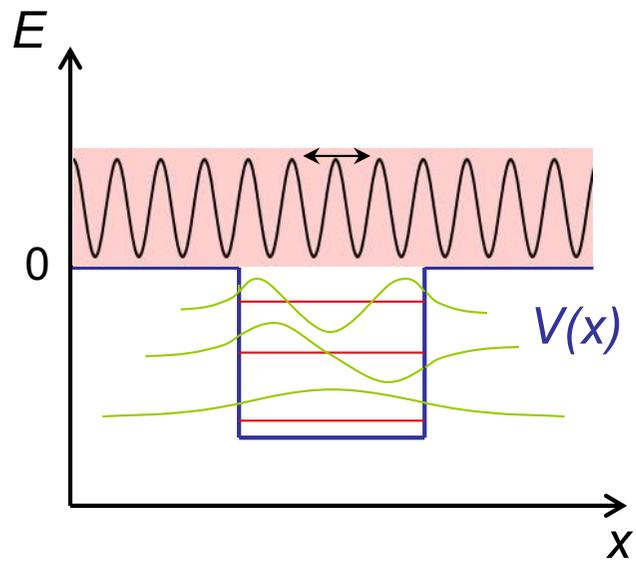
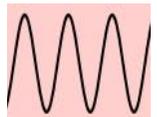


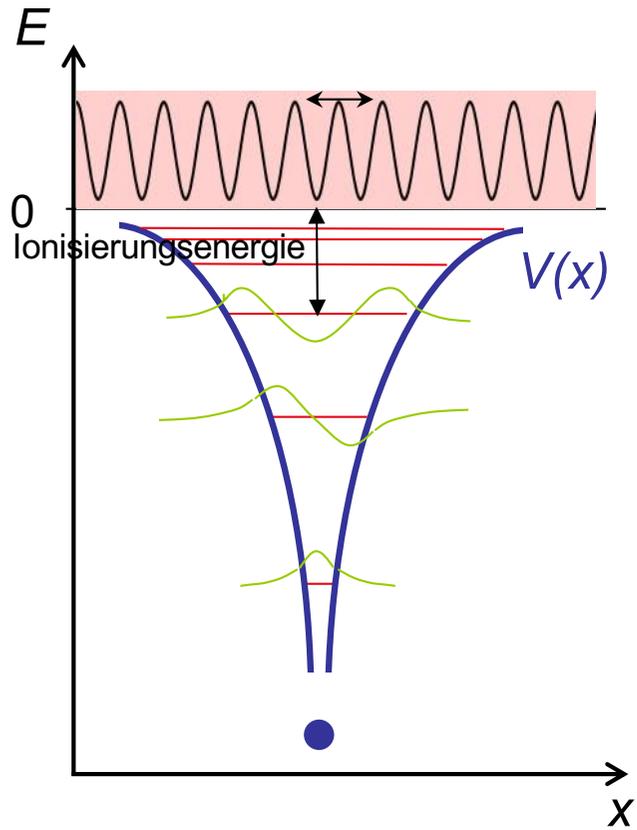
# 1D-Potentialtopf



— diskrete Energie-Eigenwerte  
— lokalisierte Wellenfunktionen

 kontinuierliches Energiespektrum  
laufende Wellen

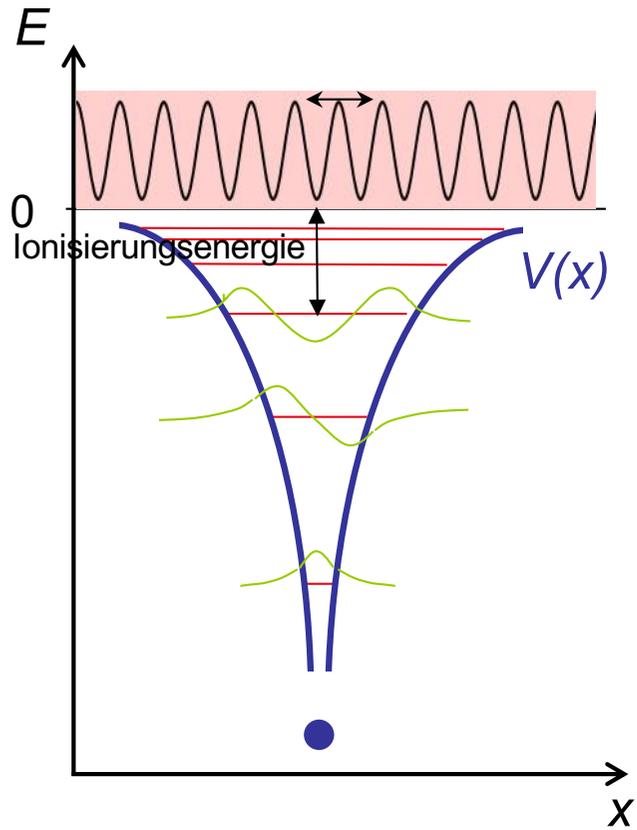
# freies Atom



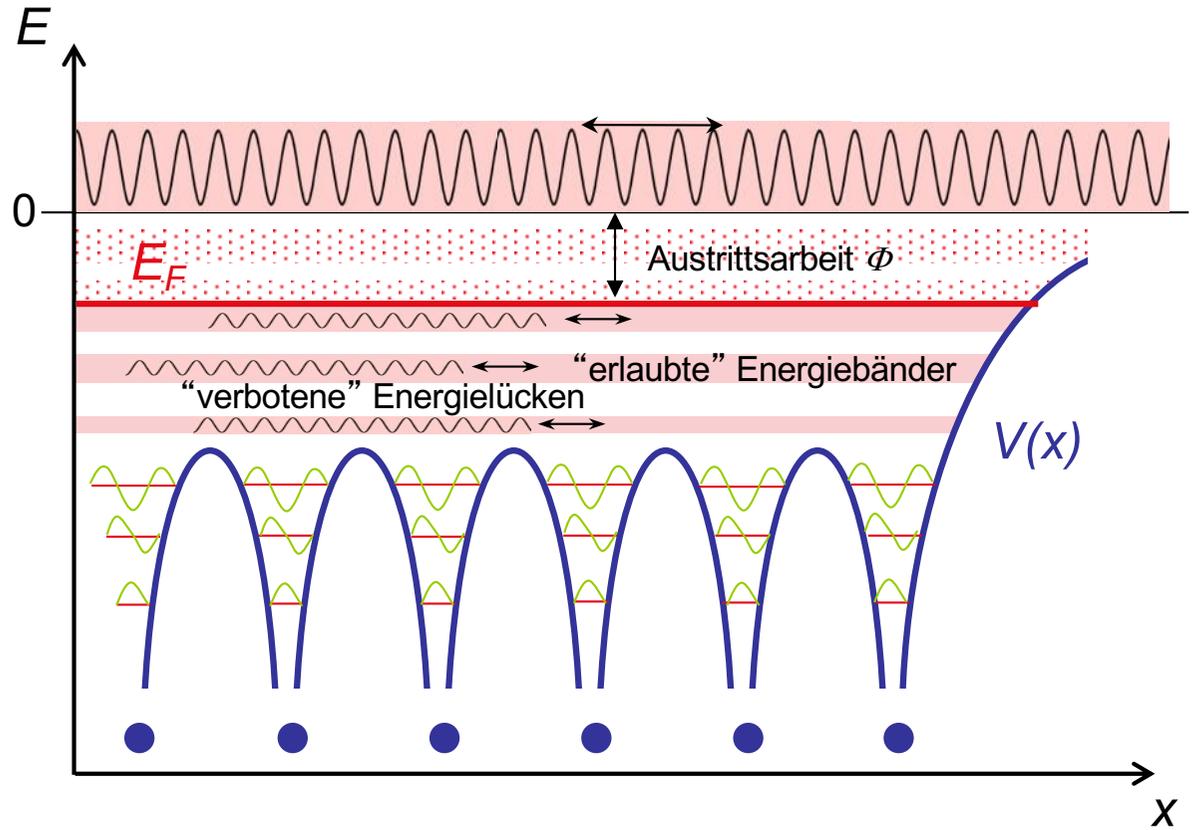
— diskrete Energie-Eigenwerte  
— lokalisierte Wellenfunktionen

— kontinuierliches Energiespektrum  
laufende Wellen

### freies Atom

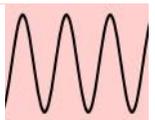


### Periodisches Potential

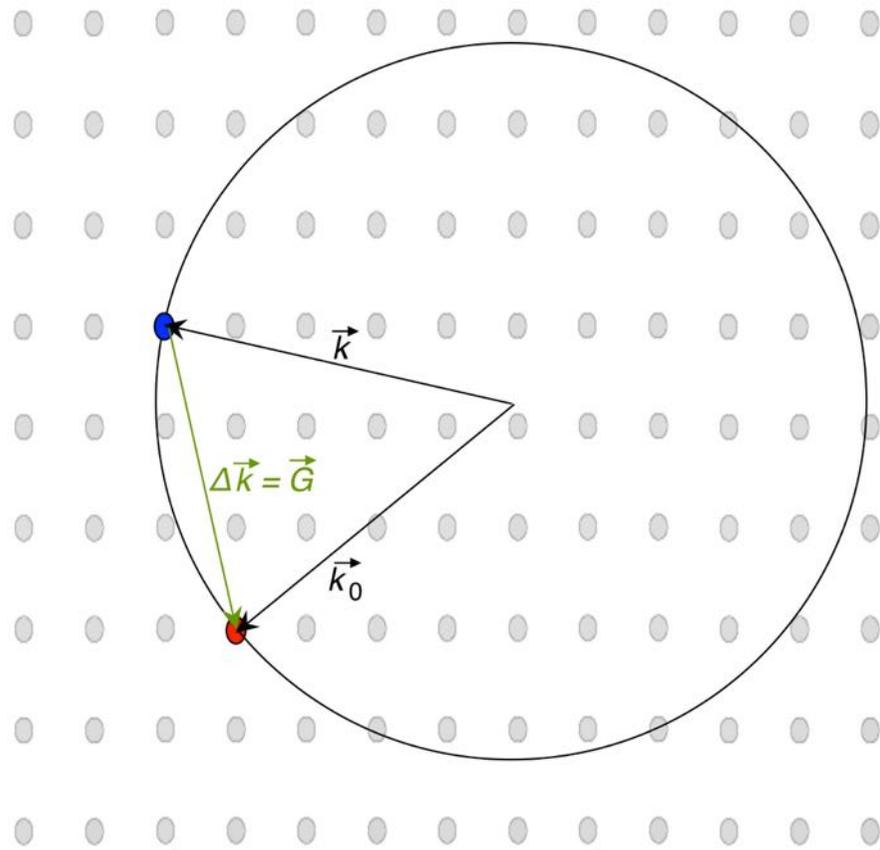


 diskrete Energie-Eigenwerte  
 lokalisierte Wellenfunktionen

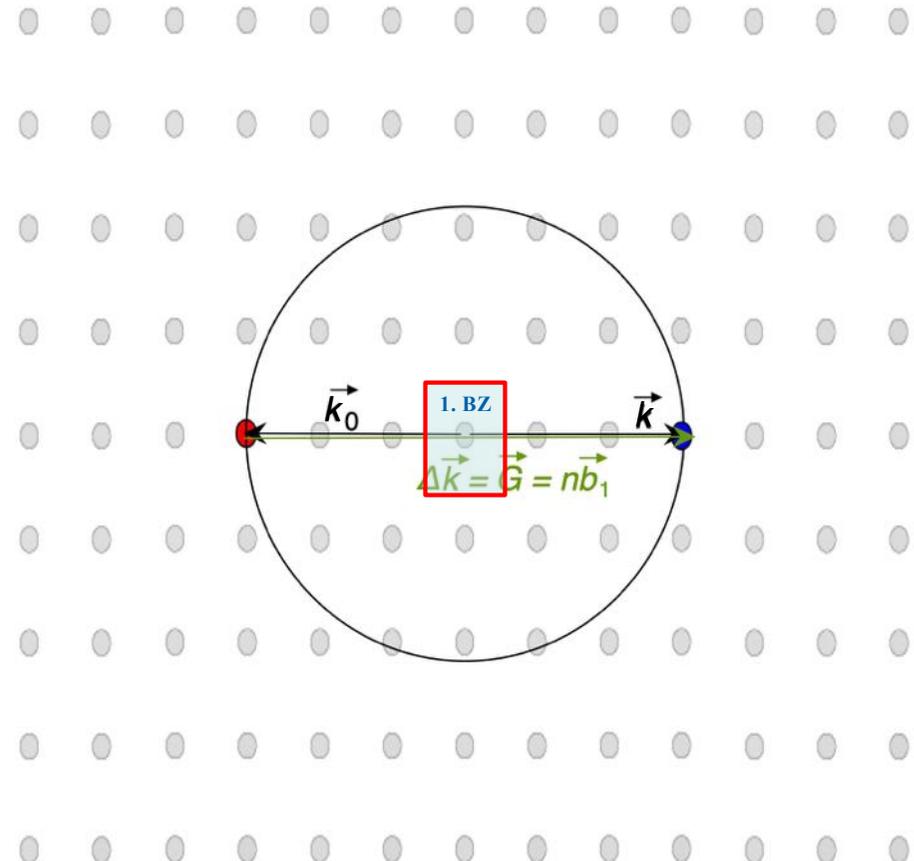
tiefer liegende atomare Orbitale (z.B. 1s, 2s, 2p,...)

 kontinuierliches Energiespektrum  
 laufende Wellen

# Bragg Reflexion



Reziprokes Gitter



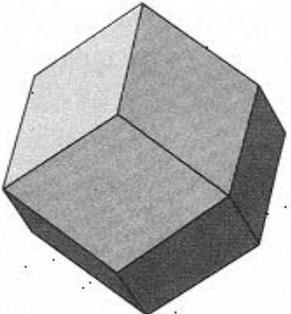
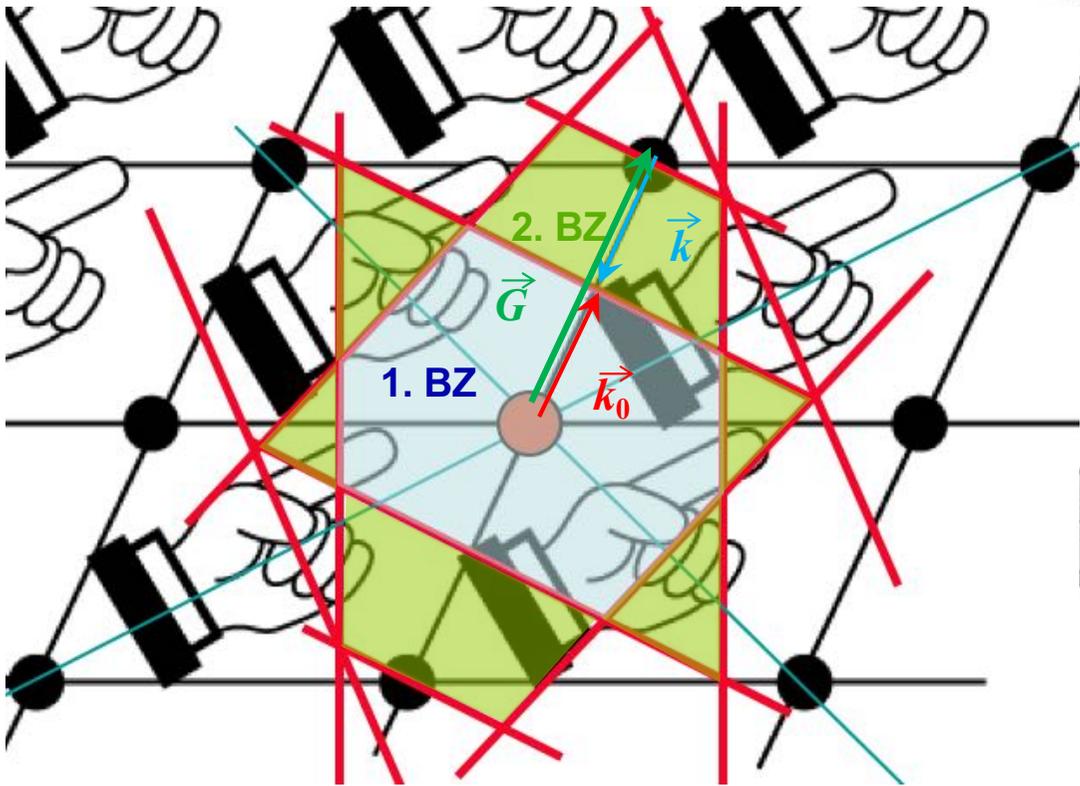
$\vec{k}_0$  senkrecht zum Zonenrand -  
vollständige Rückwärts-Reflexion:  
stehende Wellen

# Brillouin-Zonen:

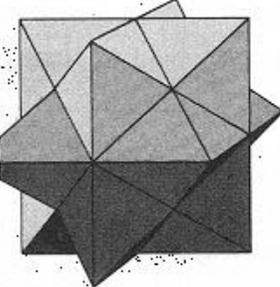
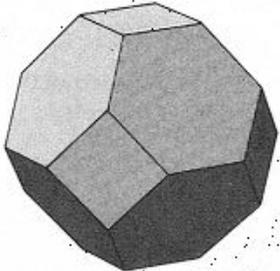
## Brillouin Zonenränder im reziproken Raum:

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

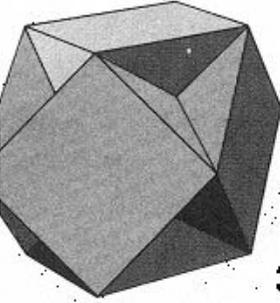
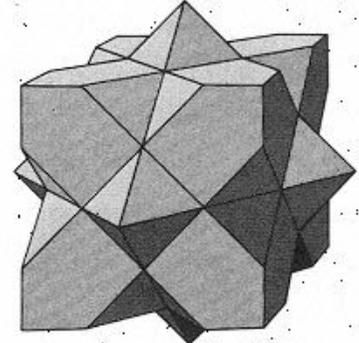
$$\Delta \vec{k} = \vec{k}_0 - \vec{k} = \vec{G}$$



