone
Valence 2			None	None
Valence 3	None			

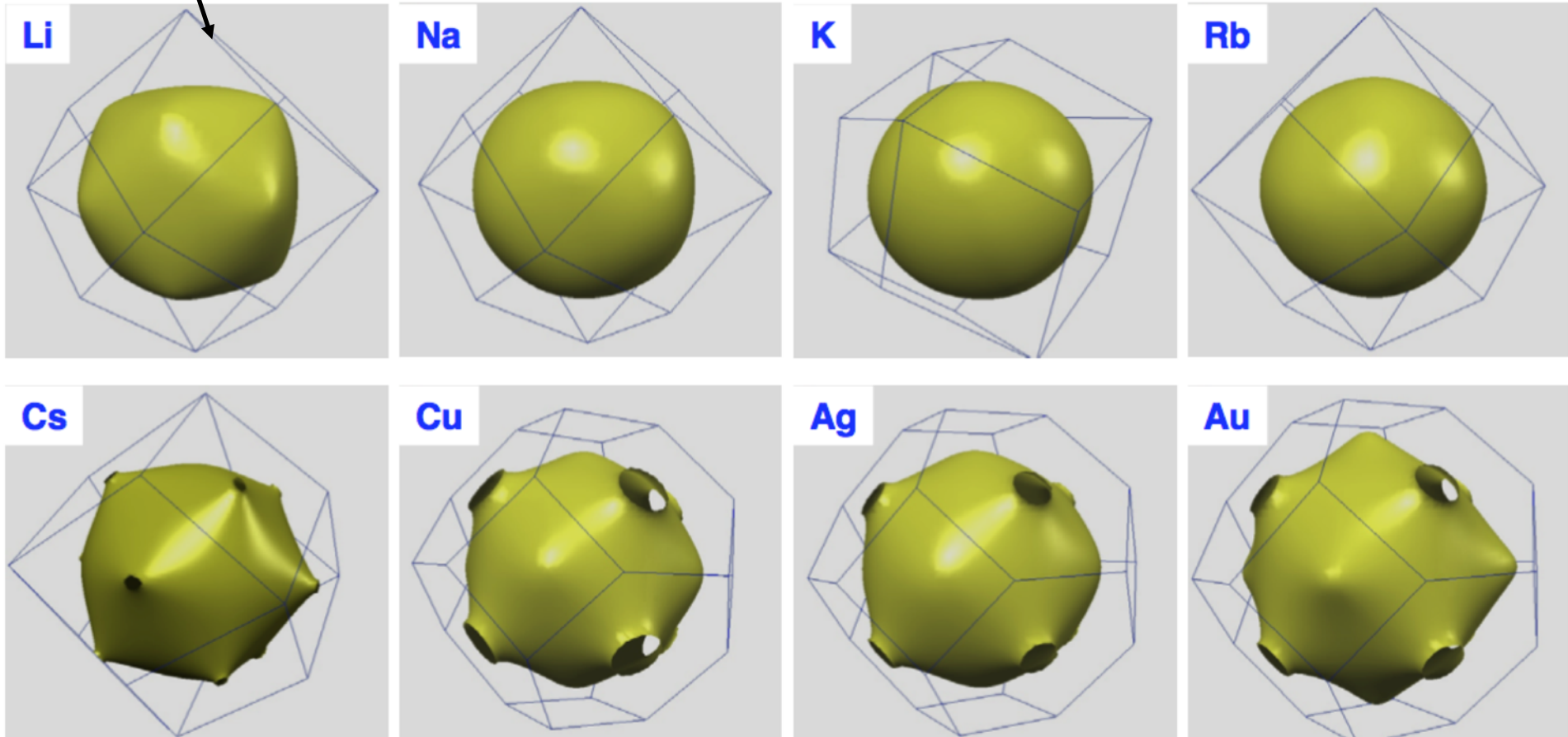
Fermi-Flächen von Metallen mit KFZ Struktur (fcc) und zwei verschiedenen Elektronenkonzentrationen (2 resp. 3 Leitungselektronen pro Atom, z.B. Al)

Flächen konstanter Energie

3D

periodisches Potential $V(r) \neq 0$

Rand der 1. BZ

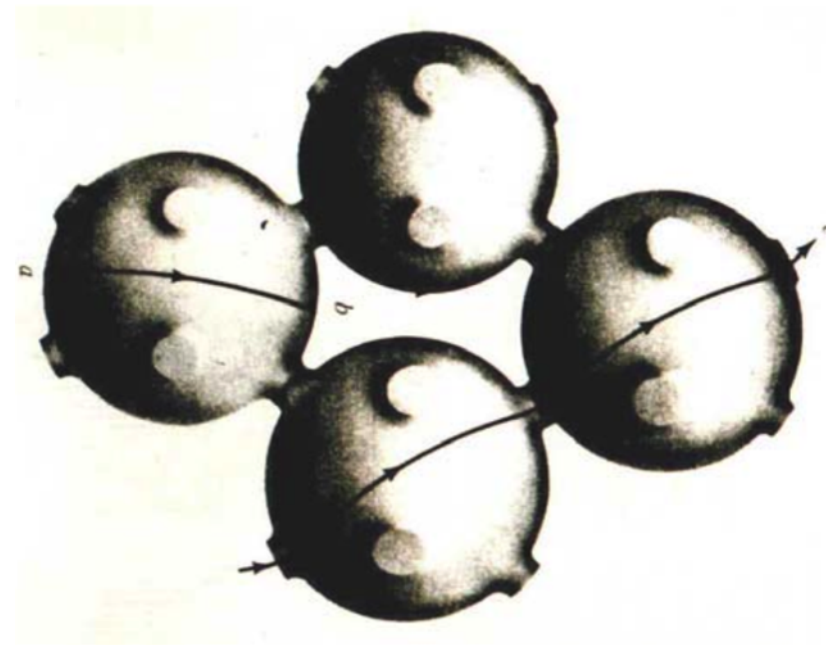
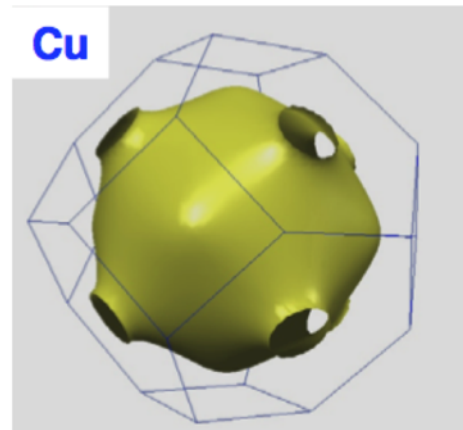


