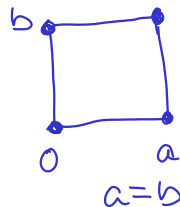


Vorlesung *Anorganische Strukturchemie (AC-V)*

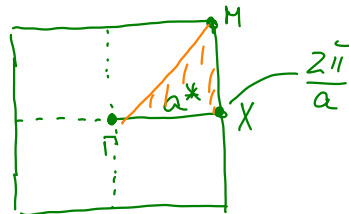
1 Das 'Squareum', ein quadratisches Netz aus Atomen, ist ein einfaches zweidimensionales Modellsystem zur Ableitung der LCAO-Beschreibung im Festkörper.

(a) Zeichnen Sie die reale Struktur und die reziproke k -Ebene mit den speziellen Punkten Γ , X und M.

reale Struktur:

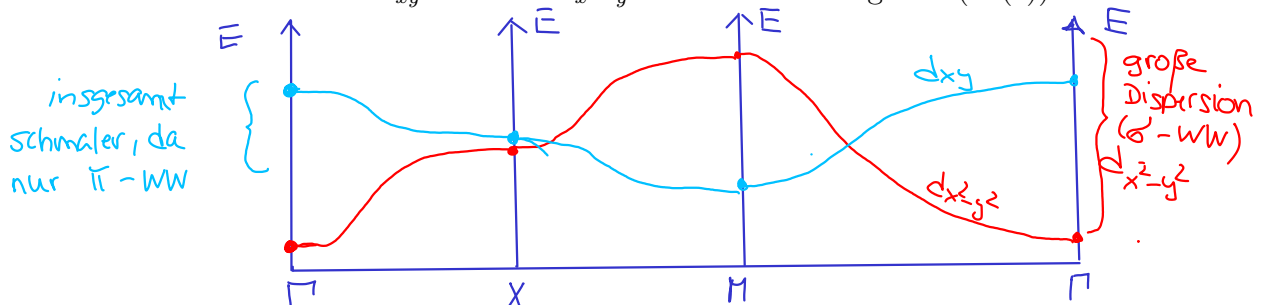


reziproke Fläche:



irreduzibler Teil der Brillouinzone

(b) Skizzieren Sie die Bandstruktur (Pfad $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$) der Bänder, die sich durch Linearkombination der d_{xy} - und der $d_{x^2-y^2}$ -Atomorbitale ergeben (s. (c)).



(c) Begründen Sie den Bandverlauf anhand der 'Molekülorbitale', die zu den jeweiligen speziellen Punkten gehören. Welcher Bindungscharakter liegt jeweils vor?

AO	$\Gamma (0,0,0)$	X $(0,0,\frac{1}{2})$	M $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
d_{xy} oben hellblau	<p>alle π-WW antibindend</p>	<p>in a bindend, in b antib.</p>	<p>in a b π-bindend</p>
$d_{x^2-y^2}$ oben in rot	<p>alle Richtungen σ-bindend</p>	<p>in a antib, in b bindend</p>	<p>in alle Richtung σ a.b.</p>

2 Die Abbildung 2.2.5.5. auf der Web-Seite zeigt die Bandstruktur von α -Sn (Diamantstruktur). (Wie sich die 1. BZ erklären läßt, das kommt nochmal in einem kleinen Video).

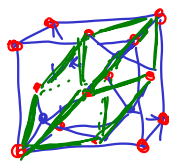
(a) Wie viele Atome befinden sich in der bei der Rechnung berücksichtigten Elementarzelle? $4 \text{ Bänder} \hat{=} 8e^-$, da Sn $4e^-$ hat also

8 Atome (in der F -zentrierten EZ sind dagegen 8 Atome)

↳ bei der Bandstruktur ist also die Symmetrie F berücksichtigt

(b) Wie viele Atome befinden sich in der üblichen Zeichnung der kubischen Elementarzelle? Die Relation ist die übrigens gleich der zwischen einer flächenzentrierten (F) und einer primitiven (P) Elementarzelle!

$P \hat{=} \text{ein Rhomboeder W\u00fcfel, entlang der Raumdiagonale gestreckt, enth\u00e4lt 1 rotes + 1 blaues Atom}$



8 Atome in der EZ ; F bedeutet im $4*$ primitiv
 ↳ also nur 2 Atome in der P -Zelle
 das ist die zugehörige P -Zelle

4 Atome
 $(8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2})$
 4 Atome

(c) Erklären Sie die Bandverläufe, nur ausgehend von Γ -Punkt. Welche Orbitale mit welcher Art/Symmetrie der Wechselwirkung stecken also hinter den Bändern?

- unterstes Band: vom Γ -Punkt aus steigend $\Rightarrow s$ - s -WW, d.h. das sind die s -Atomorbitale von Sn
- obere 3 Bänder: von Γ fallend $\Rightarrow s$ - p -WW, d.h. das sind die p -Atomorbitale von Sn

(d) In welchen Punkten unterscheiden sich die Bandstrukturen der isotypen Elemente α -Sn und Silicium (s. Tab. 2.2.5.1 dazu, beachten sie das (i)!).

α -Sn: keine Bandlücke, Valenz- und Leitungsband berühren sich genau am Γ -Punkt

Si: indirekte Bandlücke, die Valenzbandoberkante ist bei Γ , die Leitungsbandunterkante aber zwischen Γ und L

(e) Wie wirken sich diese Unterschiede auf die physikalischen Eigenschaften aus?

α -Sn: metallisch, aber mit schlechter elektronischer Leitfähigkeit, da DOS (E_F) klein ist

Si: indirekter Halbleiter, damit leider nicht ideal für LEDs und Solarzelle (Optoelektronik)