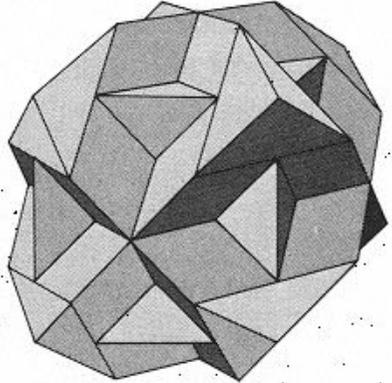
1. BZ



2. BZ



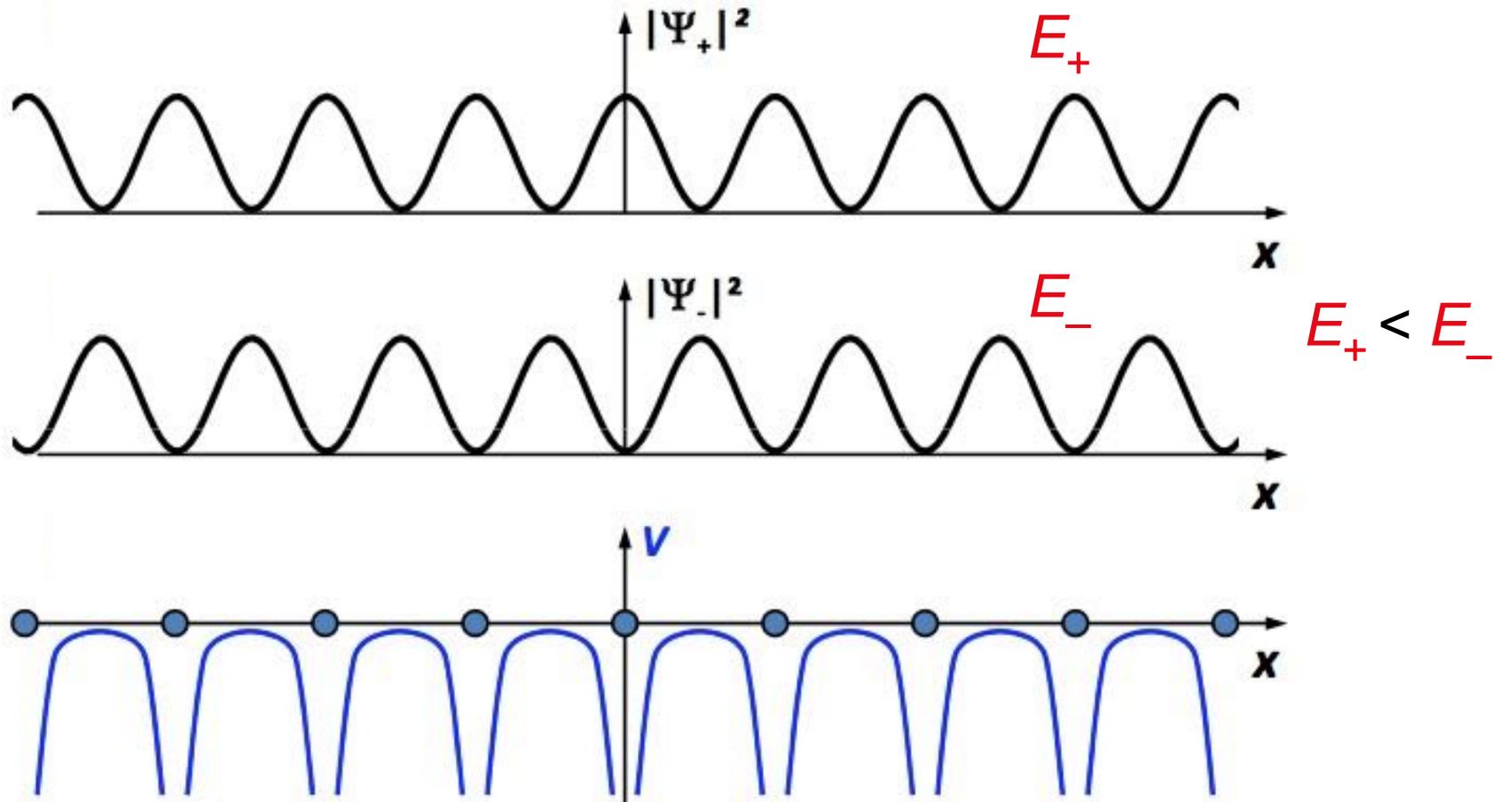
3. BZ



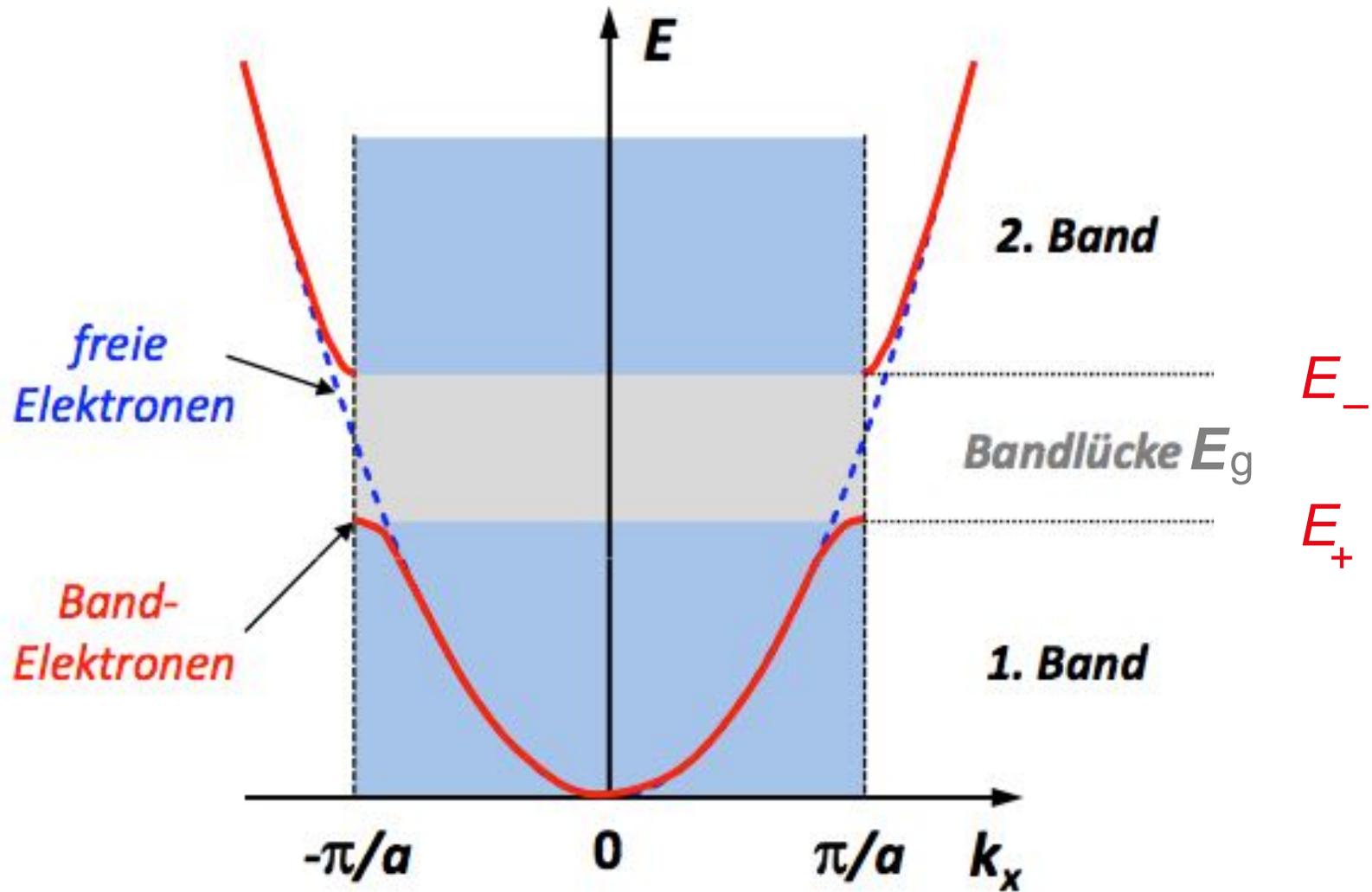
bcc

fcc

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

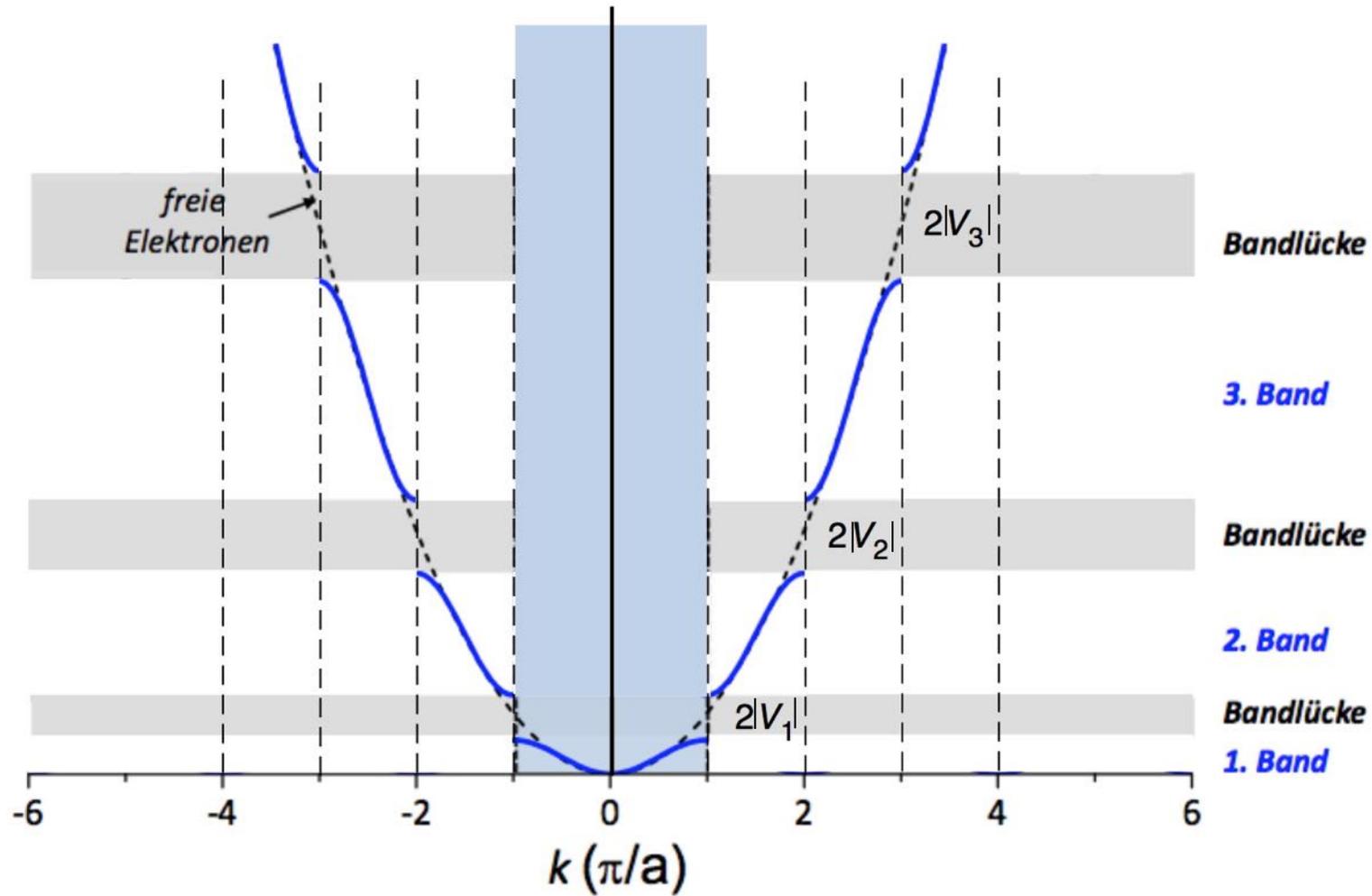


Stehende Wellen in 1D für  $k = \pm b/2 = \pm \pi/a$

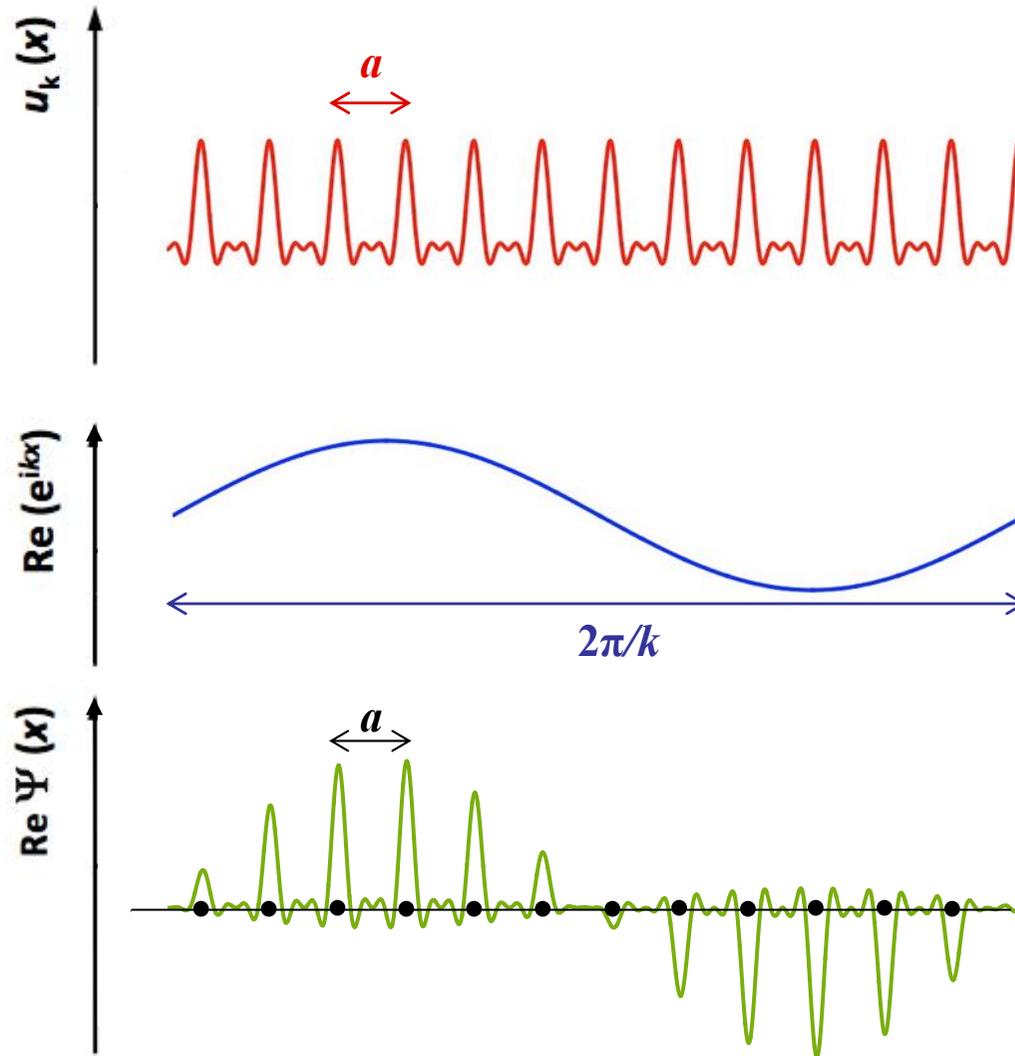


# Energiebänder und Energielücken

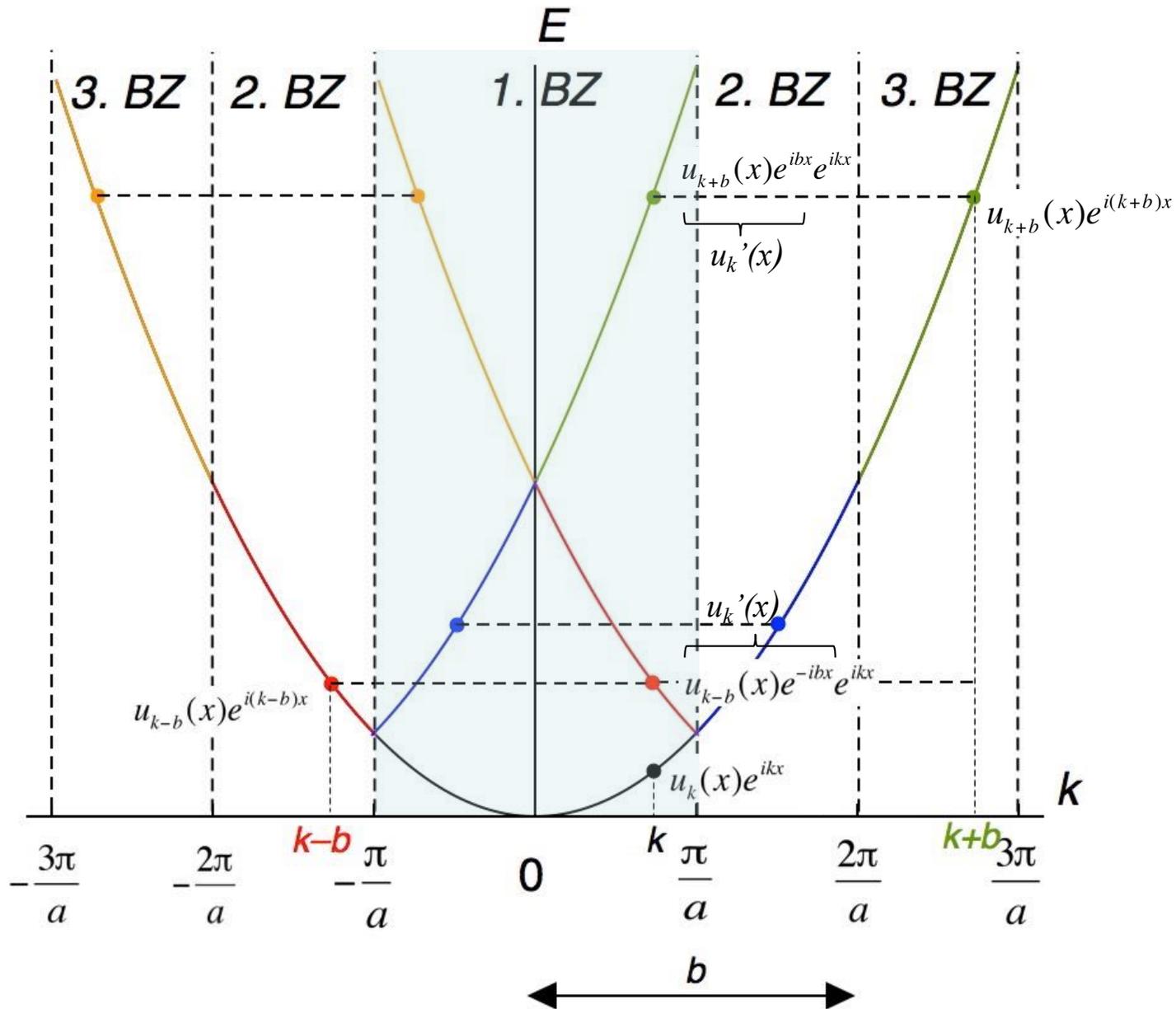
im 1D periodischen Potential  $V(x) = \sum_n \exp(2\pi i n x / a) V_n$