Fermi-Flächen von einfachen Metallen. Die Alkali-Metalle kristallisieren in einem bcc-Gitter, Cu, Ag und Au in einem fcc-Gitter

Flächen konstanter Energie

3D

periodisches Potential $V(r) \neq 0$



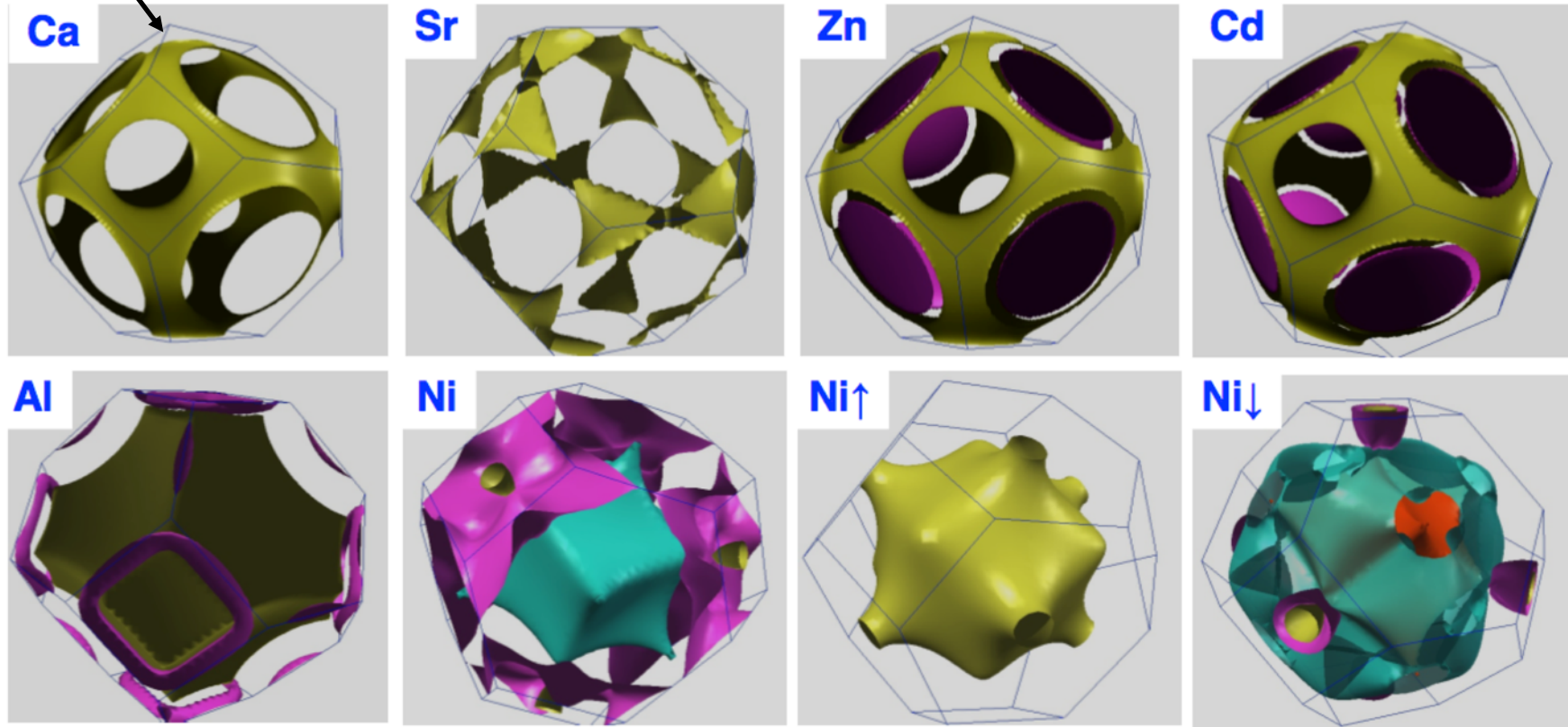
Periodisches Zonenschema

Flächen konstanter Energie

3D

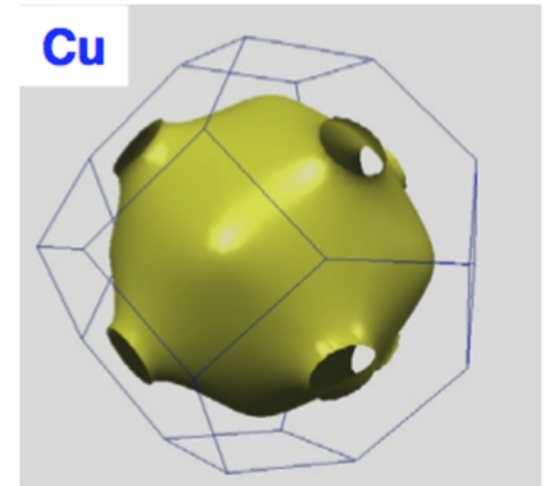
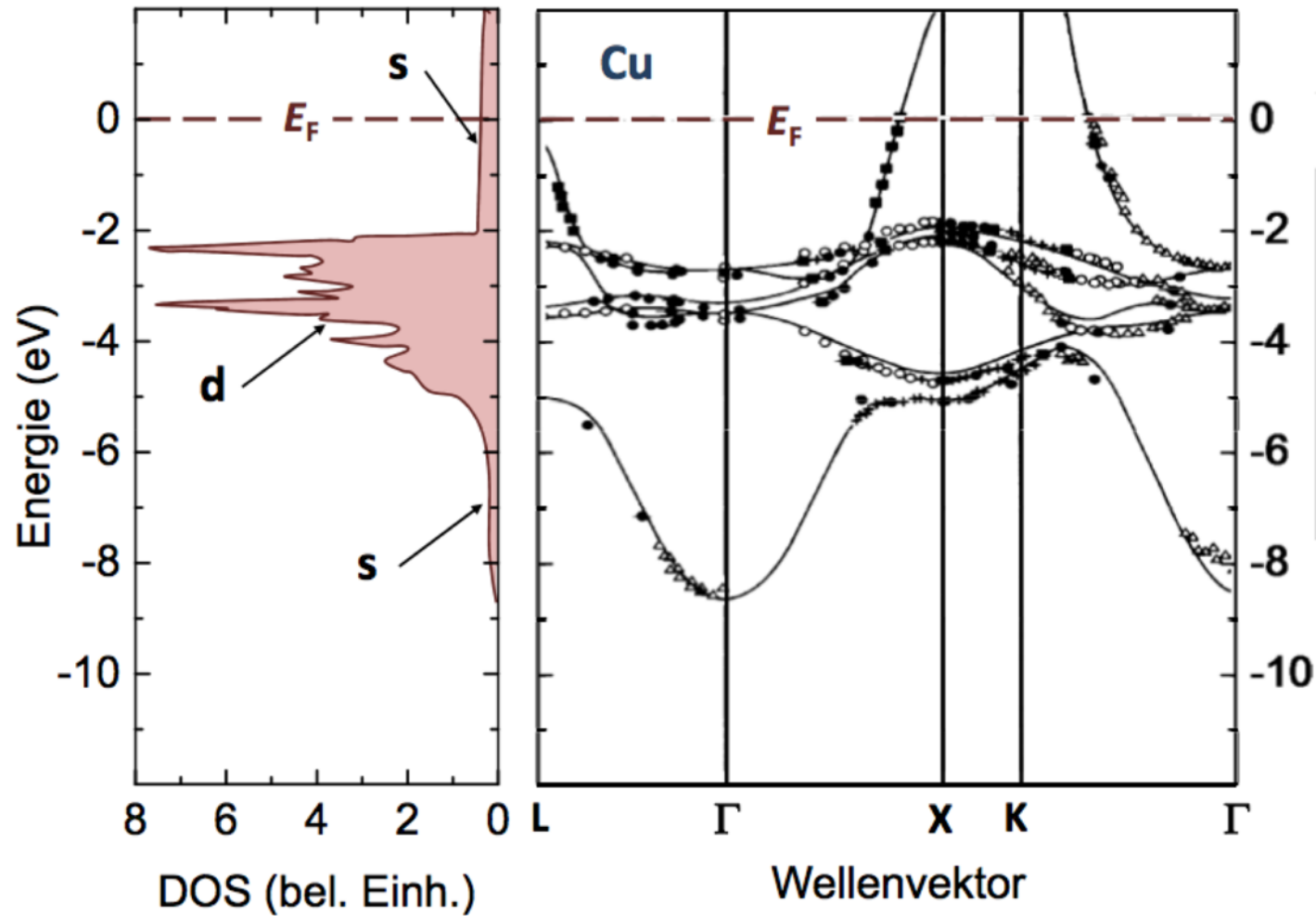
periodisches Potential $V(r) \neq 0$

Rand der 1. BZ



