

NOTIZEN

Aussagen über die Bandstruktur von rhomboedrischem Bor mit der Kp-Störungsrechnung

Von U. RÖSSLER und J. TREUSCH

Institut für Theoretische Physik (II) der Universität Marburg/Lahn

(Z. Naturforsch. 19 a, 1125–1126 [1964]; eingegangen am 18. Juni 1964)

Mit Hilfe der Kp-Methode, die bereits zur Bestimmung der Bandstrukturen verschiedener Kristalle verwendet wurde, werden qualitative Aussagen über die Energiebänder in rhomboedrischem Bor gewonnen. Eine Beschreibung der Methode ist in ¹ gegeben, wo auch weitere Literaturhinweise nachzulesen sind. Da die Kp-Störungsrechnung alle Aussagen allein aus der Symmetrie, d. h. aus der Raumgruppe, des behandelten Gitters folgert, gelten unsere Ergebnisse gleichzeitig für α -² und β -³ rhomboedrisches Bor, denn beide Gitter sind invariant gegenüber den Operationen der Raumgruppe $R\bar{3}m$ (oder D_{3d}^5 in der SCHOENFLIES-Bezeichnung).

Die Raumgruppe D_{3d}^5 ist symmorph, die zugehörige Punktgruppe D_{3d} enthält 12 Operationen:

$$E, 2C_3, 3C_2, I, 2IC_3, 3IC_2.$$

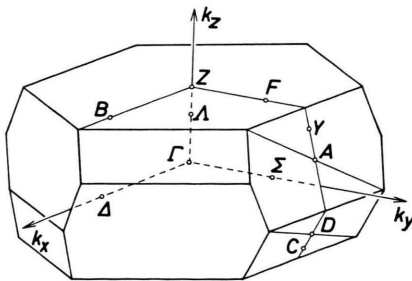


Abb. 1. BRILLOUIN-Zone für rhomboedrisches Bor.

Die Gruppen der Wellenvektoren für Punkte und Linien hoher Symmetrie in der BRILLOUIN-Zone (Abb. 1) sind: für Γ und Z : D_{3d} , für A : C_{3v} , für B, A, F, Σ, Y, C : C_2 oder C_s und für A und D : C_{2h} . Die Charaktertafeln zu diesen Gruppen sind bei KOSTER⁴ angegeben. Die Gruppen der Wellenvektoren von Γ, Z, A und D enthalten die Inversion, deshalb verschwindet $\nabla \kappa E$ in alle Richtungen, und wir können in diesen Punkten Extrema erwarten. Im Spinfeld sind infolge Zeitumkehrsymmetrie die Energiebänder in jedem Punkt der BRILLOUIN-Zone zweifach entartet. Im einzelnen ergeben sich aus der Kp-Methode folgende $E(\mathbf{K})$ -

Funktionen. Für die eindimensionalen Darstellungen Γ_1^\pm und Γ_2^\pm im Punkt Γ ist der Bandverlauf parabolisch:

$$E_i(\mathbf{K}) = E_i + B_i K_\perp^2 + C_i K_z^2, \quad i = 1, 2,$$

mit der Abkürzung $K_\perp^2 = K_x^2 + K_y^2$. Auch die zweidimensionale Darstellung Γ_3^\pm gehört zu einem parabolischen Band:

$$E_3(\mathbf{K}) = E_3 + B_3 K_\perp^2 + C_3 K_z^2 \pm D_3 K_\perp^2,$$

doch bleibt die Entartung nur auf der A -Achse erhalten, in allen anderen Richtungen wird die Entartung aufgehoben. Im Spinfeld gehen Γ_1^\pm und Γ_2^\pm über in die