# Bloch-Welle

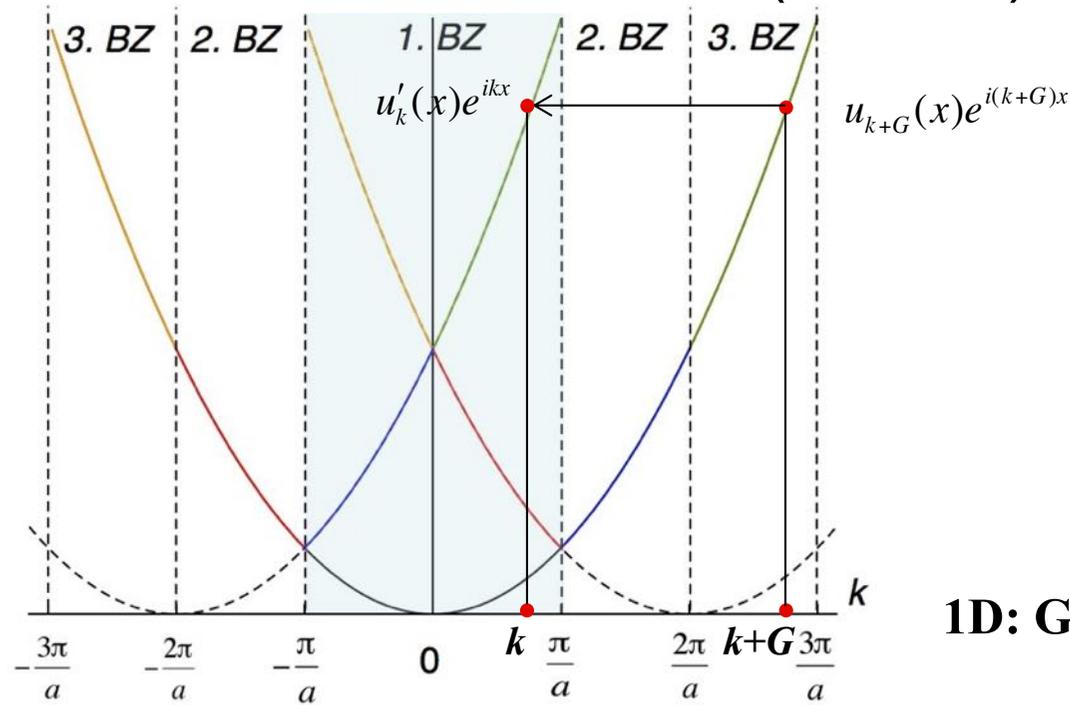


# Reduziertes Zonenschema (für $V=0$ )

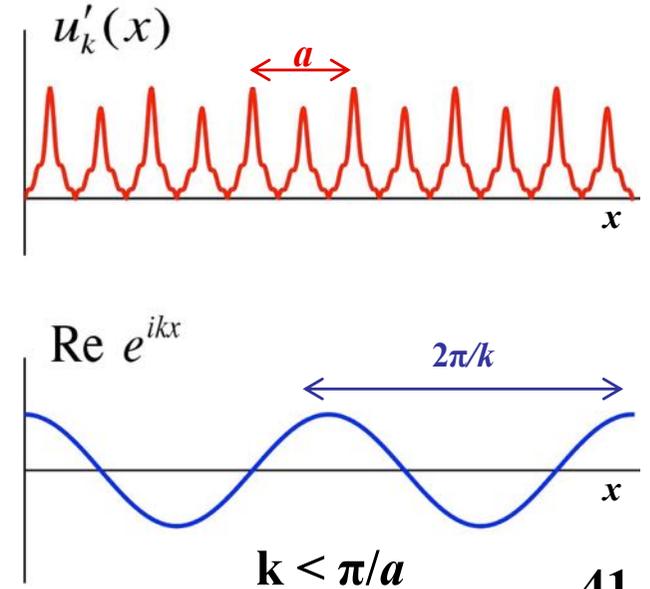
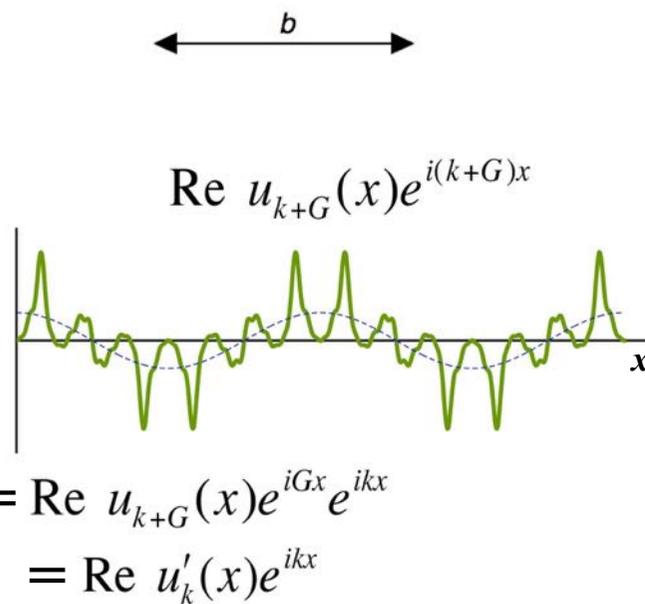
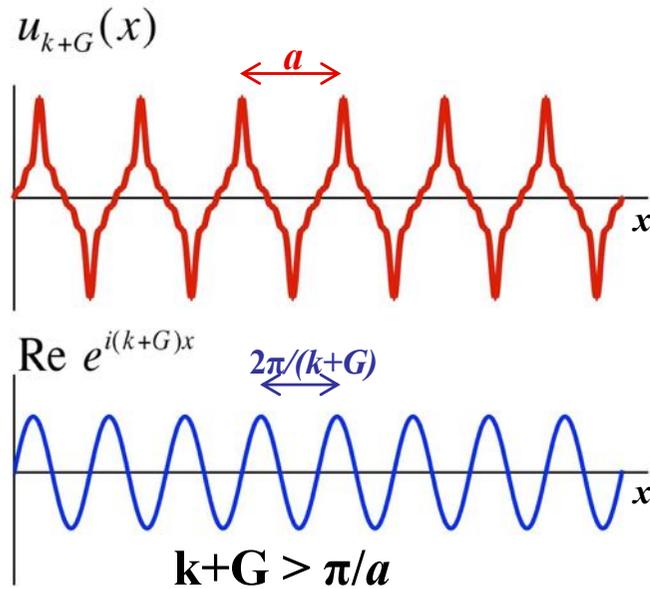


# Reduziertes Zonenschema (für $V=0$ )

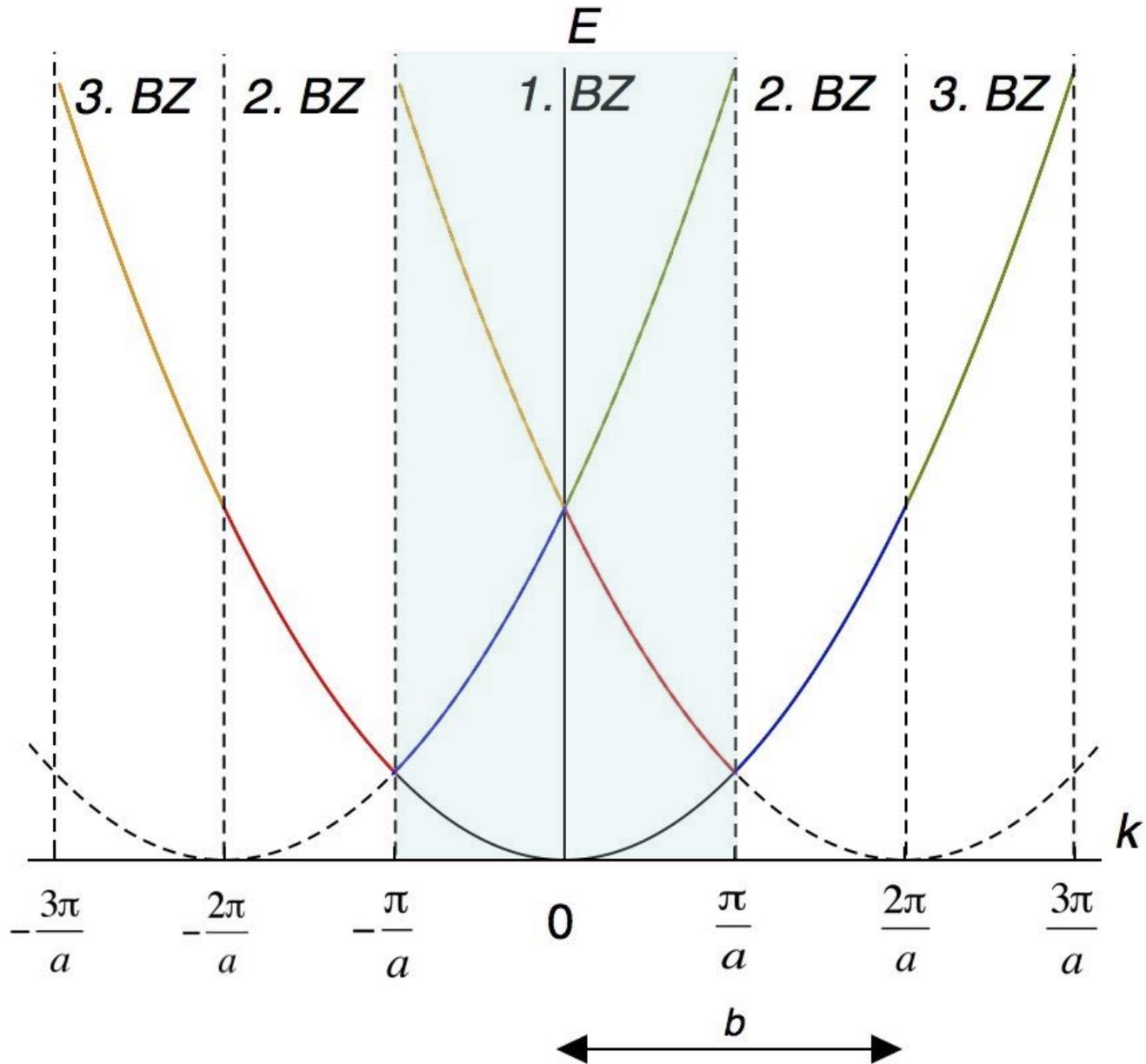
„Zurückklappen“



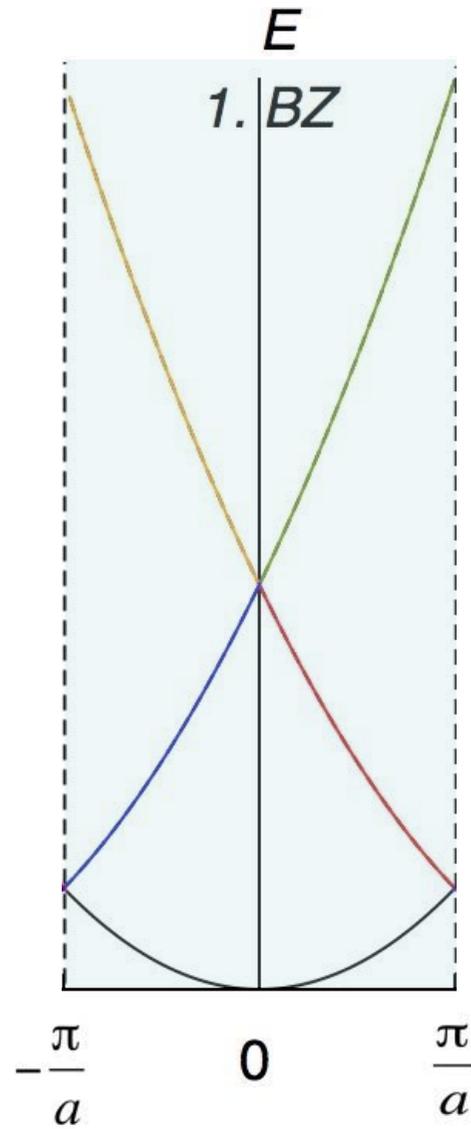
**1D:  $G = nb = n2\pi/a$**



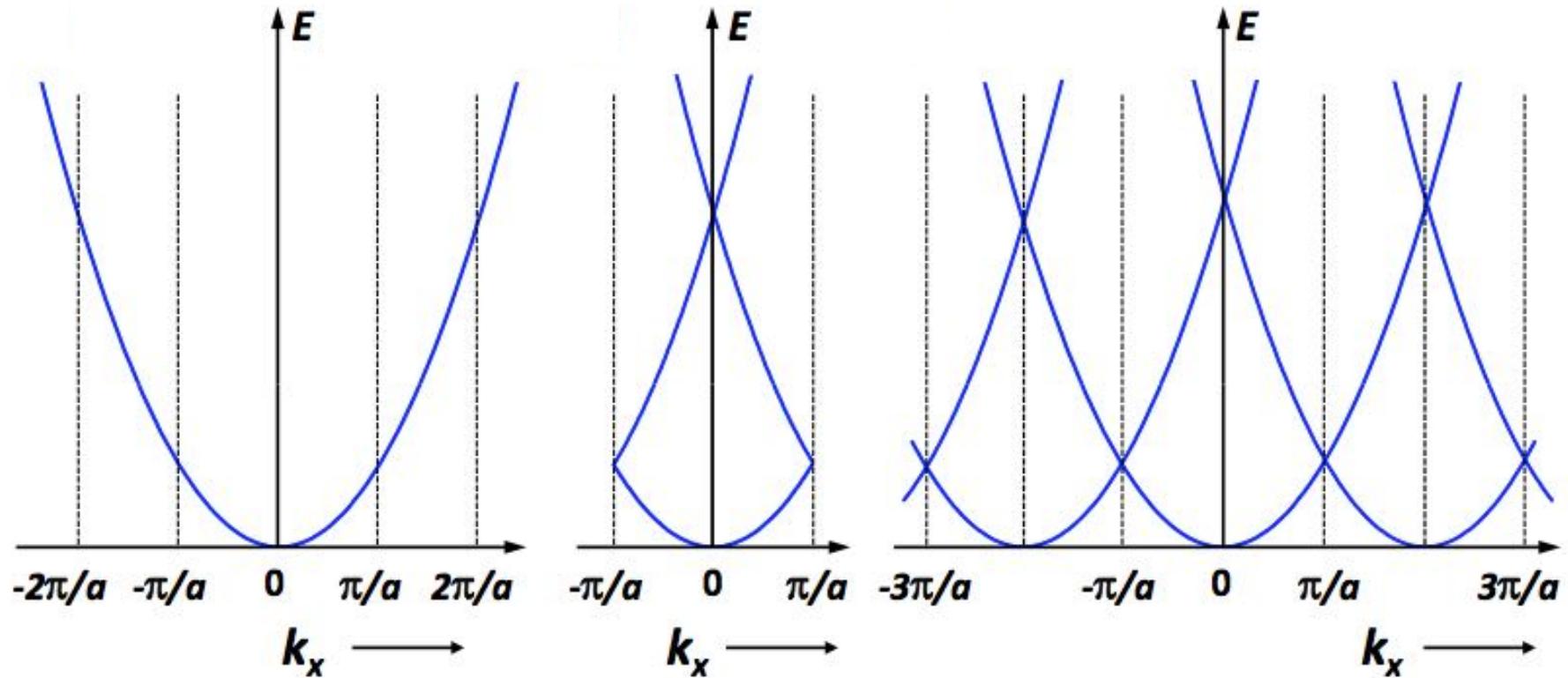
# Periodisches Zonenschema (für $V=0$ )