Fermi-Flächen von komplexeren Metallen. Die Erdalkali-Metalle Ca und Sr kristallisieren in einem fcc-Gitter. Zn und Cd kristallisieren eigentlich in der hcp-Struktur, gezeigt ist allerdings die Fermi-Fläche für eine fcc-Struktur, um einen Vergleich zu Ca und Sr zu ermöglichen. Gezeigt sind ferner die Fermi-Flächen von Al (fcc-Struktur) und Ni (fcc-Struktur) gemittelt über beide Spin-Richtungen und für jede Spin-Richtung getrennt

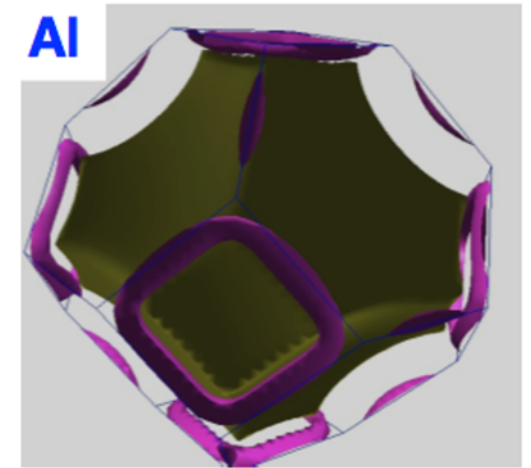
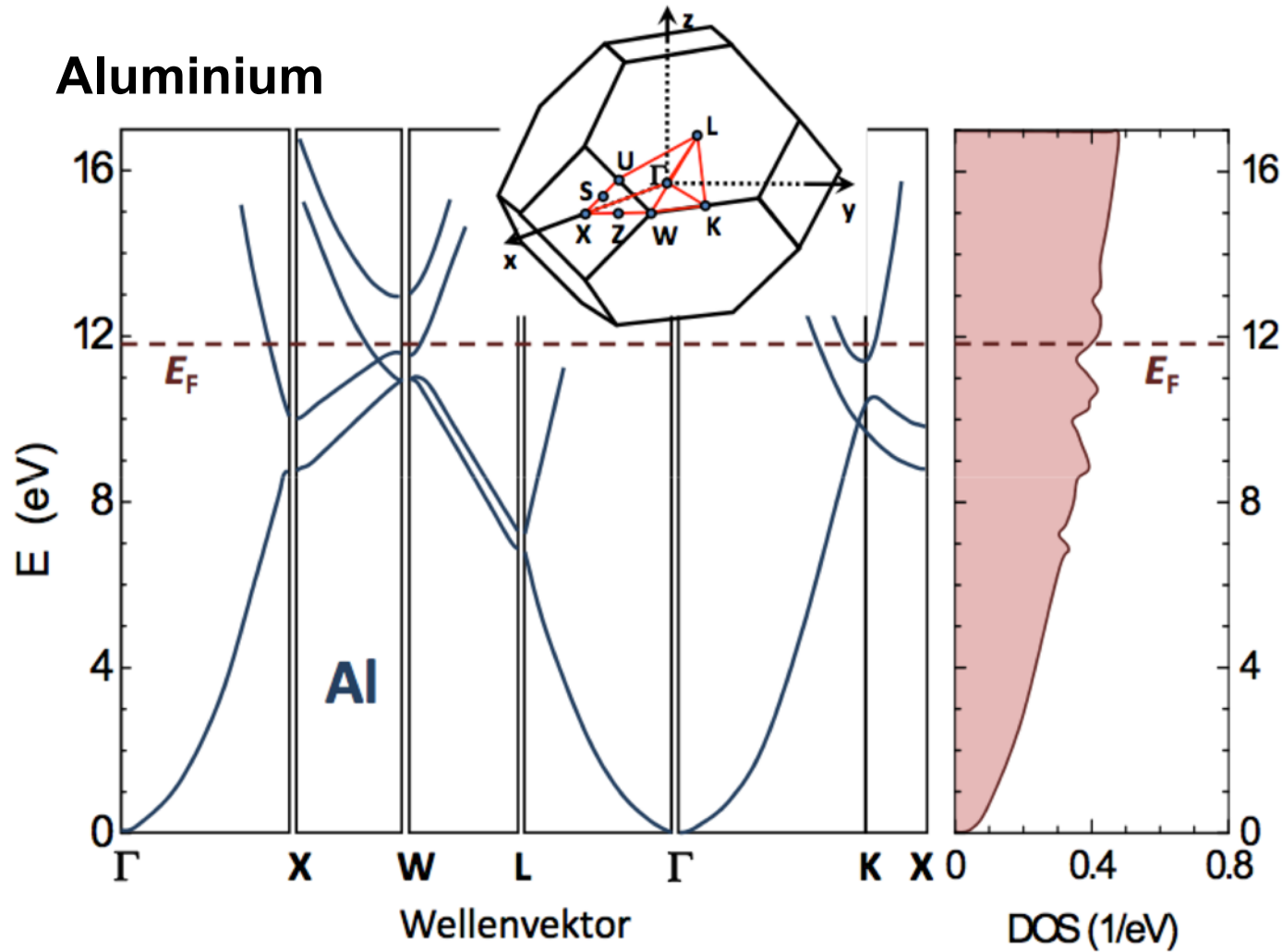
Kupfer



Fermi-Fläche (1. BZ)

Bandstruktur $E(\mathbf{k})$ von Kupfer entlang der Richtungen hoher Symmetrie. Links ist die resultierende Zustandsdichte gezeigt (die Symbole entsprechen experimentellen Daten aus R. Courths und S. Hüfner, Phys. Rep. **112**, 55 (1984)).

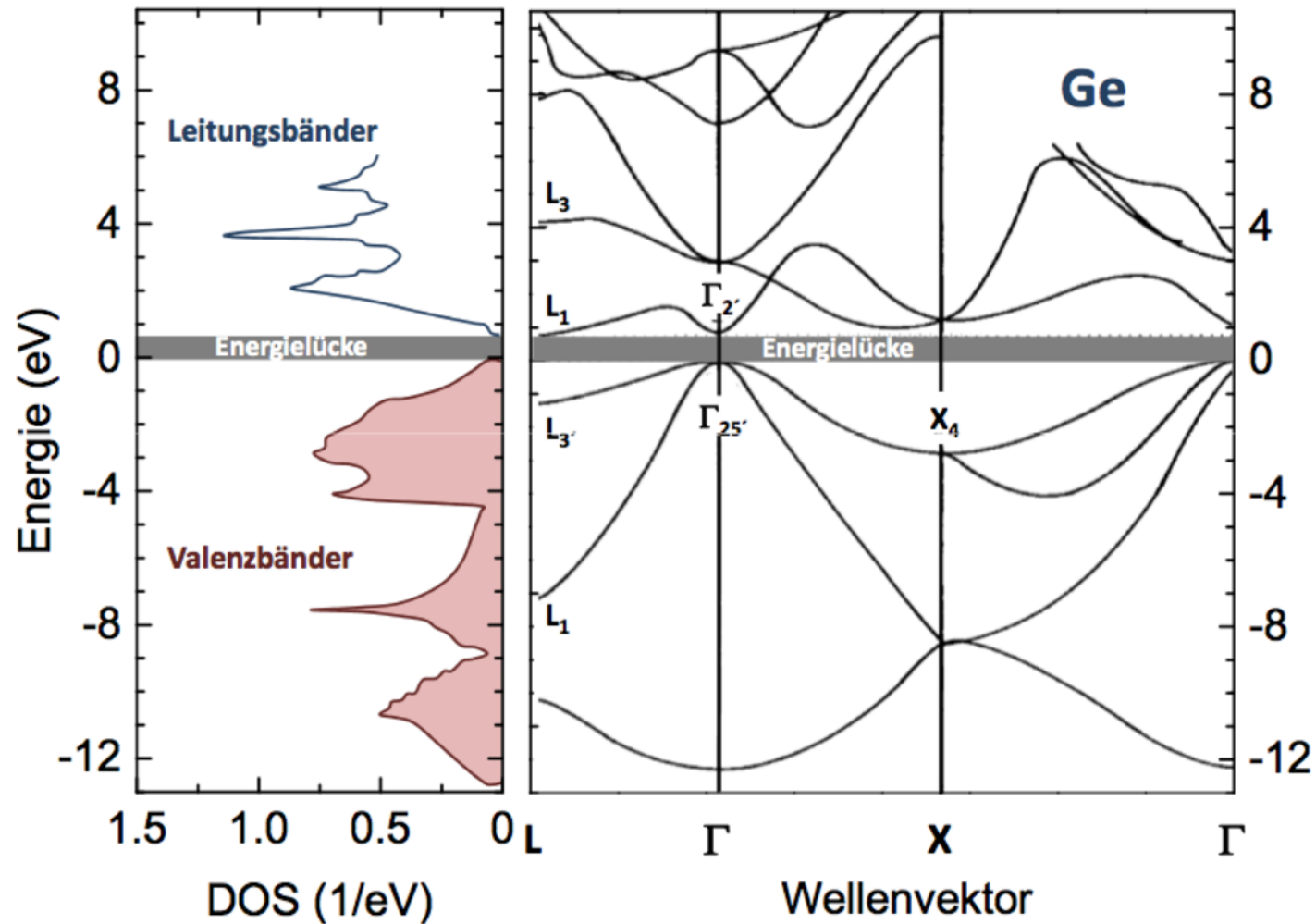
Aluminium



Fermi-Fläche (1. BZ)