# Reduziertes Zonenschema (für $V=0$ )



# Zonenschemata (für $V=0$ )

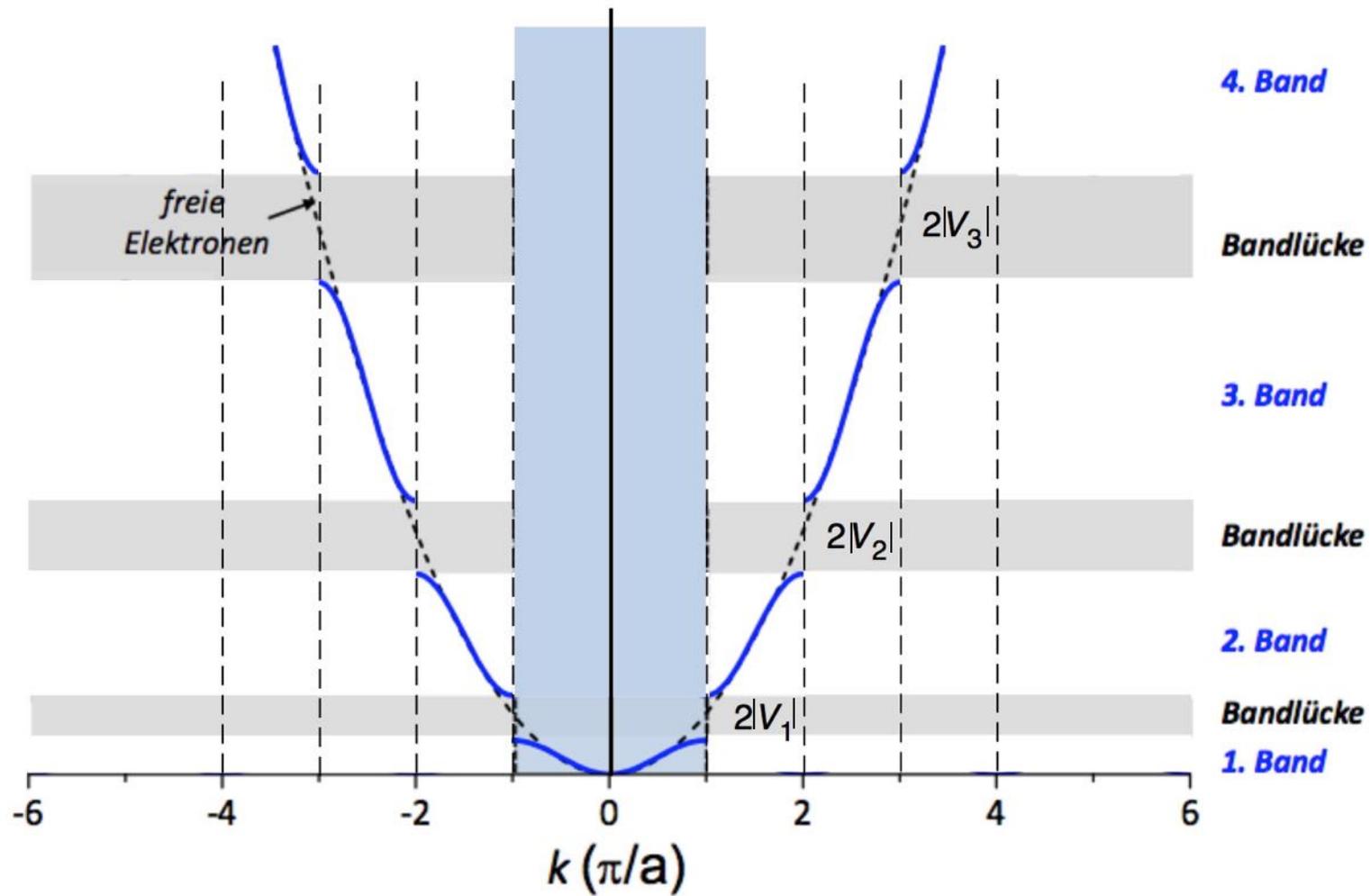


Ausgedehntes Zonenschema

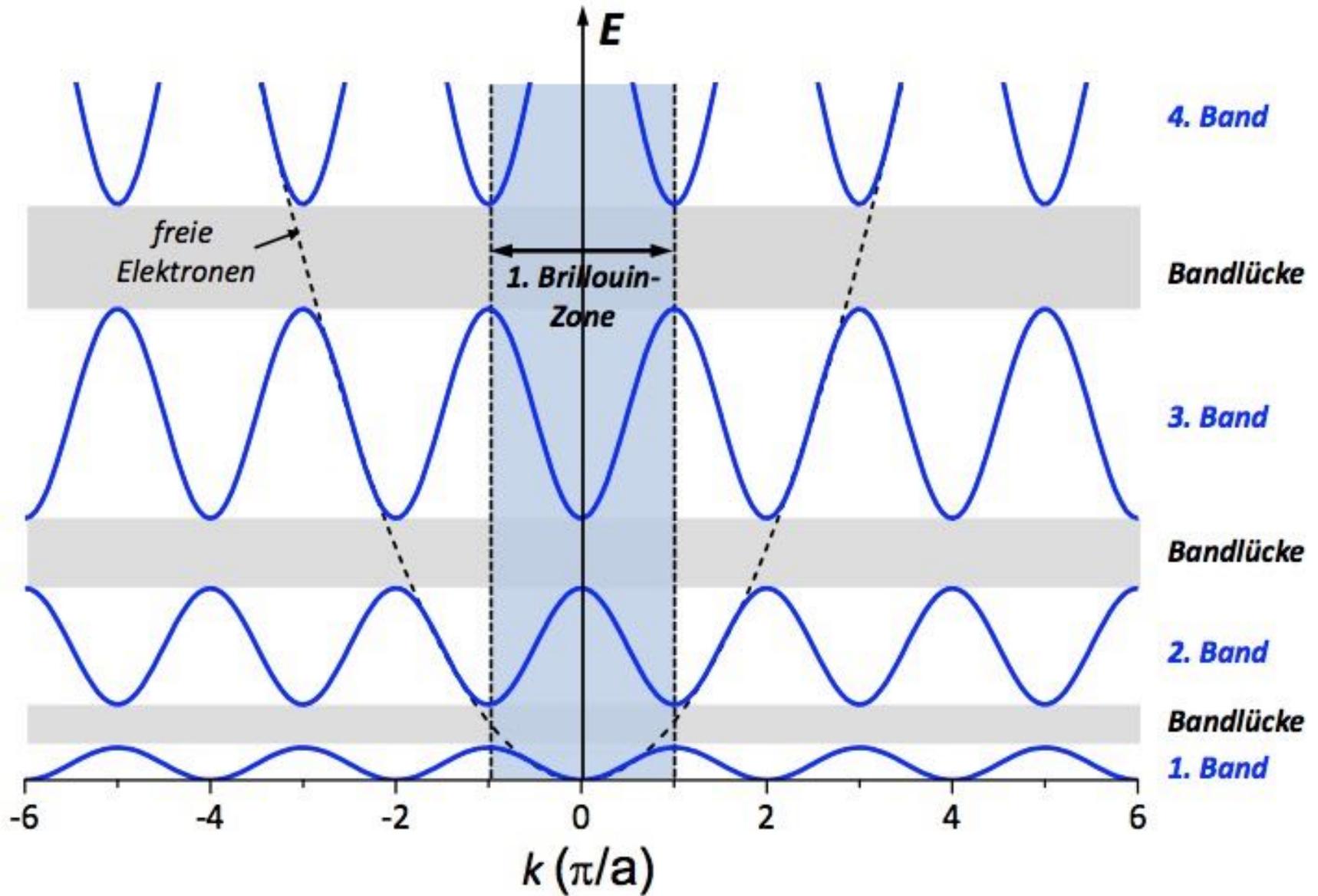
Reduziertes Zonenschema

Periodisches Zonenschema

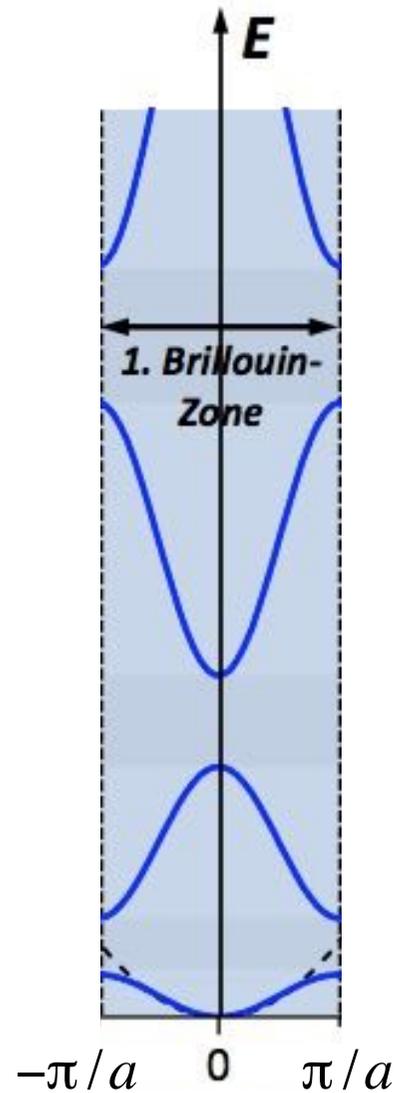
# Ausgedehntes Zonenschema für ein 1D periodisches Potential $V(x) \neq 0$



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



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



**4. Band**

**Bandlücke**

**3. Band**

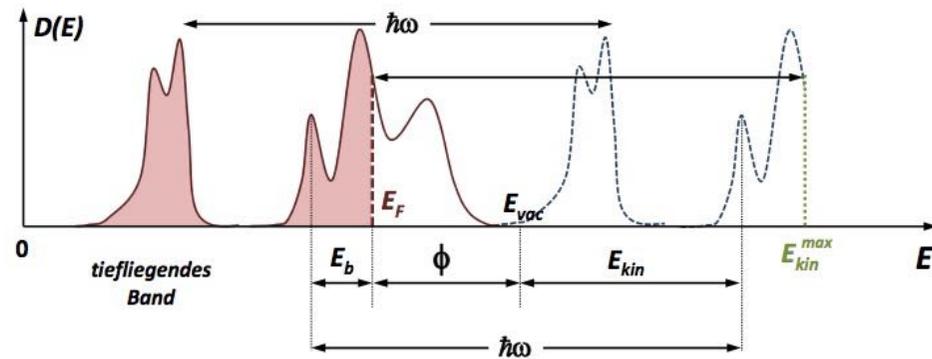
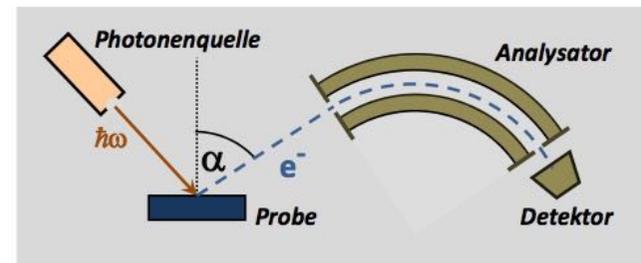
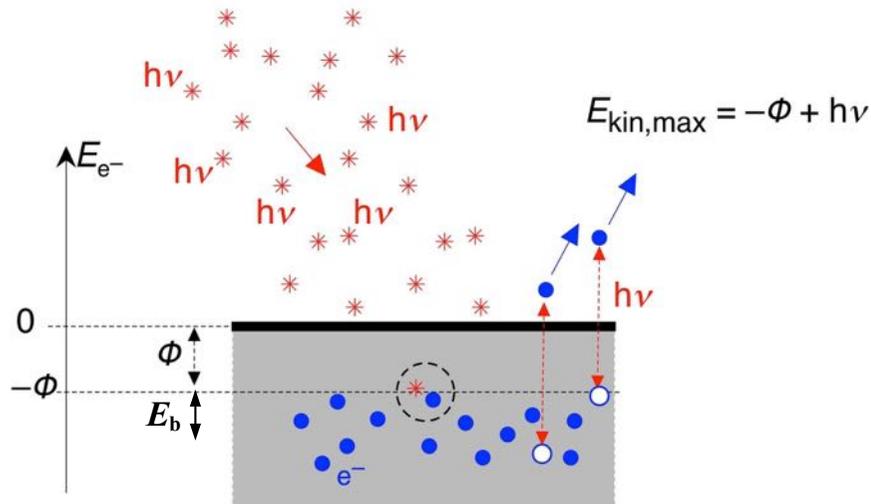
**Bandlücke**

**2. Band**

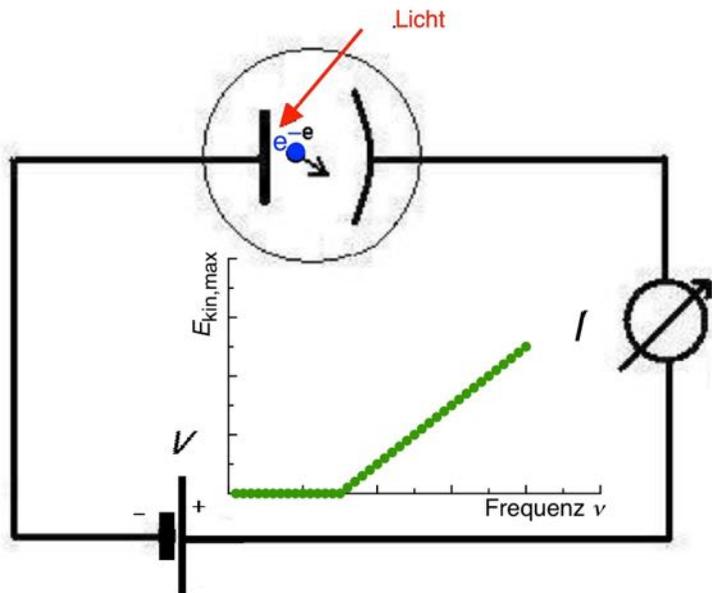
**Bandlücke**

**1. Band**

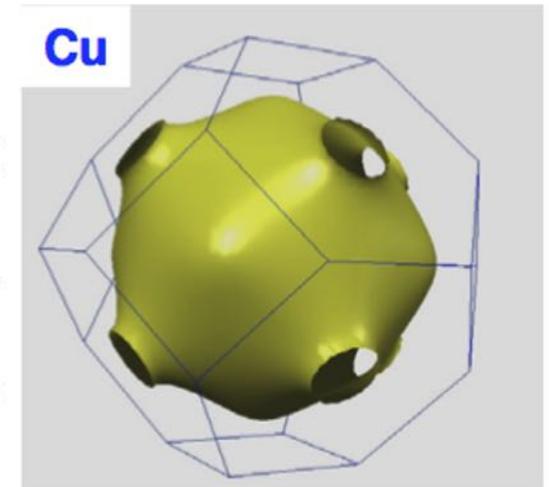
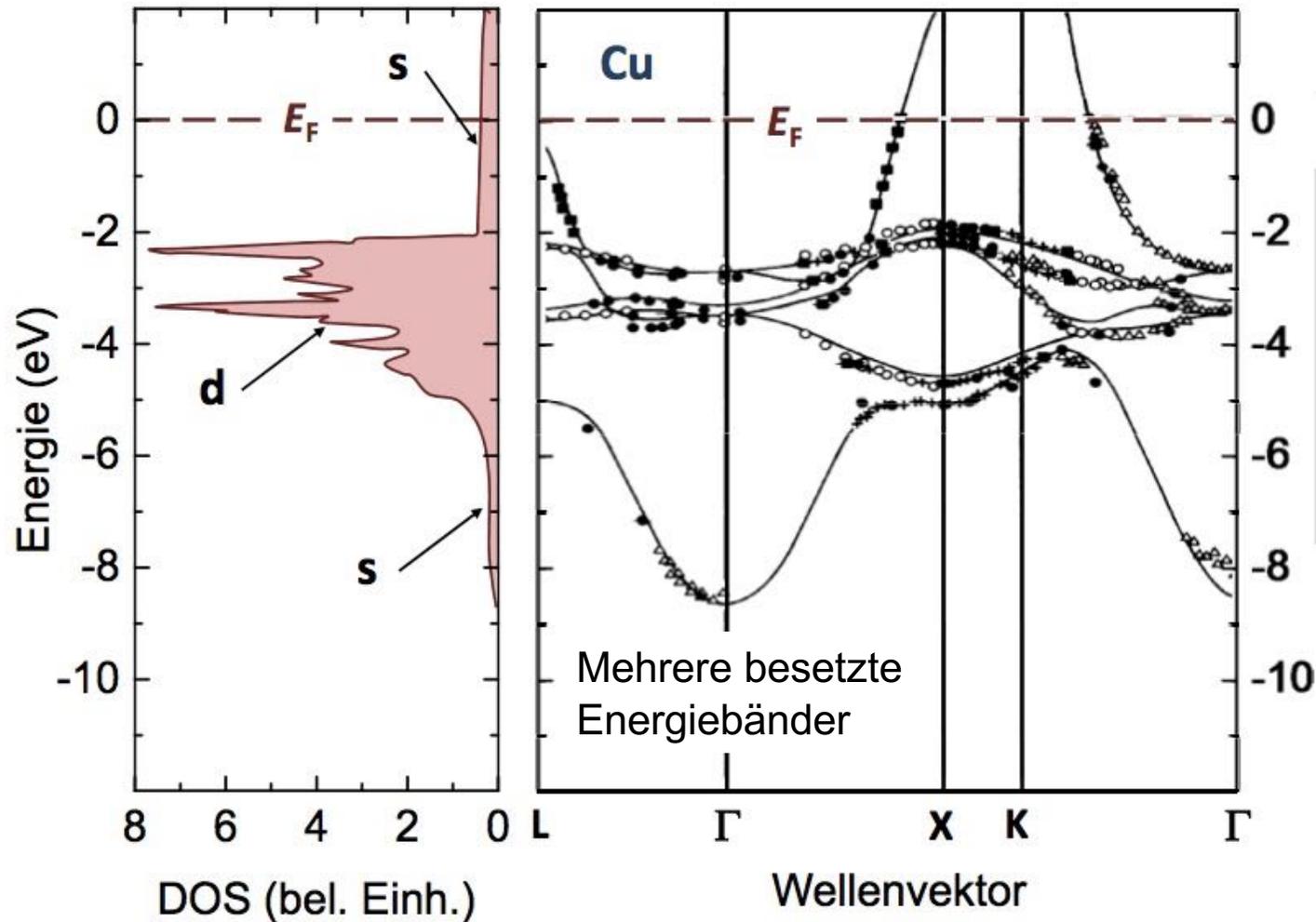
# Messung der Energiebänder und der elektronischen Zustandsdichten: Photoemission (Photoeffekt)



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  $\phi = E_{\text{vac}} - E_F$ . Die Elektronen werden aus den besetzten Bändern in das Quasikontinuum der unbesetzten Zustände angeregt.



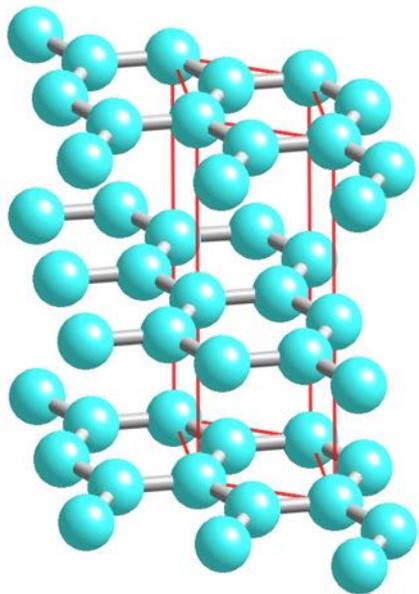
# Kupfer



Fermi-Fläche (1. BZ)

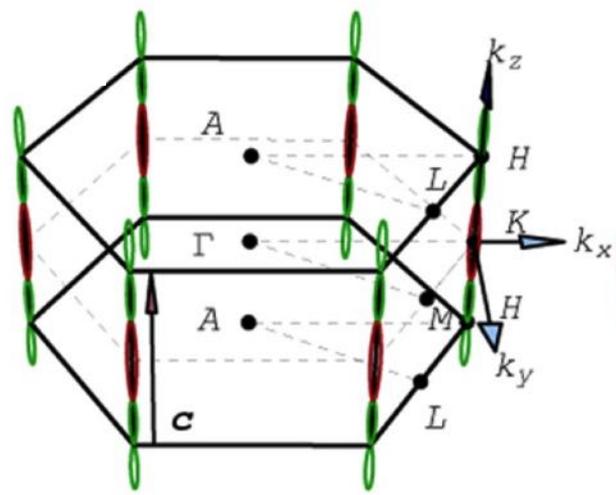
Bandstruktur  $E(\mathbf{k})$  von Kupfer entlang der Richtungen hoher Symmetrie. Links ist die resultierende Zustandsdichte gezeigt (die Symbole entsprechen experimentellen Daten aus R. Courths und S. Hüfner, Phys. Rep. **112**, 55 (1984)).

# Graphit mit winkelaufgelöster Photoemission

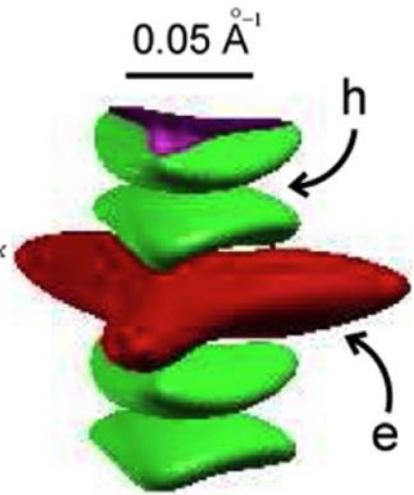


Kristallstruktur

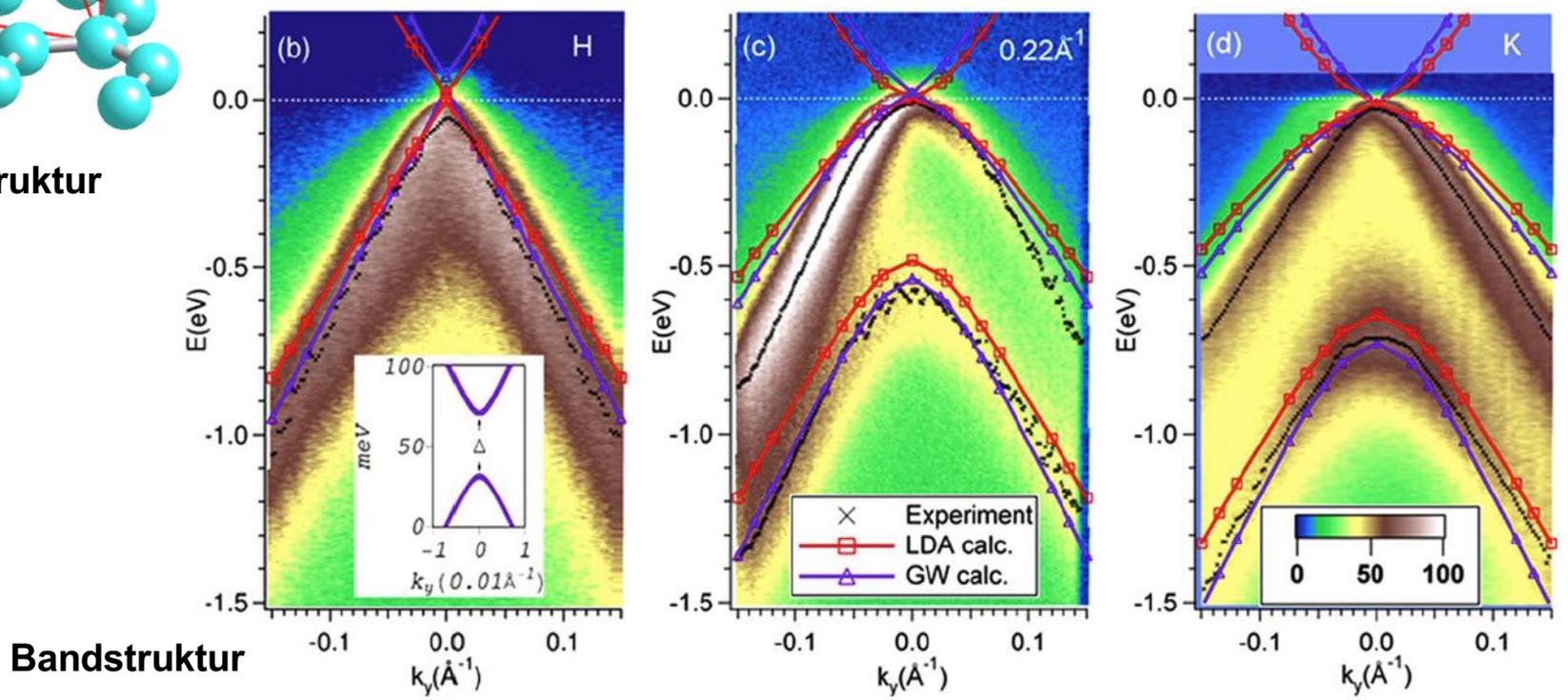
Graphit



Brioullin-Zone



Fermi-Körper

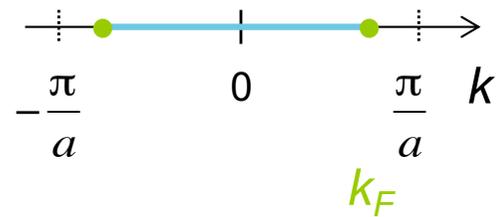
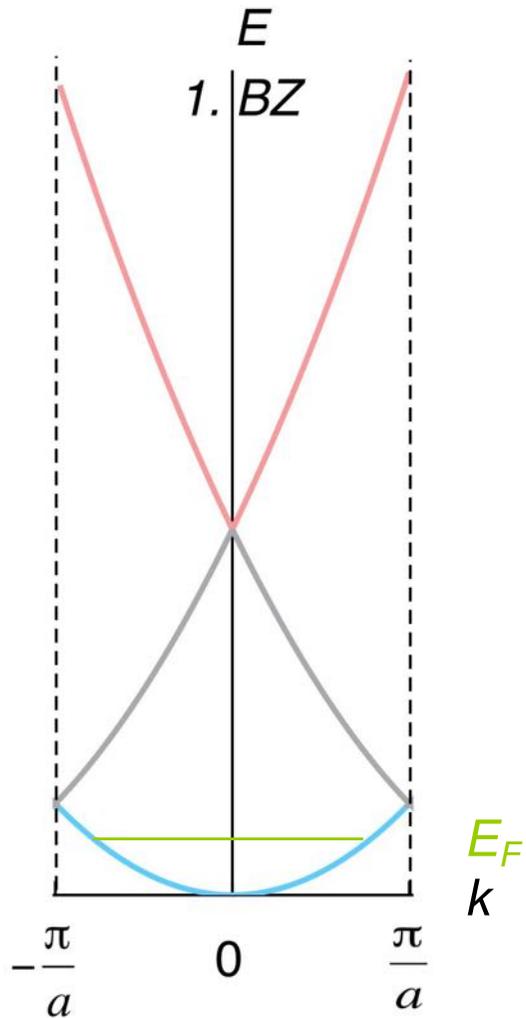