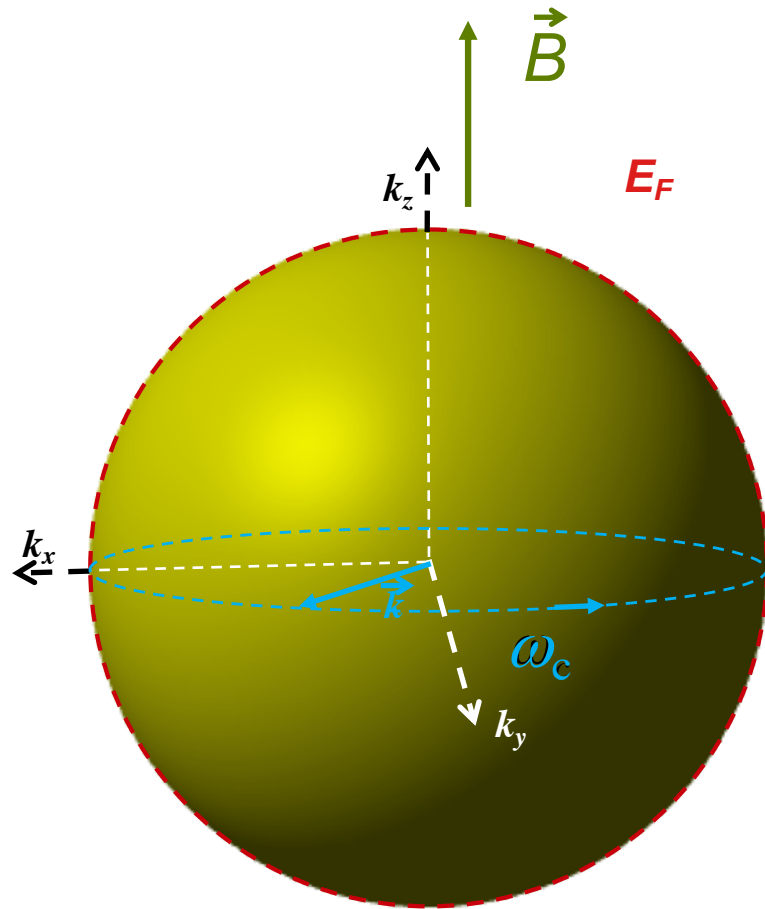
Bandstruktur von Aluminium entlang von Richtungen hoher Symmetrie (links). Der Γ -Punkt ist das Zentrum der 1. Brillouin-Zone (siehe Inset). Die Bandlücken an der Zonengrenzen sind klein und der Bandverlauf kann in weiten Teilen durch parabelförmige Kurven angenähert werden. Rechts ist die Zustandsdichte $D(E)$ gezeigt.

Germanium



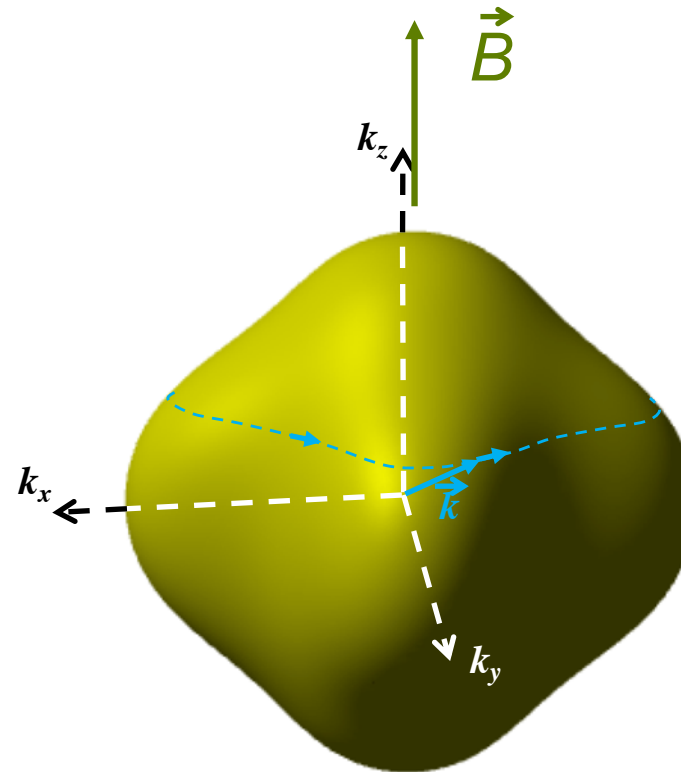
Berechnete Bandstruktur $E(\mathbf{k})$ von Germanium entlang der Richtungen hoher Symmetrie. Links ist die resultierende Zustandsdichte gezeigt. Eingezeichnet sind auch einige kritische Punkte (nach F. Hermann, R.L. Kortum, C.D. Kuglin, J.L. Shay, in *Semiconducting Compounds*, D.G. Thomas ed., Benjamin, New York (1967)).

Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):



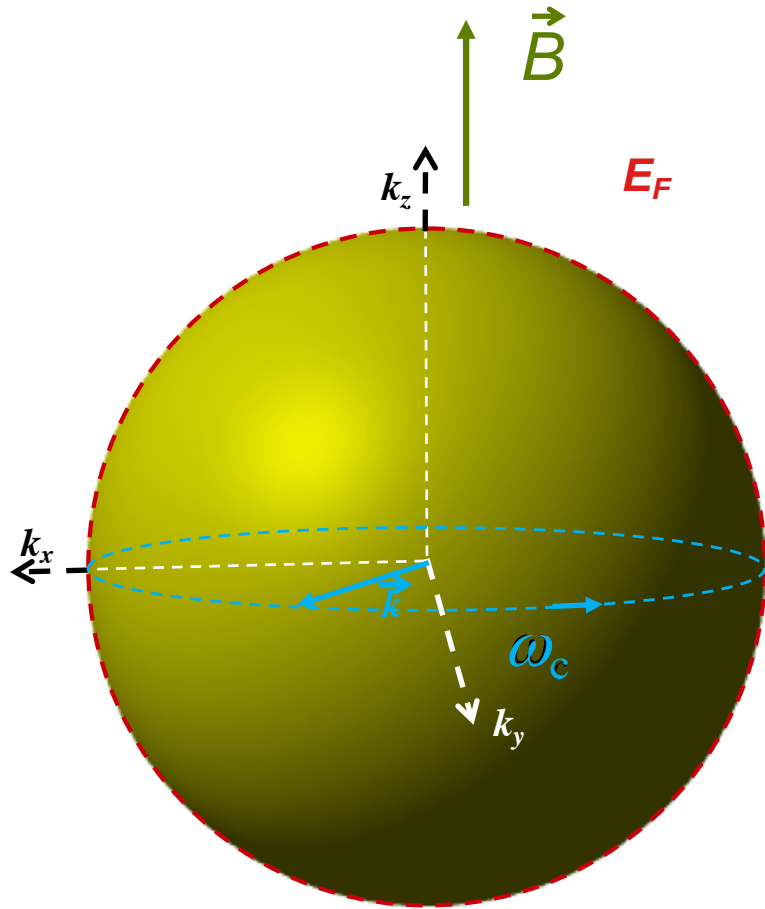
Freie Elektronen

geschlossene Bahn



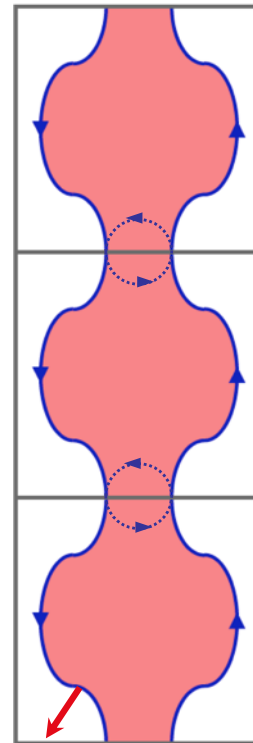
periodisches Potential $V(r) \neq 0$ für
Fermi-Körper innerhalb 1. BZ

Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):