Bandstruktur

Flächen konstanter Energie

1D

freie Elektronen

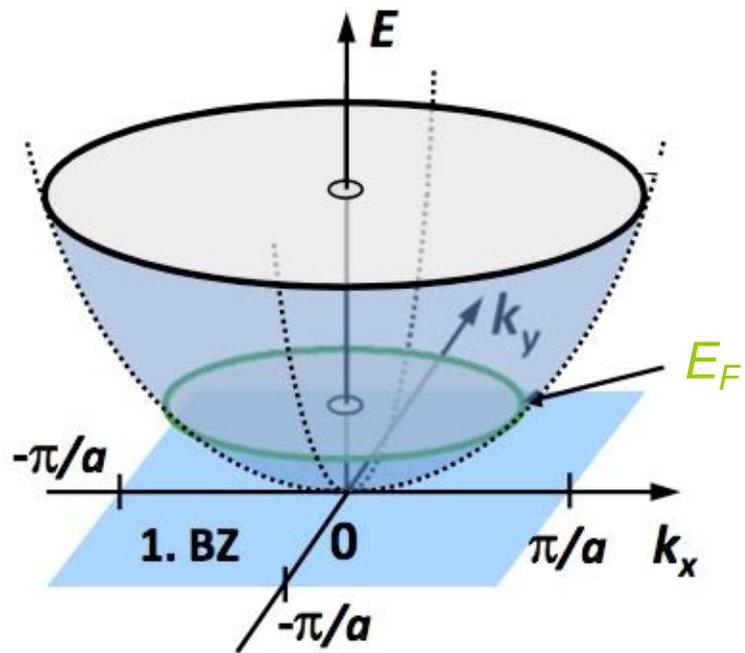


Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

2D

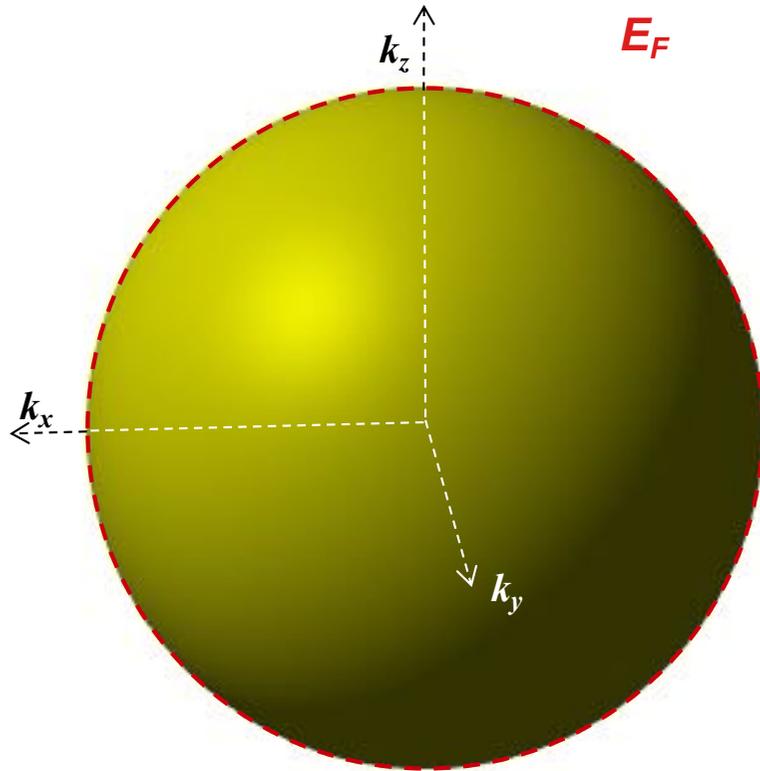
freie Elektronen



Flächen konstanter Energie

3D

freie Elektronen

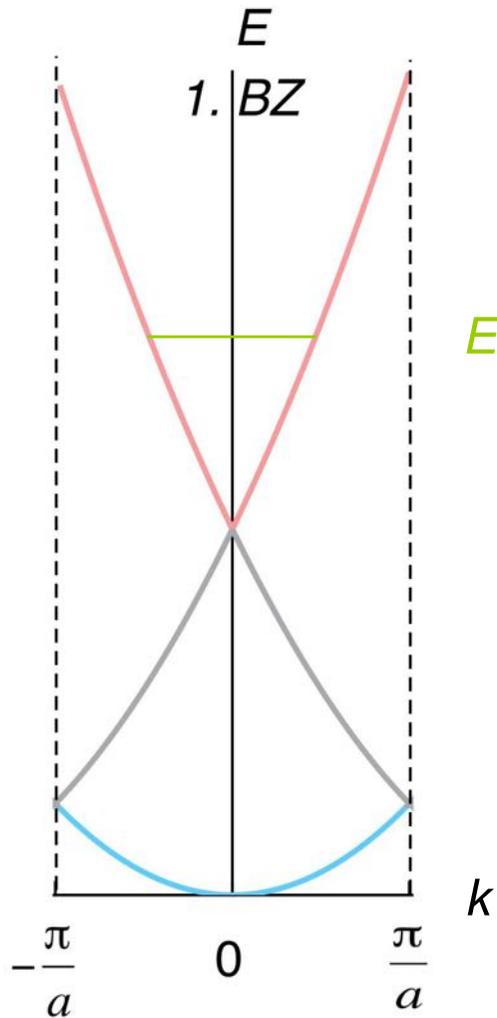


Freie Elektronen

Flächen konstanter Energie

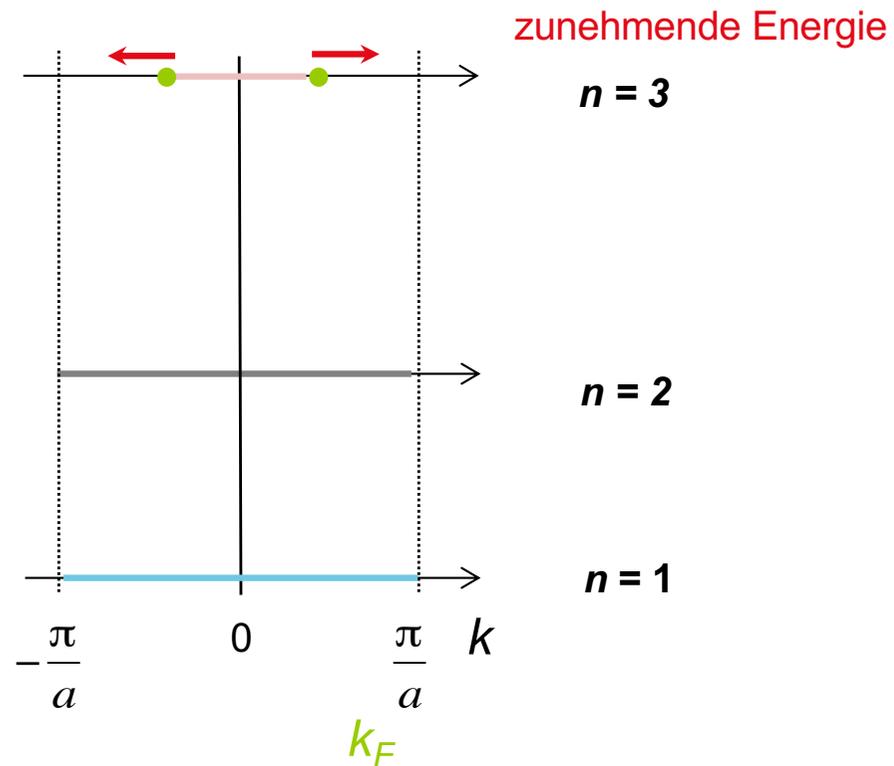
1D

freie Elektronen



$E_F$

$k$



zunehmende Energie

$n = 3$

$n = 2$

$n = 1$

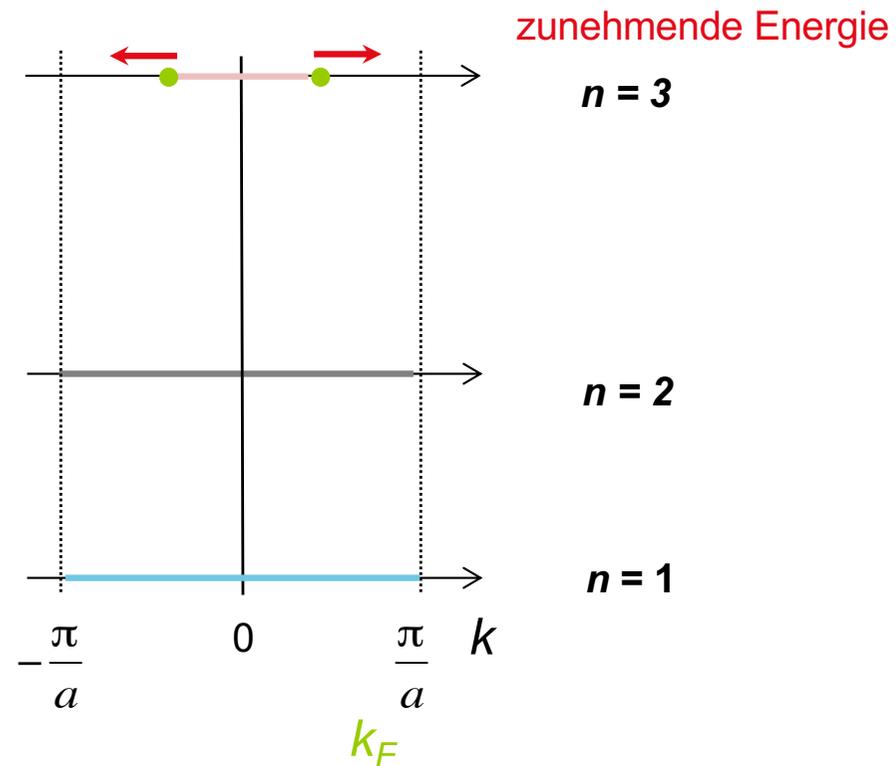
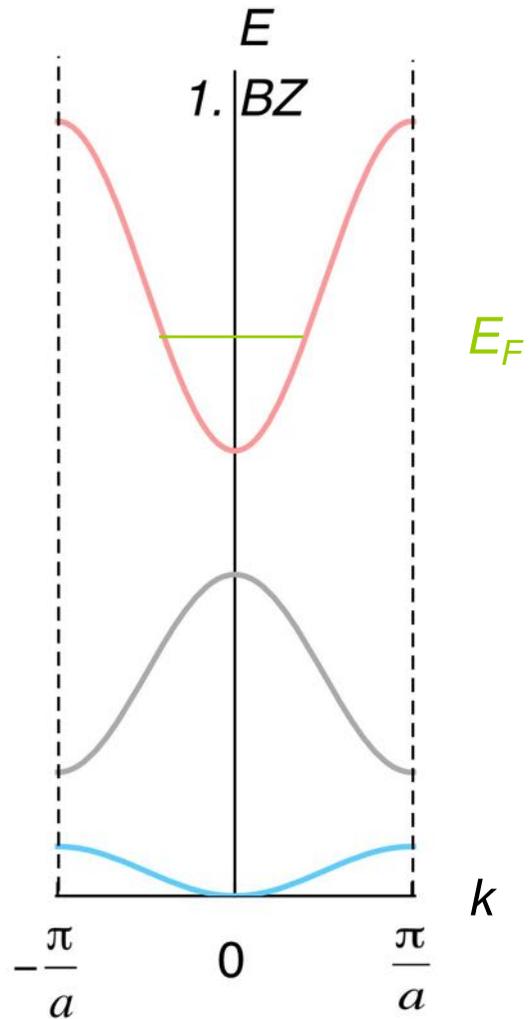
$k_F$

Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

1D

periodisches Potential  $V(x) \neq 0$

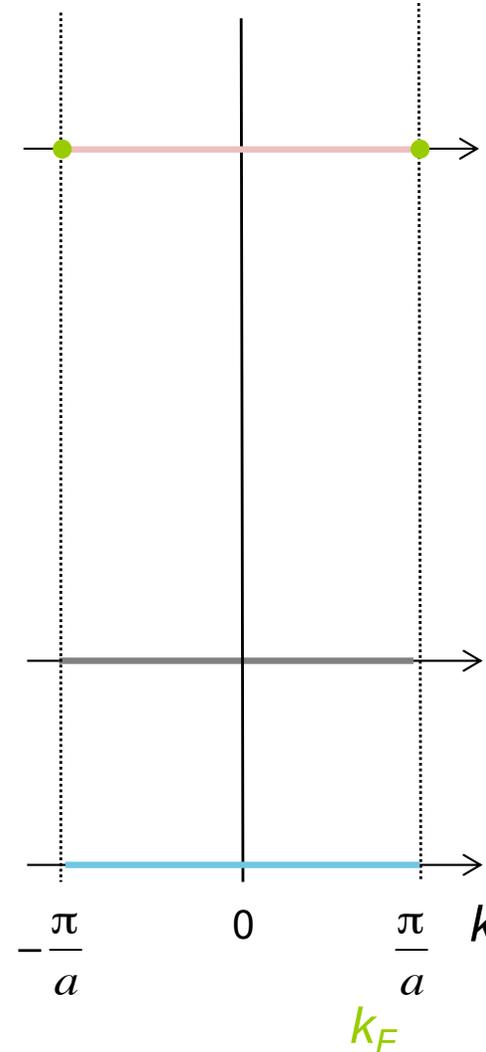
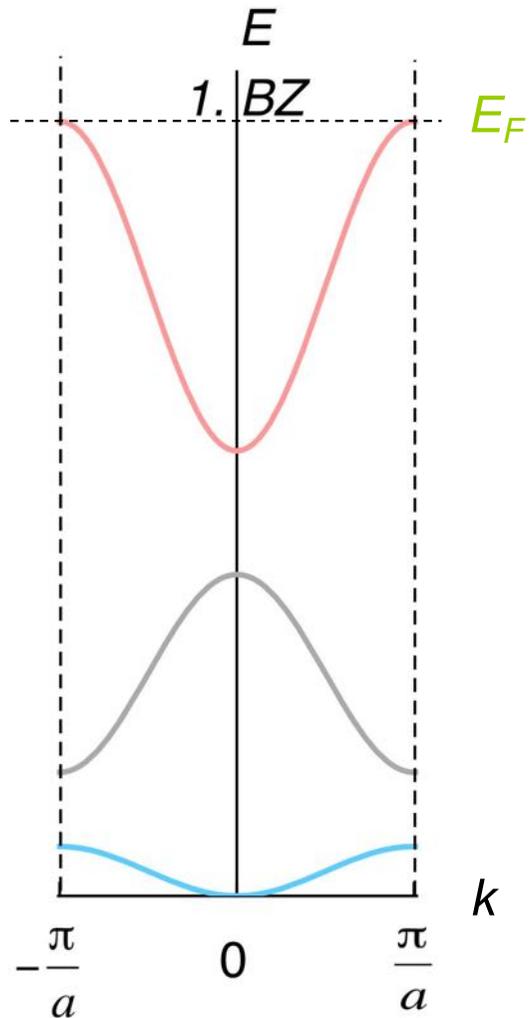


Reduziertes Zonenschema

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)

$n = 3$

$n = 2$

$n = 1$

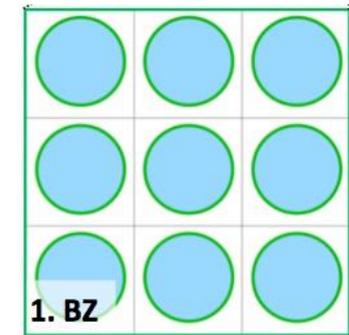
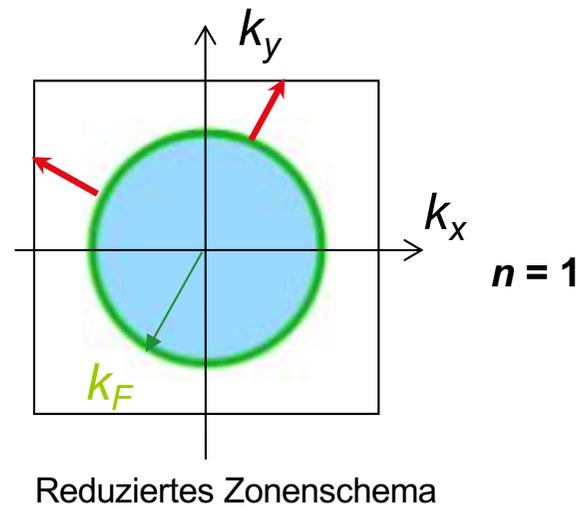
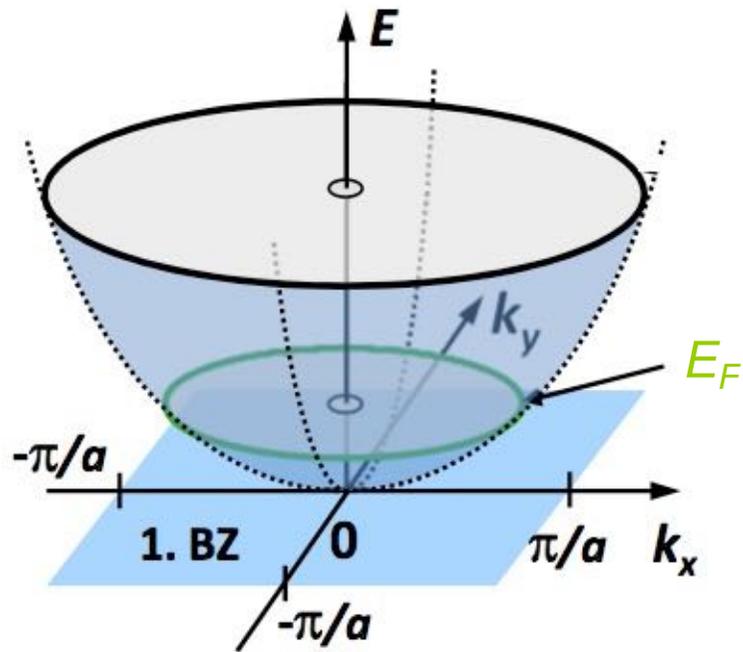
Reduziertes Zonenschema