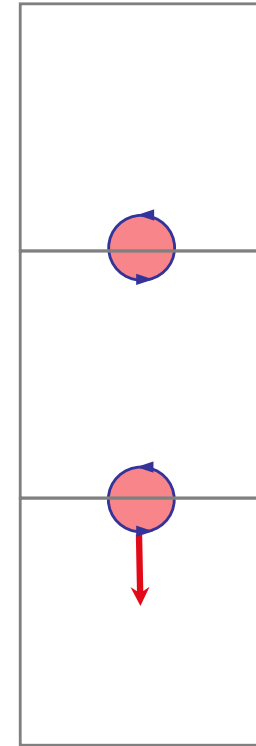
Freie Elektronen

offene Bahn



1. BZ

Elektronartig:
E nimmt nach
 aussen hin zu

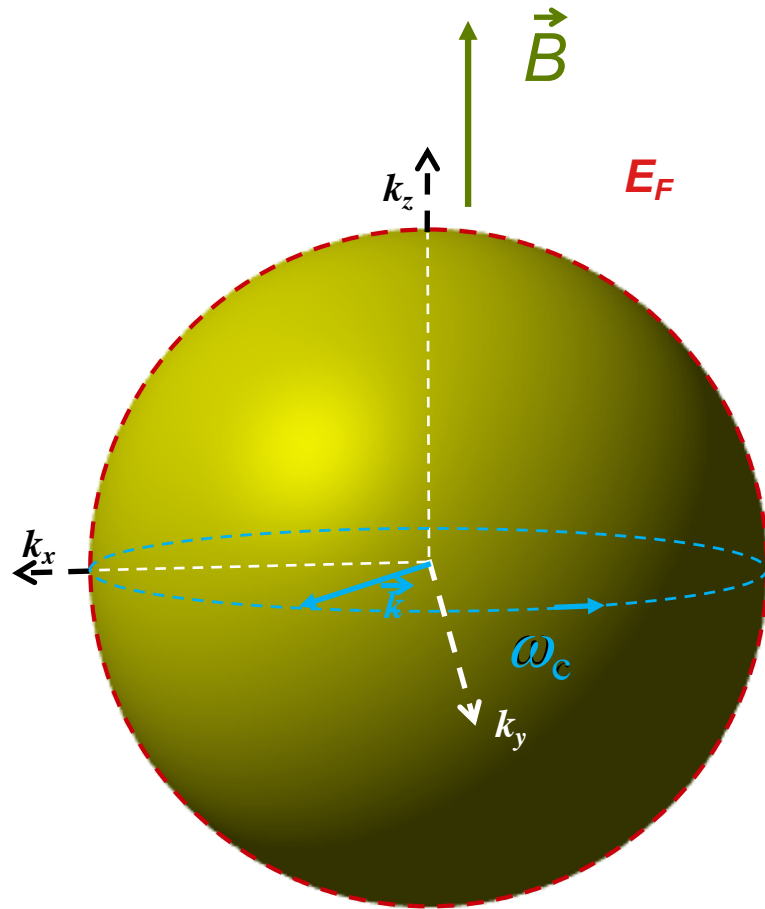


2. BZ

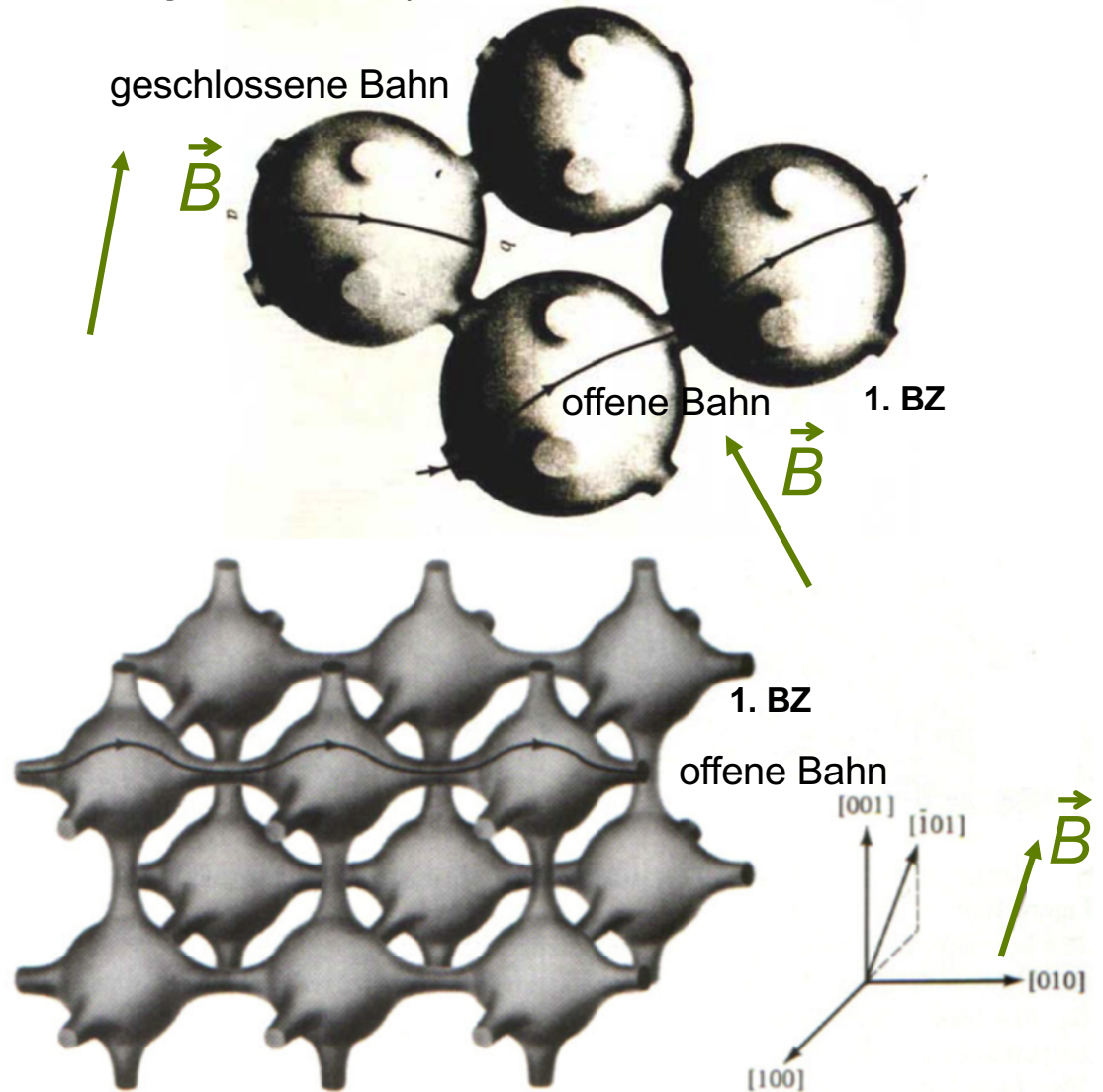
Lochartig:
E nimmt nach
 innen hin zu

periodisches Potential $V(r) \neq 0$
 hier: Fermi-Körper *verlässt* 1. BZ

Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):