Flächen konstanter Energie

2D

freie Elektronen

Fermi-Grenze innerhalb der 1. BZ:



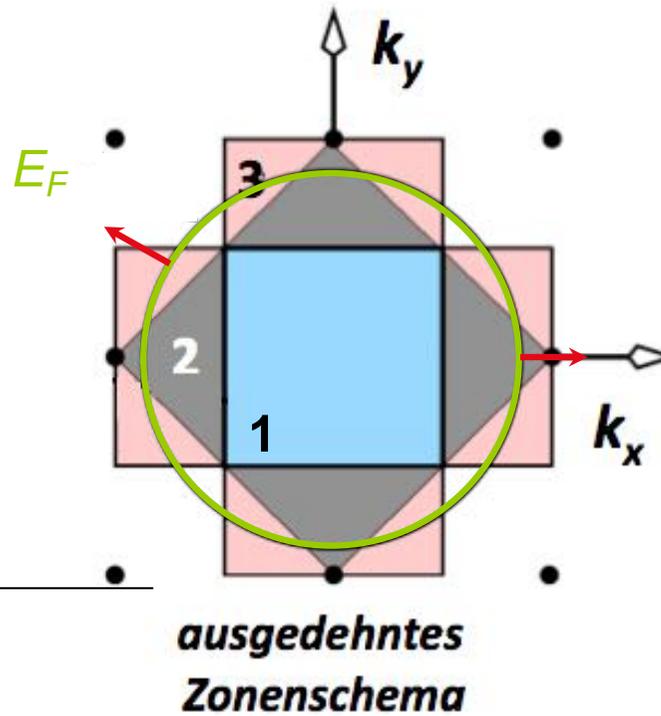
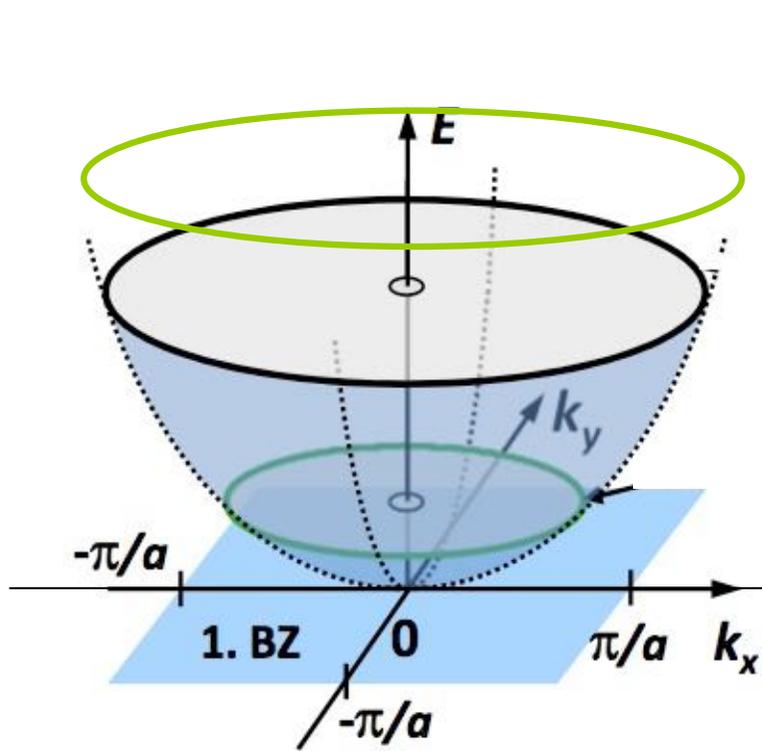
zunehmende Energie  
senkrecht zum Fermi-Kreis

Flächen konstanter Energie

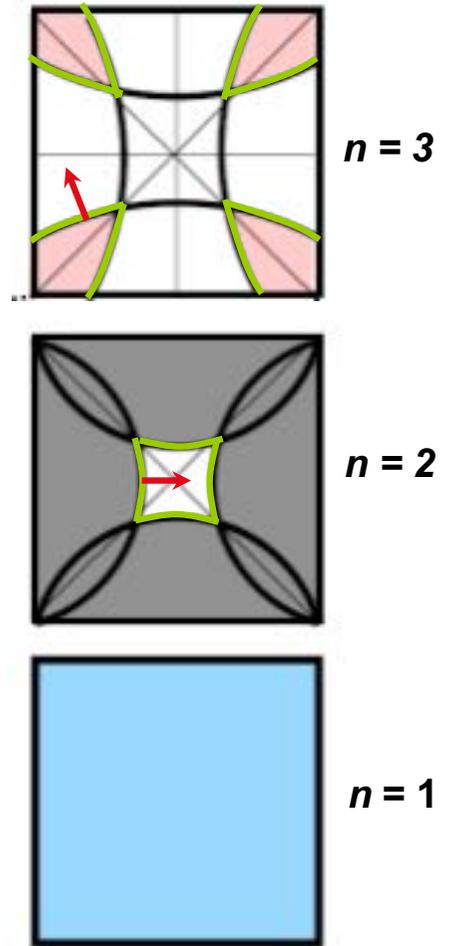
2D

freie Elektronen

Fermi-Grenze ausserhalb der 1. BZ:



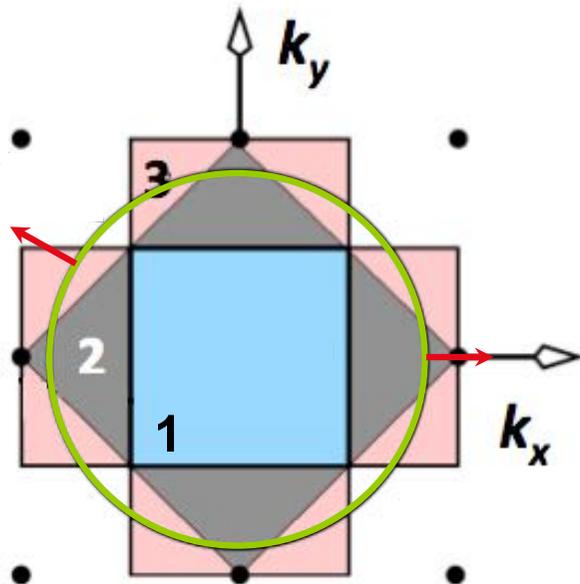
zunehmende Energie  
senkrecht zum Fermi-Kreis



Reduziertes Zonenschema

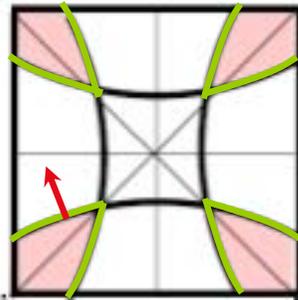
Flächen konstanter Energie      2D      freie Elektronen

Fermi-Grenze ausserhalb der 1. BZ:

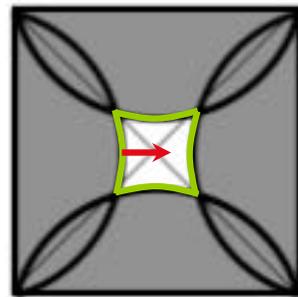


*ausgedehntes  
Zonenschema*

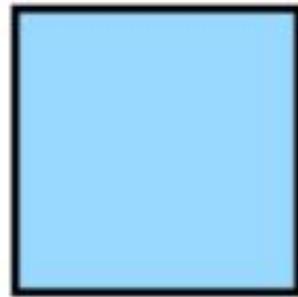
zunehmende Energie  
senkrecht zum Fermi-Kreis



$n = 3$

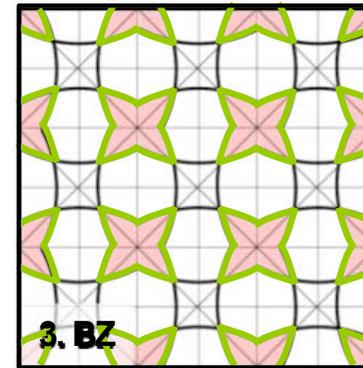


$n = 2$

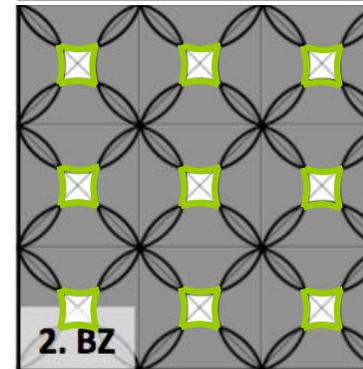


$n = 1$

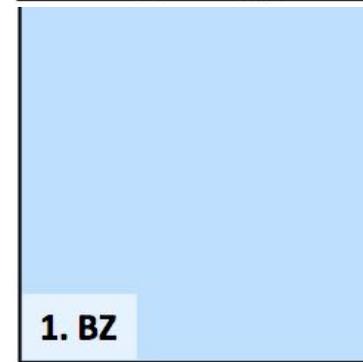
Reduziertes Zonenschema



3. BZ



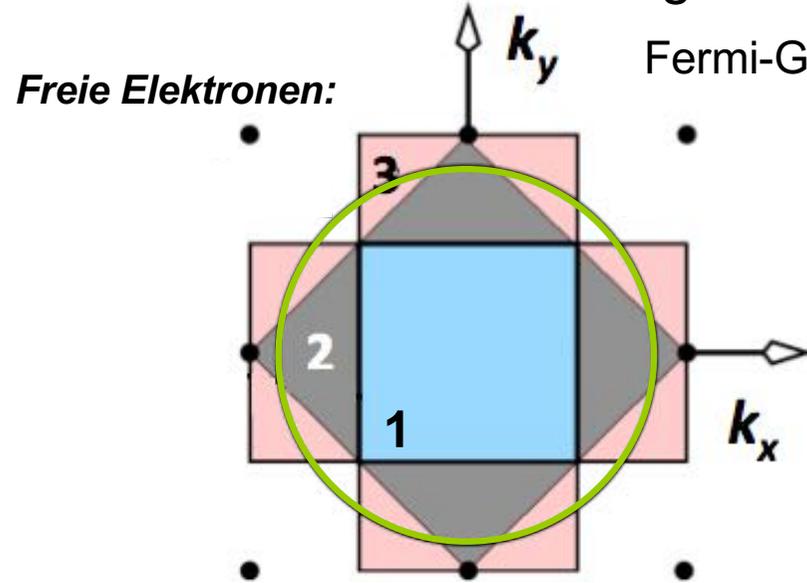
2. BZ



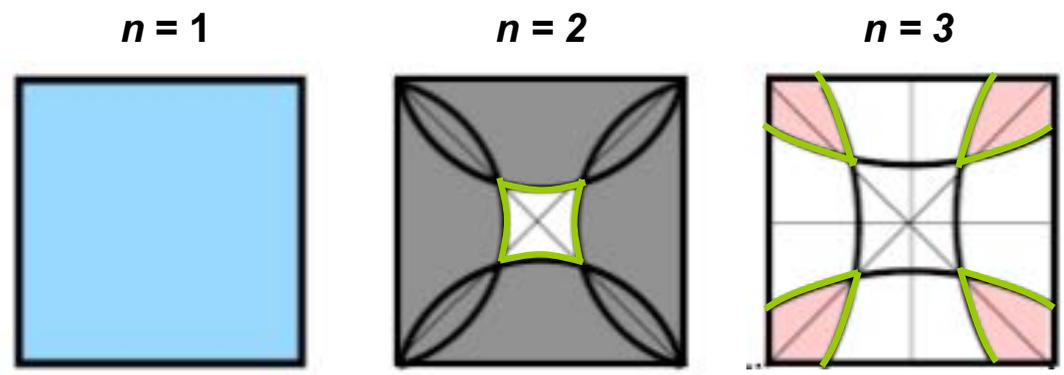
1. BZ

Periodisches Zonenschema

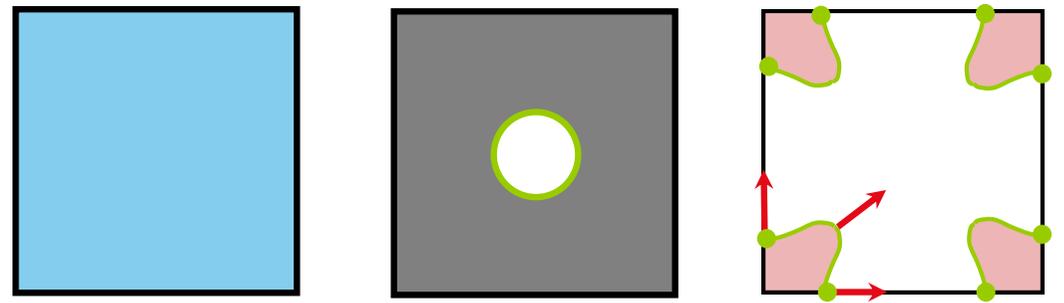
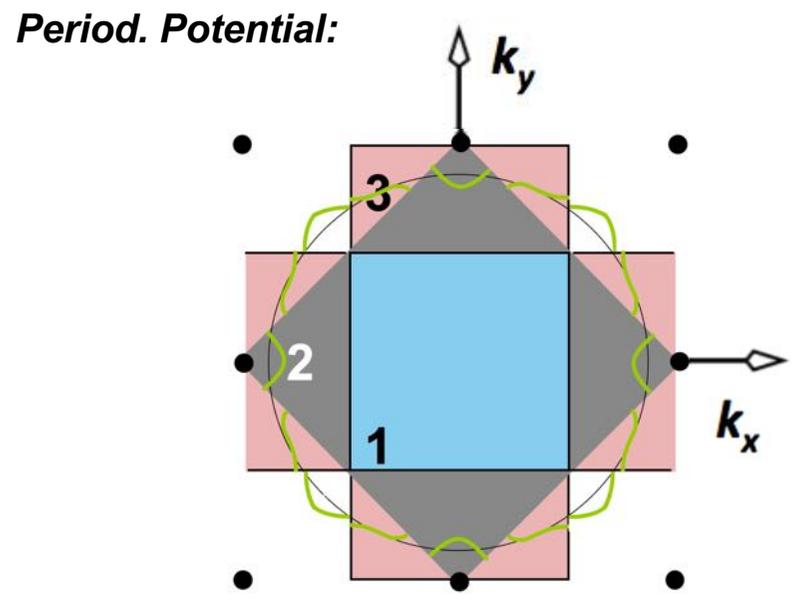
Flächen konstanter Energie      2D      periodisches Potential  $V(r) \neq 0$



Fermi-Grenze ausserhalb der 1. BZ:



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



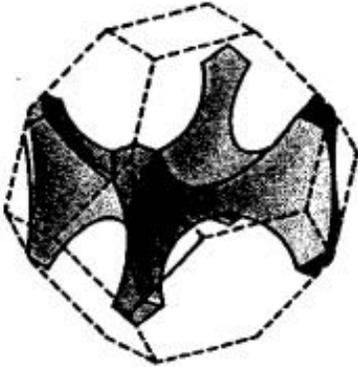
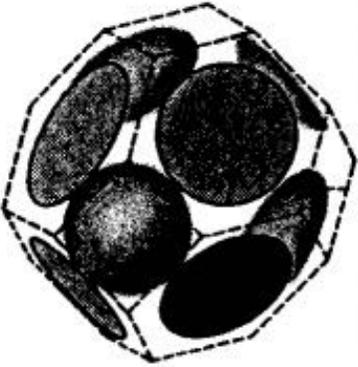
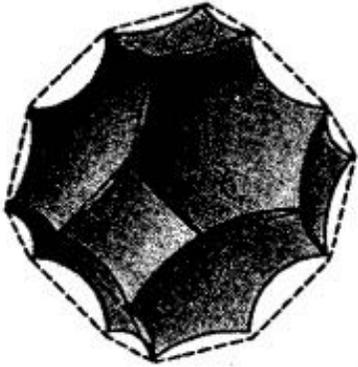
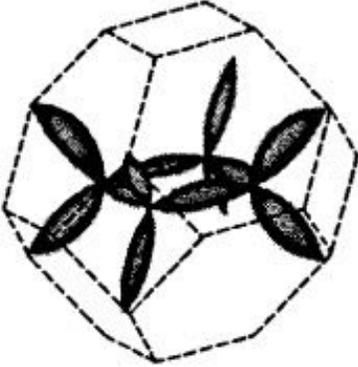
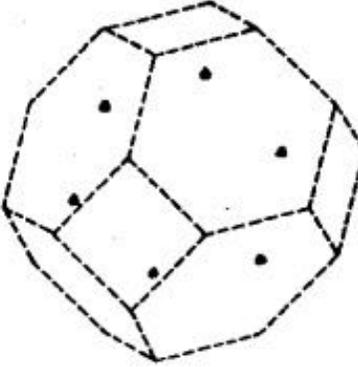
zunehmende Energie  
 senkrecht zur Fermi-Linie

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			

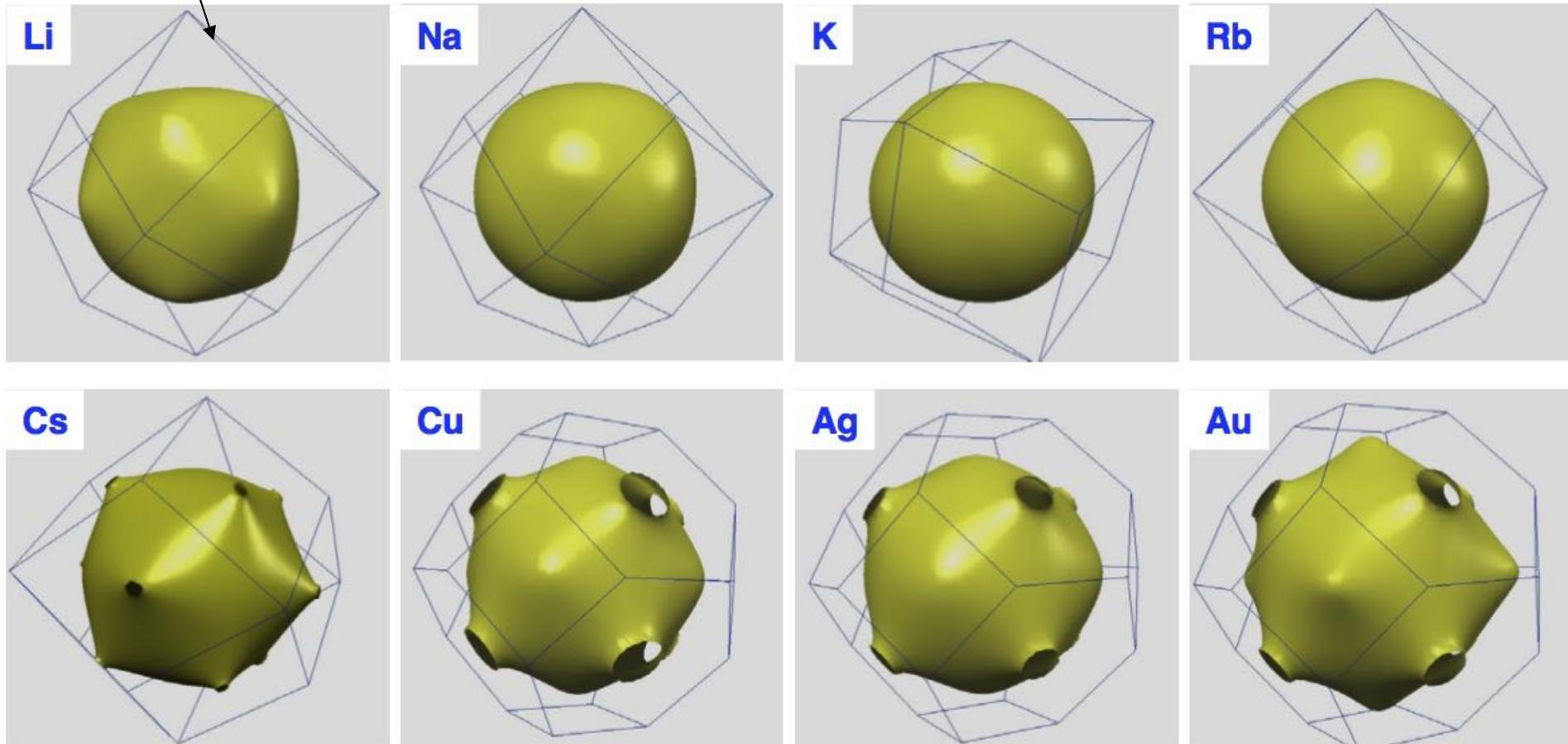
Fermi-Flächen von Metallen mit KFZ Struktur (fcc) und zwei verschiedenen Elektronenkonzentrationen (2 resp. 3 Leitungselektronen pro Atom, z.B. Al)

Flächen konstanter Energie

3D

periodisches Potential  $V(r) \neq 0$

Rand der 1. BZ

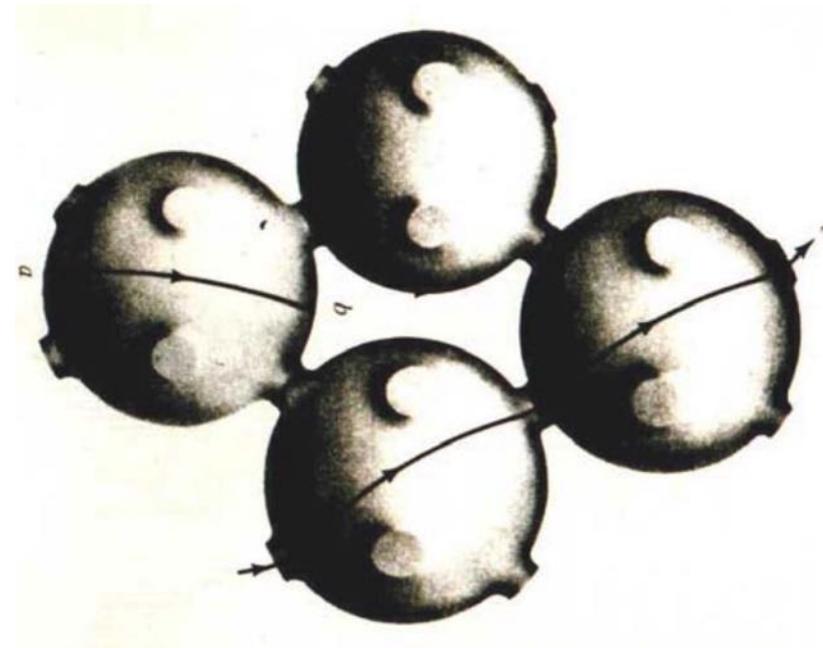
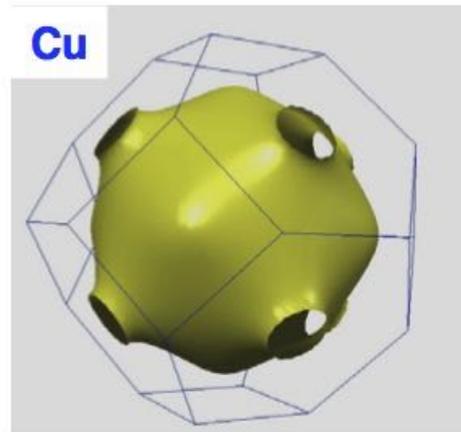


Fermi-Flächen von einfachen Metallen. Die Alkali-Metalle kristallisieren in einem bcc-Gitter, Cu, Ag und Au in einem fcc-Gitter

Flächen konstanter Energie

3D

periodisches Potential  $V(r) \neq 0$



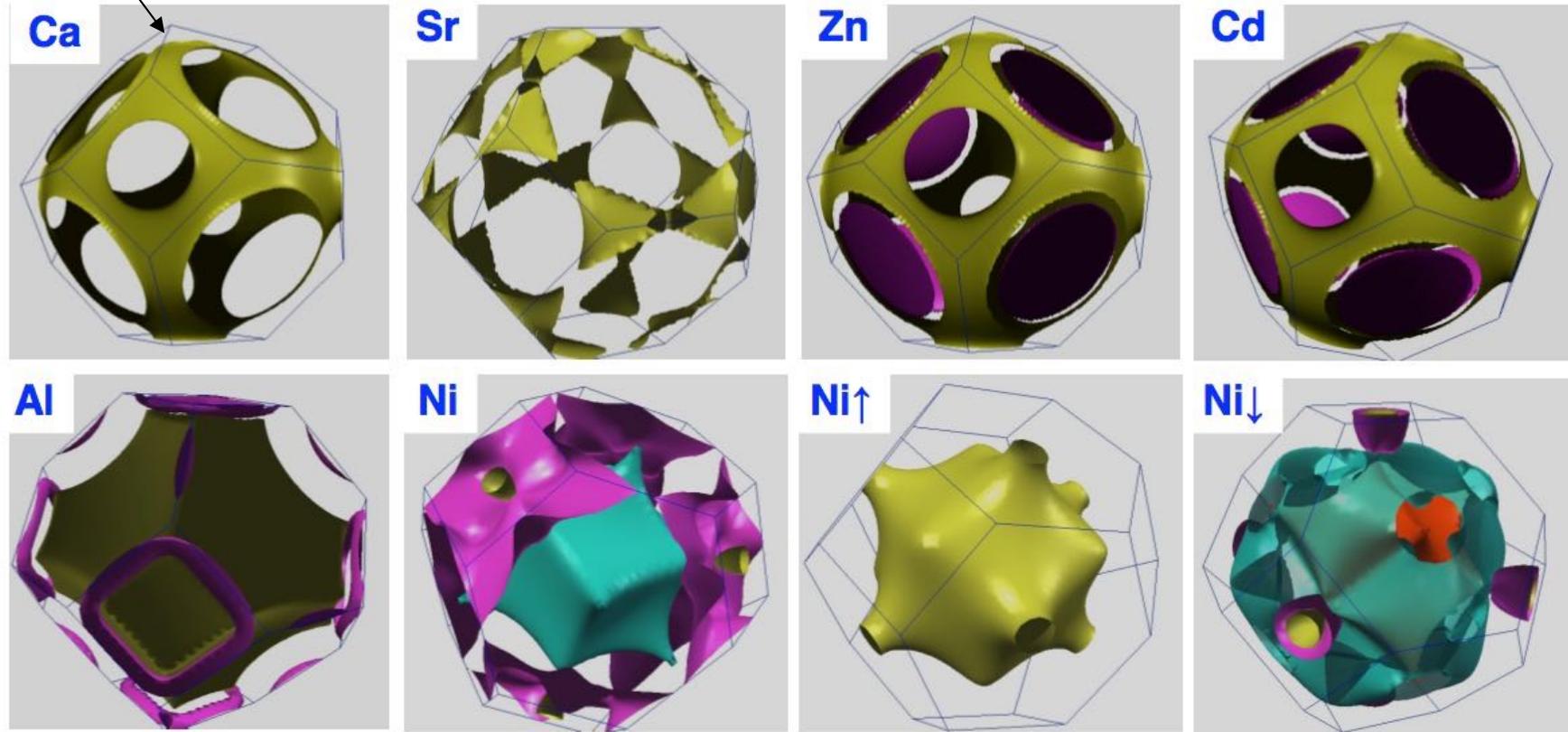
Periodisches Zonenschema

Flächen konstanter Energie

3D

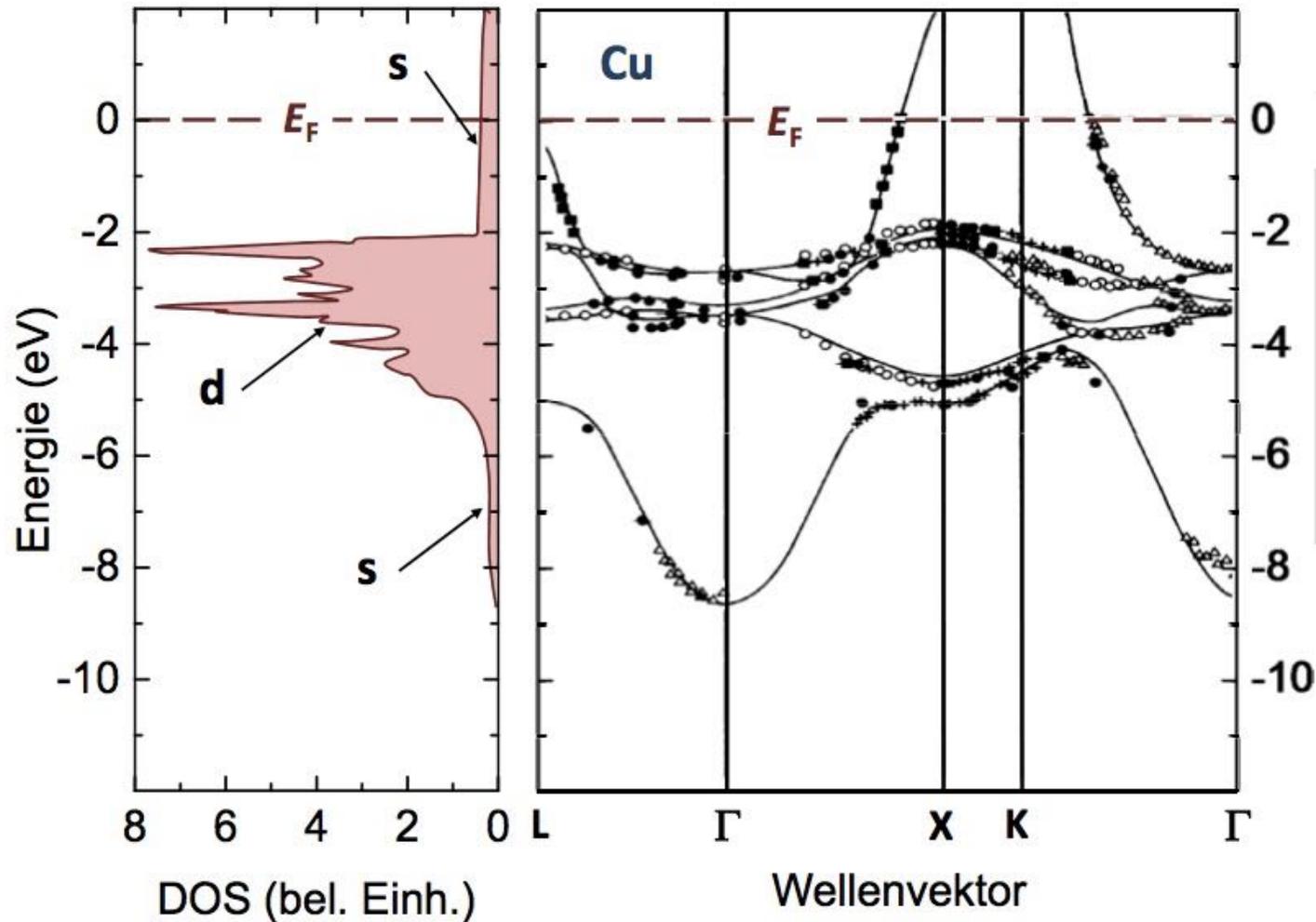
periodisches Potential  $V(r) \neq 0$

Rand der 1. BZ



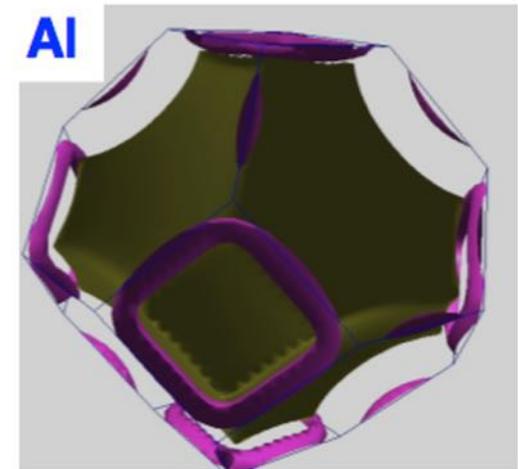
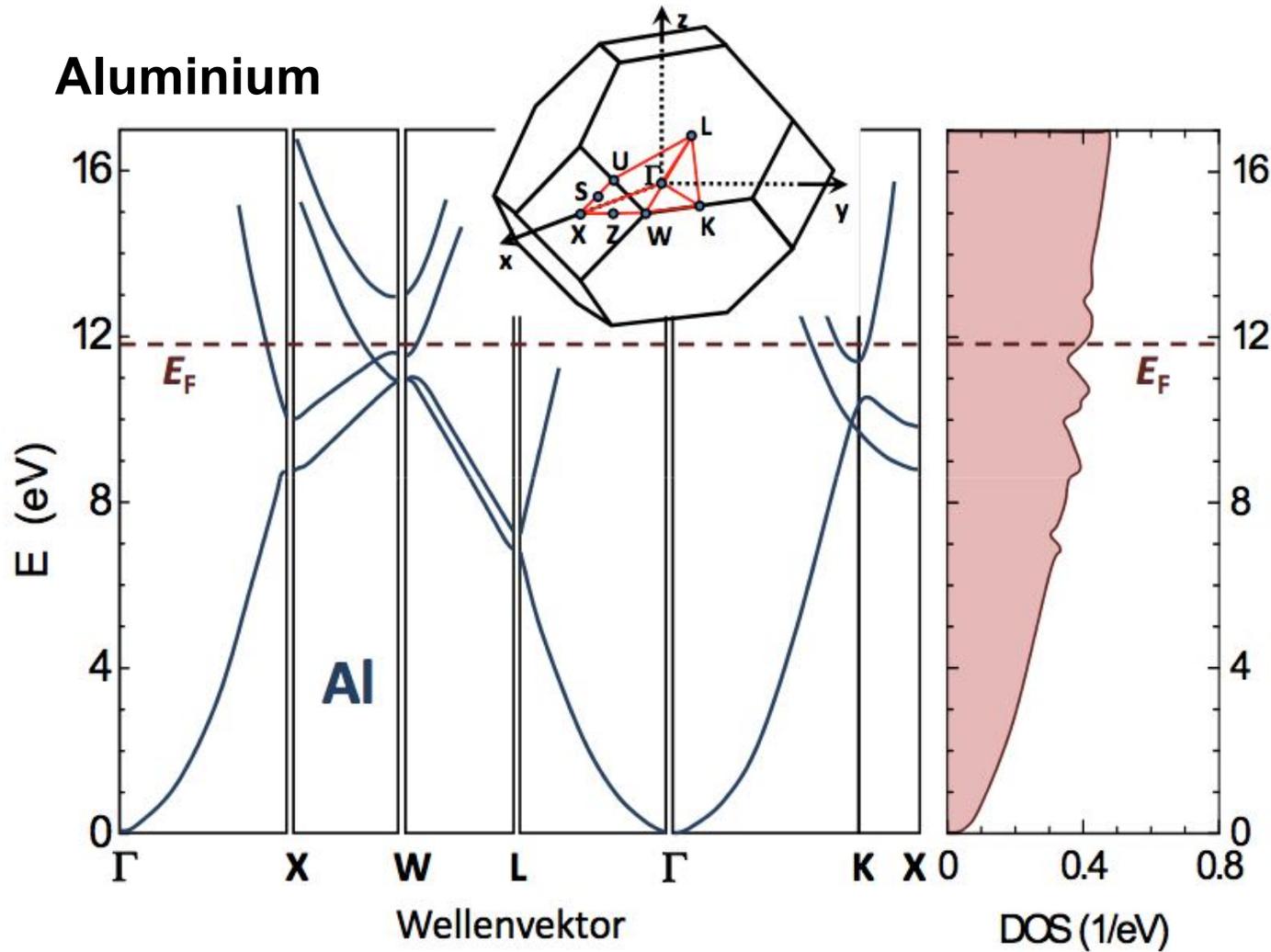
Fermi-Flächen von komplexeren Metallen. Die Erdalkali-Metalle Ca und Sr kristallisieren in einem fcc-Gitter. Zn und Cd kristallisieren eigentlich in der hcp-Struktur, gezeigt ist allerdings die Fermi-Fläche für eine fcc-Struktur, um einen Vergleich zu Ca und Sr zu ermöglichen. Gezeigt sind ferner die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

# Kupfer



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)).

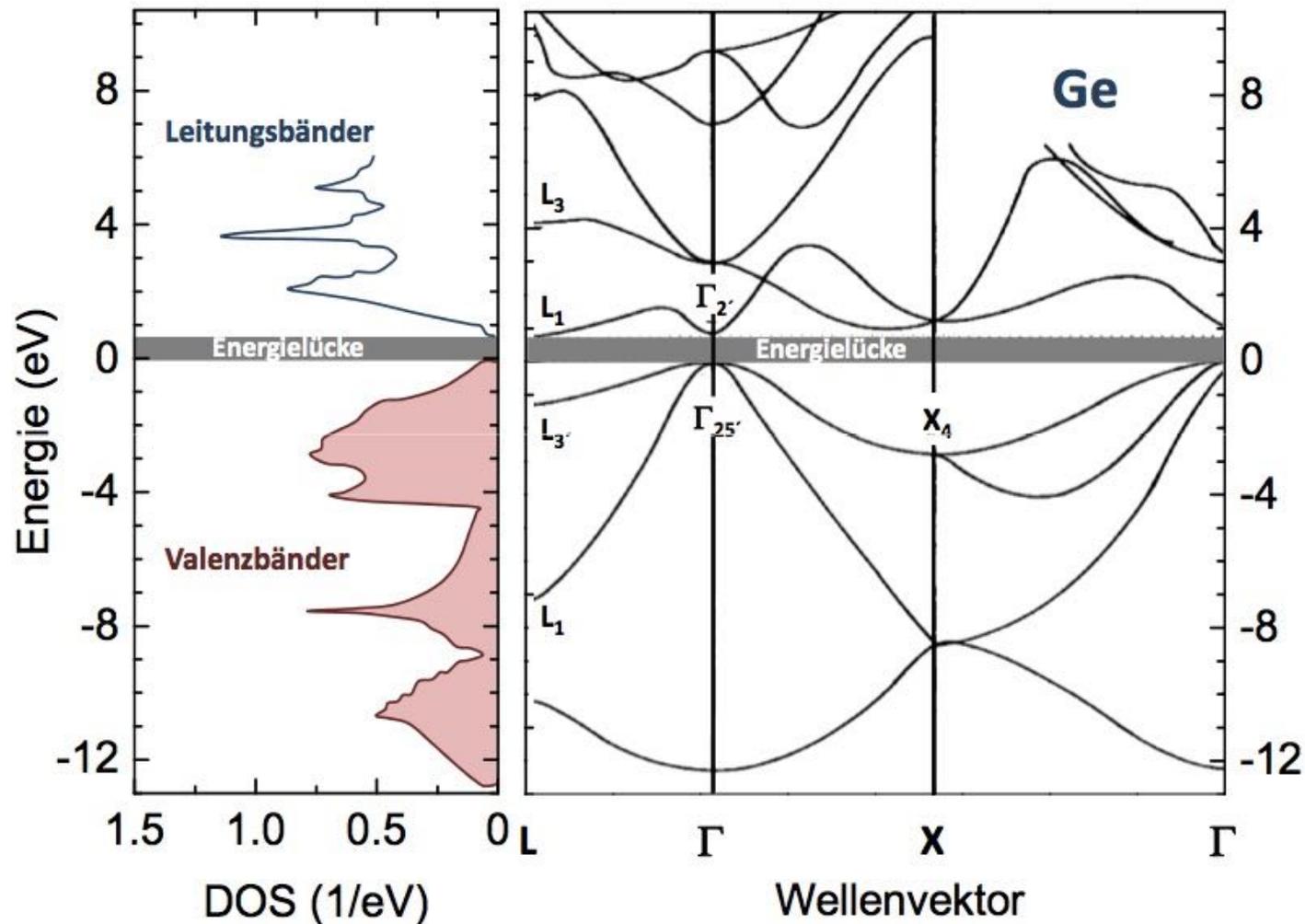
# Aluminium



Fermi-Fläche (1. BZ)