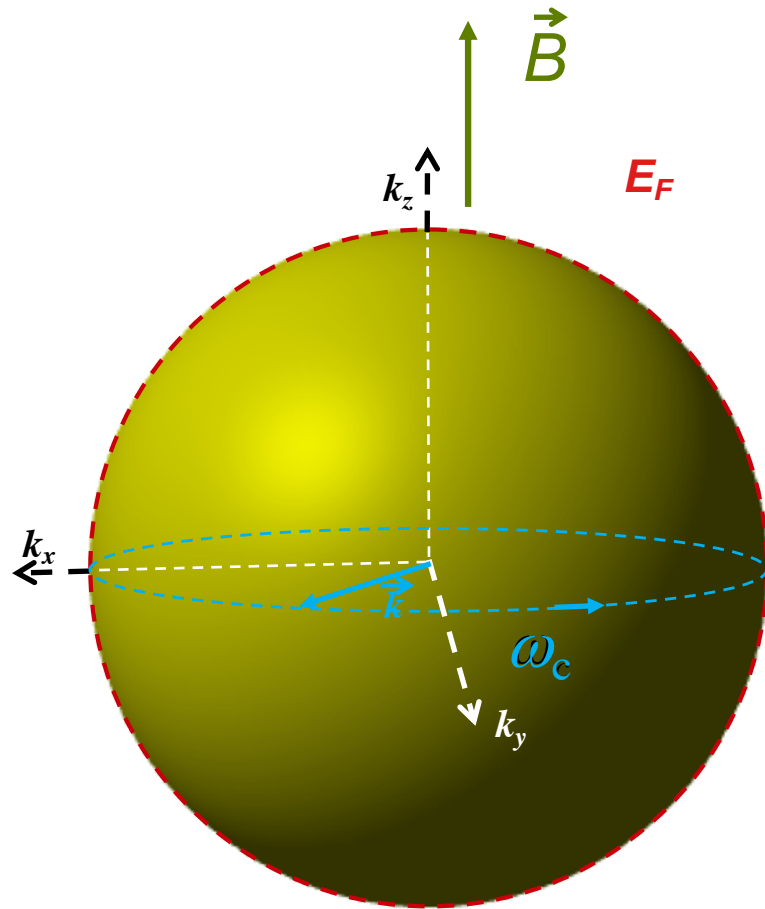


Freie Elektronen

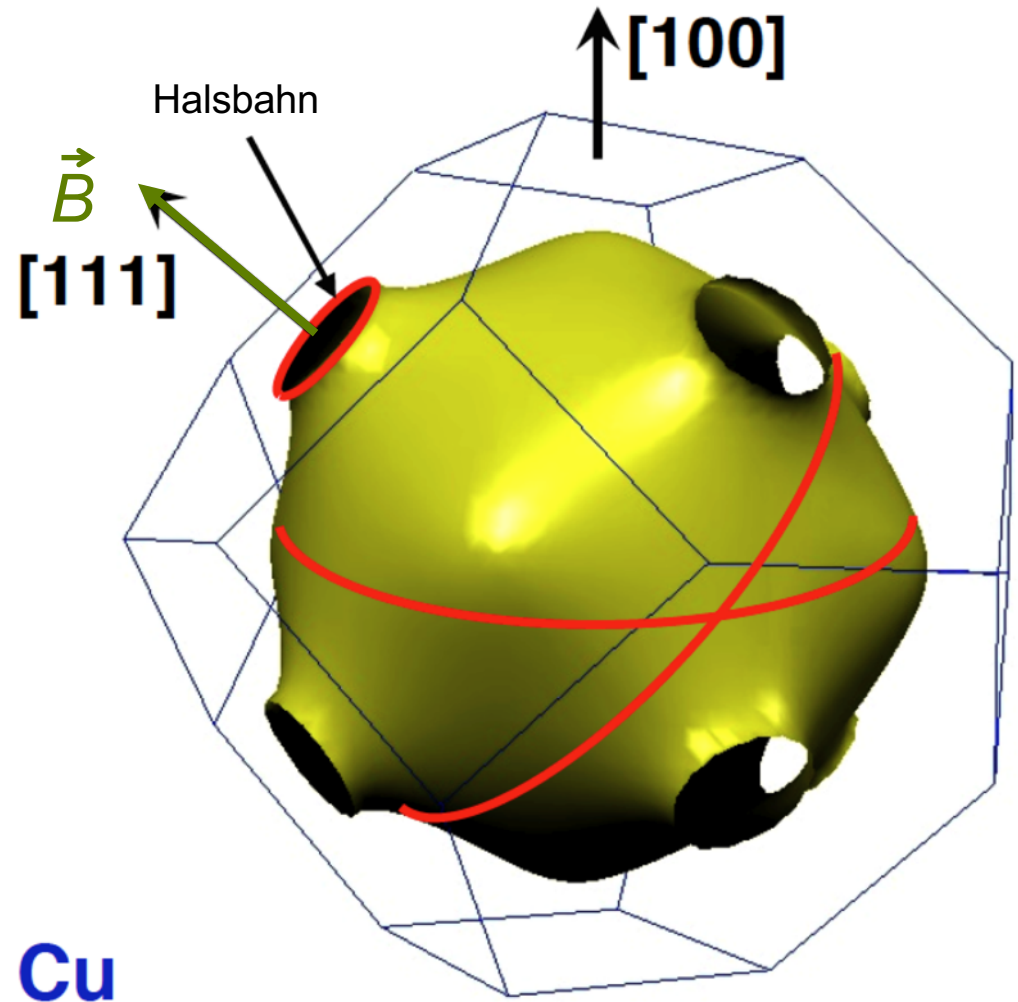


periodisches Potential $V(r) \neq 0$
hier: Fermi-Körper verlässt 1. BZ

Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):

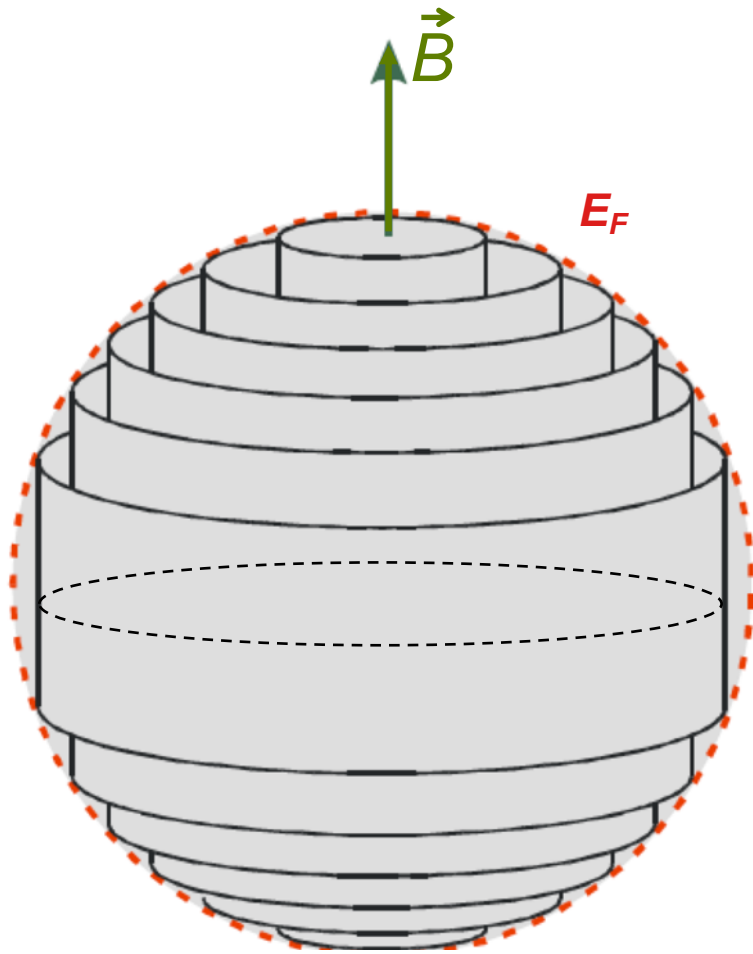


Freie Elektronen



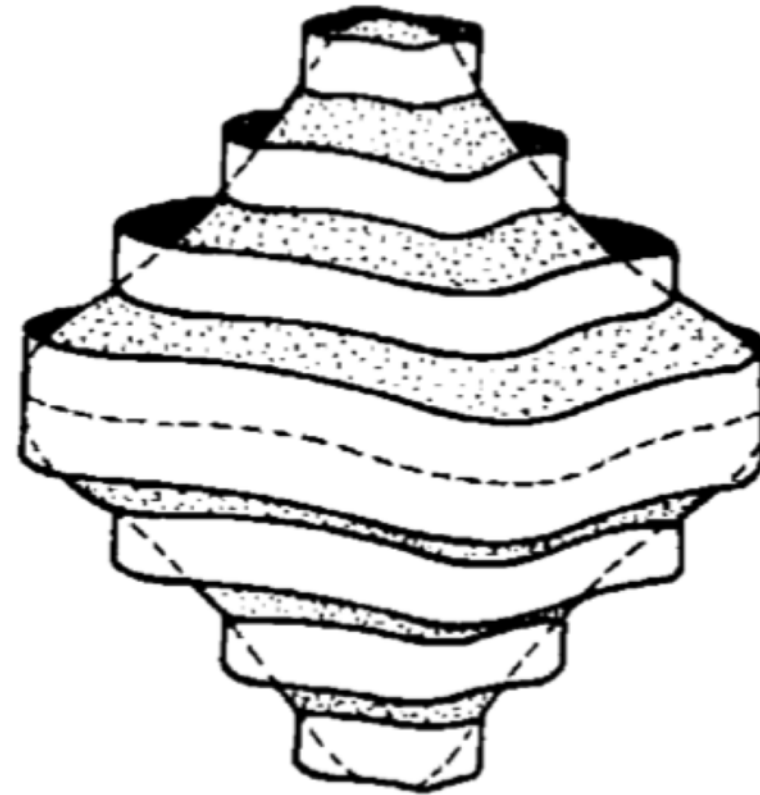
periodisches Potential $V(r) \neq 0$
hier: Fermi-Körper *verlässt* 1. BZ

Bahnen im Magnetfeld (starke Magnetfelder)



Freie Elektronen

Verformte Landau-Zylinder



periodisches Potential $V(r) \neq 0$ für
Fermi-Körper innerhalb 1. BZ