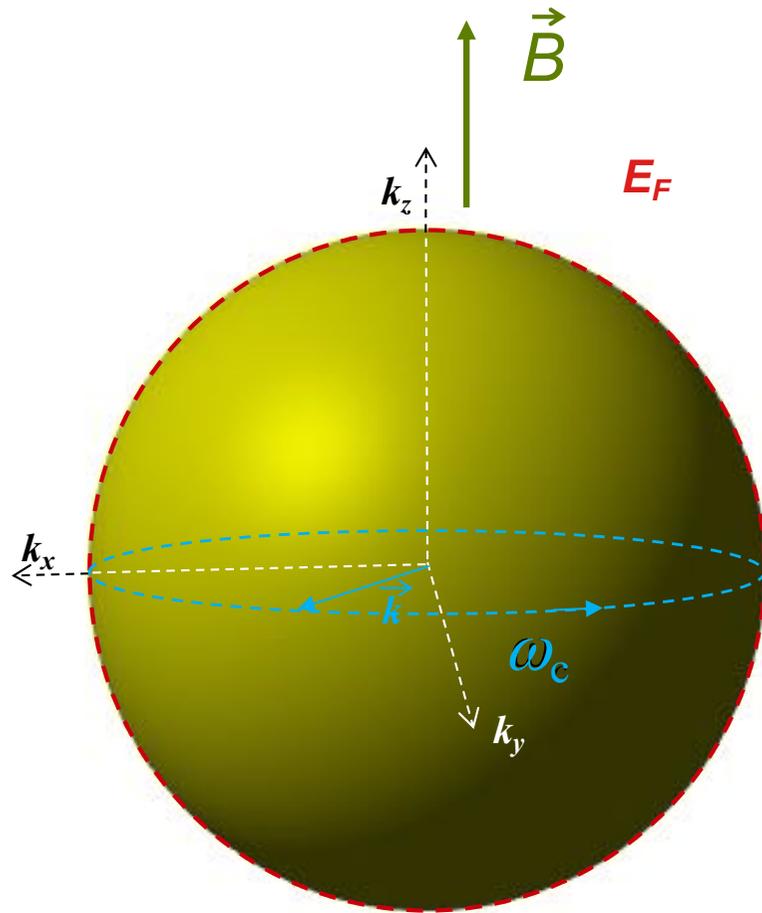
Bandstruktur von Aluminium entlang von Richtungen hoher Symmetrie (links). Der  $\Gamma$ -Punkt ist das Zentrum der 1. Brillouin-Zone (siehe Inset). Die Bandlücken an der Zonengrenzen sind klein und der Bandverlauf kann in weiten Teilen durch parabelförmige Kurven angenähert werden. Rechts ist die Zustandsdichte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

# Germanium



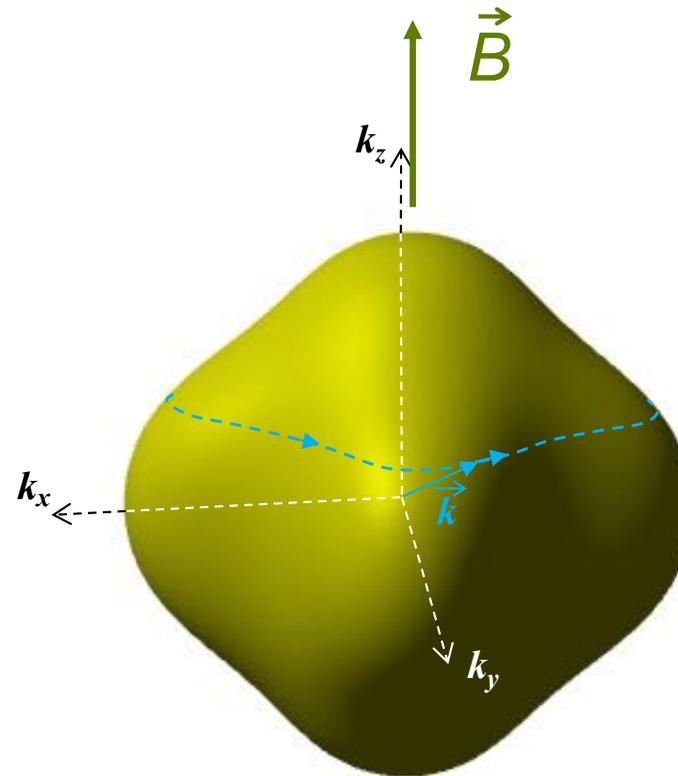
Berechnete Bandstruktur  $E(\mathbf{k})$  von Germanium entlang der Richtungen hoher Symmetrie. Links ist die resultierende Zustandsdichte gezeigt. Eingezeichnet sind auch einige kritische Punkte (nach F. Hermann, R.L. Kortum, C.D. Kuglin, J.L. Shay, in *Semiconducting Compounds*, D.G. Thomas ed., Benjamin,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

# Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):



Freie Elektronen

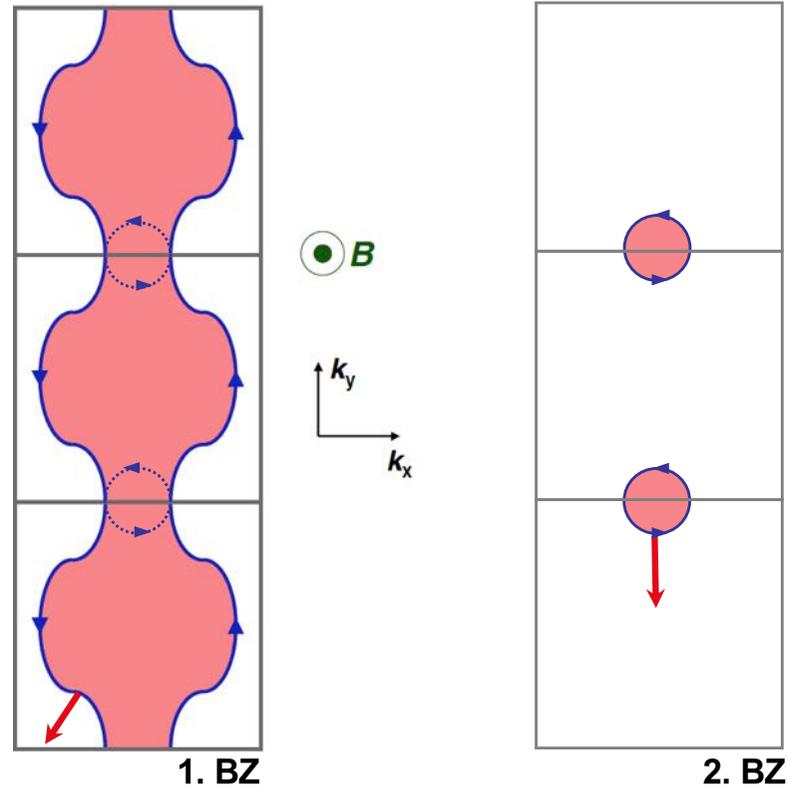
## geschlossene Bahn



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

# Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):

offene Bahn

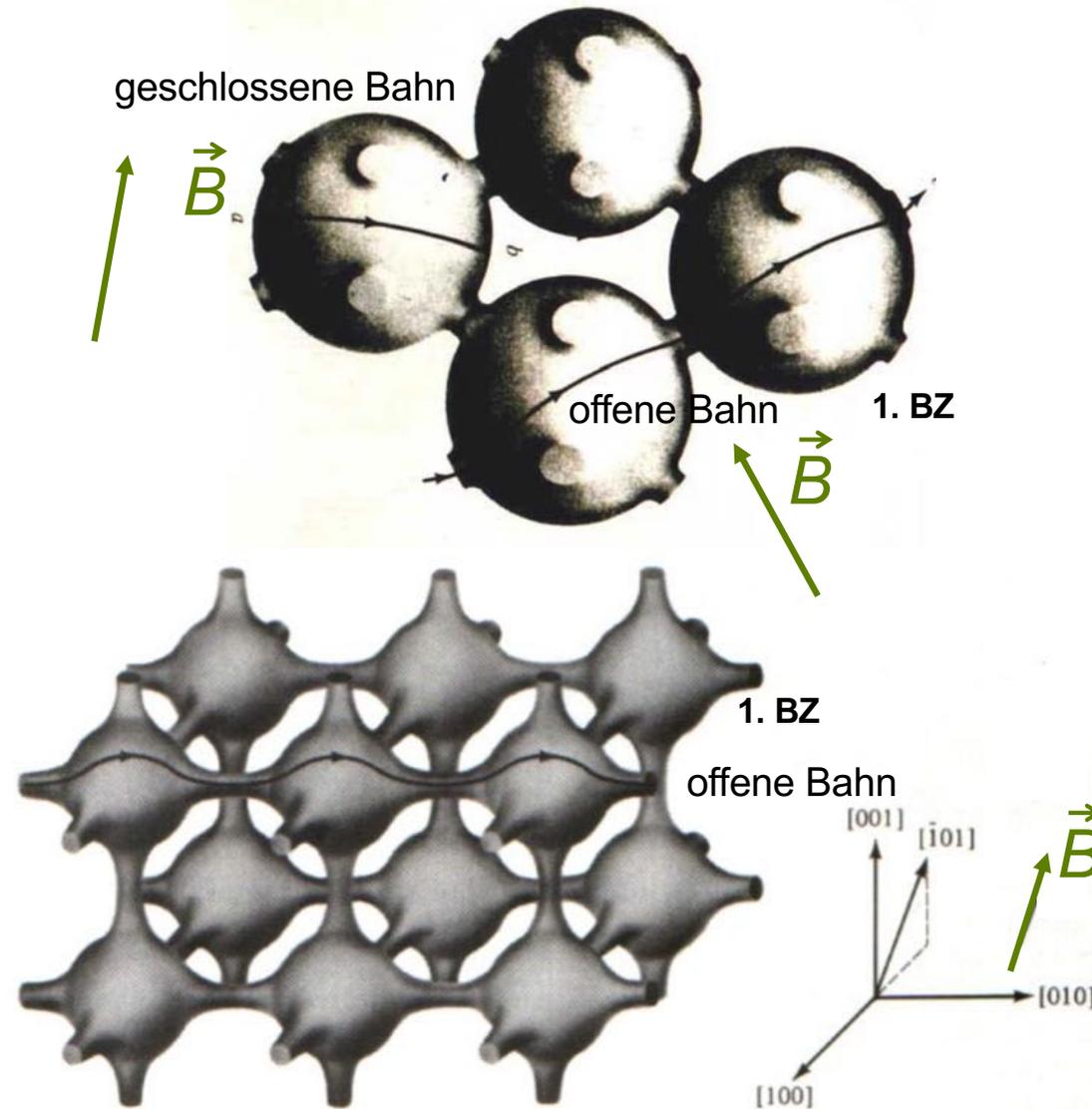


Elektronartig:  
 $E$  nimmt nach  
aussen hin zu

Lochartig:  
 $E$  nimmt nach  
innen hin zu

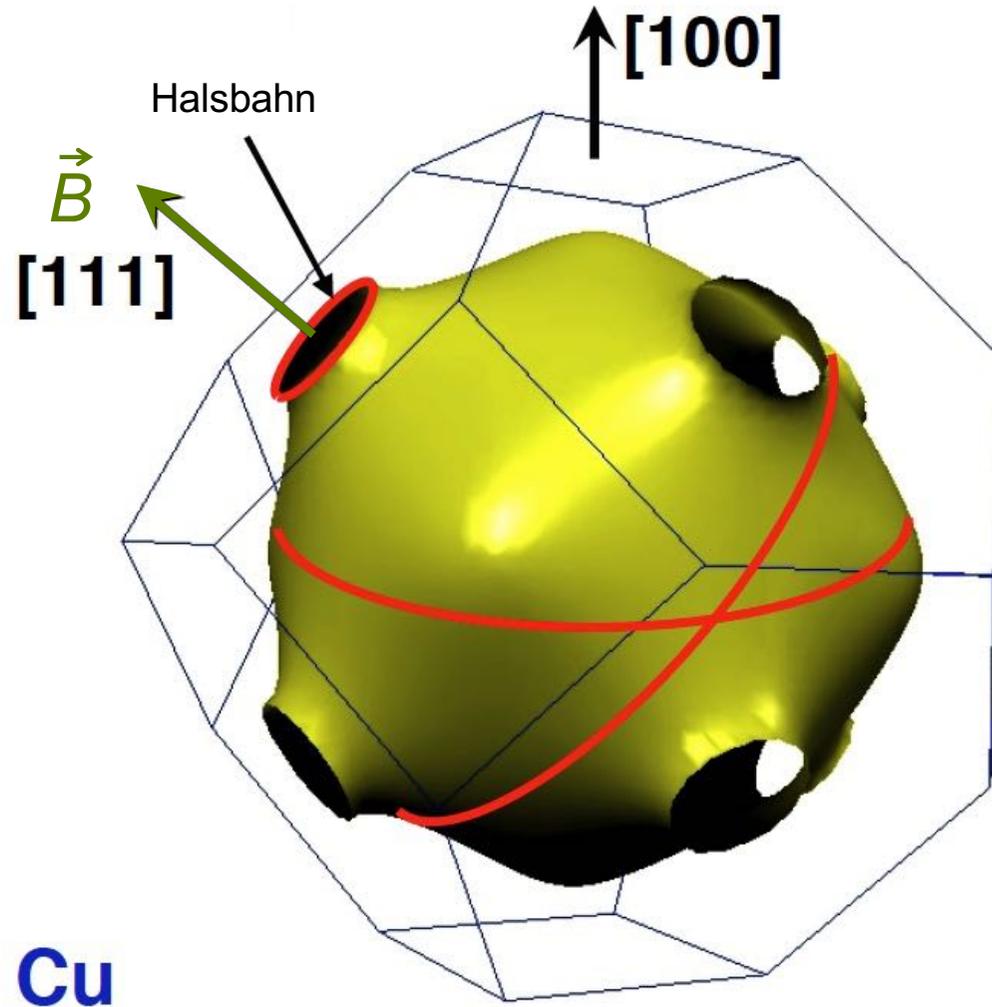
periodisches Potential  $V(r) \neq 0$   
hier: Fermi-Körper *verlässt* 1. BZ

# Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):



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

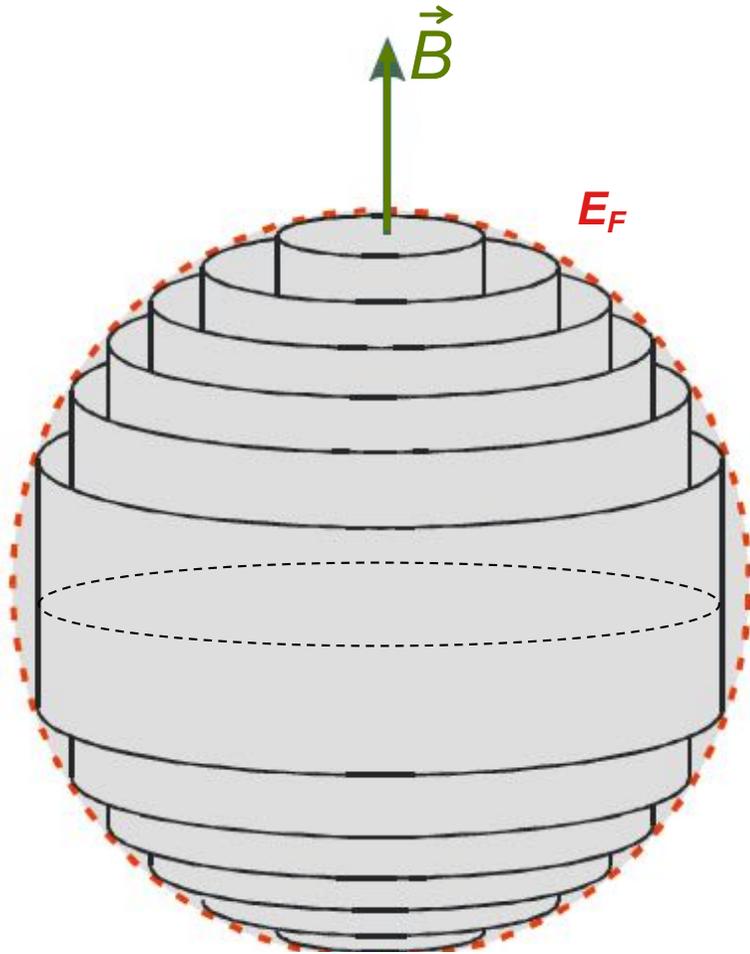
Bahnen im Magnetfeld (schwache Magnetfelder):



**Cu**

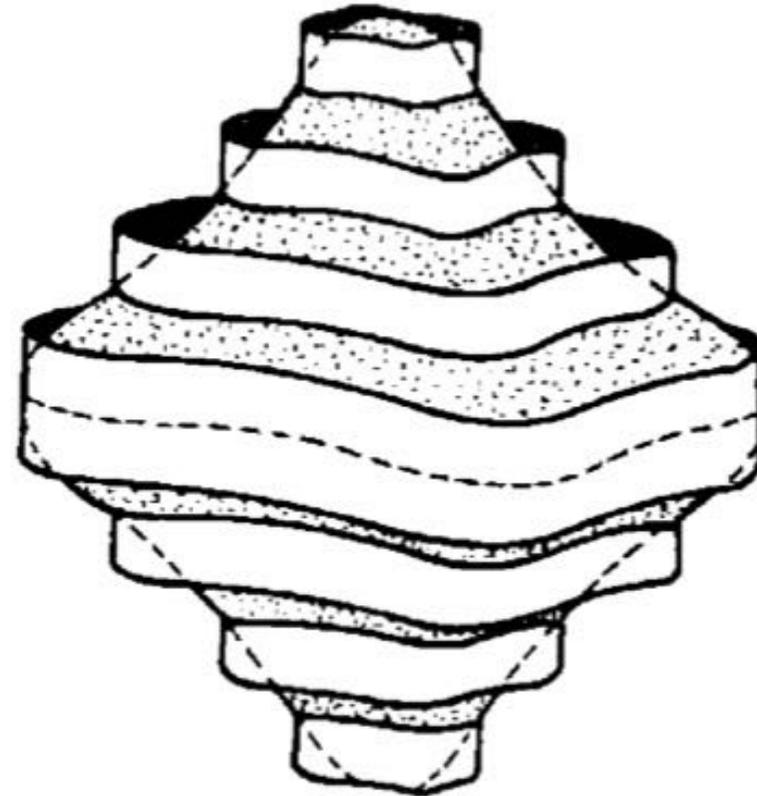
periodisches Potential  $V(r) \neq 0$   
hier: Fermi-Körper *verlässt* 1. BZ

# Bahnen im Magnetfeld (starke Magnetfelder)



Freie Elektronen

# Verformte Landau-Zylinder



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