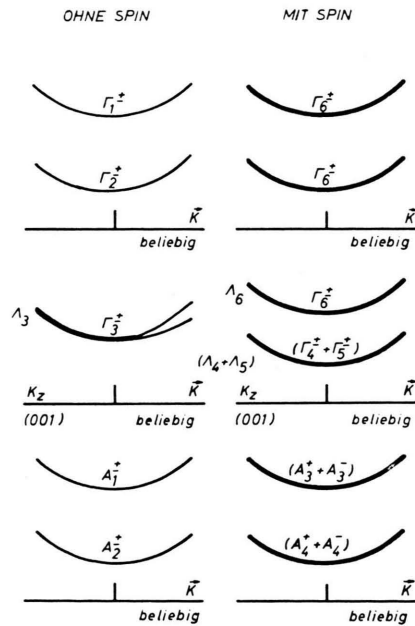


Abb. 2. Bandverlauf in der Umgebung der Punkte Γ, Z wie Γ), A und D (wie A). (Fettgedruckte Bänder sind zweifach entartet)

zweidimensionale Darstellung $\Gamma_6^\pm, \Gamma_3^\pm$ spaltet auf in die zeitumkehrentarteten Darstellungen $(\Gamma_4^\pm + \Gamma_5^\pm)$ und in Γ_6^\pm . Der Bandverlauf für beide Darstellungen wird beschrieben durch

$$E(\mathbf{K}) = E + B K_\perp^2 + C K_z^2.$$

Die Energieflächen sind für alle Bänder im Punkt Γ Rotationsellipsoide um die A -Achse. Diese Ergebnisse gelten auch für den Punkt Z . In den Punkten A und D

¹ M. LIETZ u. U. RÖSSLER, Z. Naturforsch. 19 a, 850 [1964]. — R. SANDROCK u. J. TREUSCH, Z. Naturforsch. 19 a, 844 [1964].

² B. F. DECKER u. J. S. KASPER, Acta Cryst. 12, 503 [1959].

³ R. E. HUGHES, C. H. L. KENNARD, D. B. SALLENGER, H. A. WEAKLIEM, D. E. SANDS und J. L. HOARD, J. Amer. Chem. Soc. 85, 361 [1963].

⁴ G. F. KOSTER, Solid State Phys. 5, 174 [1957].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

erhält man ohne und mit Berücksichtigung des Spins den durch

$$E(\mathbf{K}) = E + F K_x^2 + (G K_y + H K_z)^2$$

gegebenen Bandverlauf. Die zweifache Entartung im Spinfall ist eine Folge der Zeitumkehrsymmetrie. Die

Energieflächen sind dreiachsige Ellipsoide. In Abb. 2 sind die hier diskutierten Bandverläufe skizziert. Für alle anderen Punkte der BRILLOUIN-Zone ist $\nabla_{\mathbf{K}} E$ wenigstens in einer Richtung von Null verschieden, so daß nur in den Punkten Γ , Z , A und D Extrema vorausgesetzt werden können.

Ein neues Verfahren zur kontaktlosen Messung der elektrischen Leitfähigkeit dünner Schichten

VON E. HUSTER, WILFRIED RAUSCH und JULIUS SCHMAND
Institut für Kernphysik, Münster

(Z. Naturforschg. 19 a, 1126—1127 [1964]; eingegangen am 27. Juni 1964)

In vielen Fällen kann man die elektrische Leitfähigkeit dünner Schichten nicht durch eine Strom-Spannungsmessung bestimmen, da es schwierig ist, geeignete Kontakte an der Schicht anzubringen. Auch liefert eine Strom-Spannungsmessung immer dann ungenaue Aussagen, wenn der Flächenwiderstand R_{\square} nicht über die ganze Schicht konstant ist ($R_{\square} = \rho/d$; ρ = spezifischer Widerstand, d = Dicke der Schicht).

Zur kontaktlosen Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit verwendet man oft die Induktionsspule eines Schwingungskreises. Die Änderung der Resonanzfrequenz des Kreises bei Annäherung der Spule an die Schicht ist ein Maß für deren Leitfähigkeit. Inhomogenitäten der Schicht lassen sich nachweisen, indem man die Spulenfläche parallel zur Schicht bewegt.

Dies Verfahren eignet sich jedoch nur für relativ gut leitende Schichten. Der Bereich, in dem beim Aufdampfen von Metallschichten der Flächenwiderstand von Werten oberhalb $10^{10} \Omega$ auf einige Ω abfällt, läßt sich mit diesem Verfahren nicht zuverlässig erfassen.

Für diesen Bereich wurde ein kapazitiv arbeitendes Verfahren entwickelt, bei dem man die Änderung des Flächenwiderstandes während des Aufdampfens messend verfolgen kann. Eine gut leitende Metallplatte wird parallel zu der zu messenden Schicht angebracht und die Kapazität zwischen Platte und Schicht gemessen. Kann man an der Schicht selbst einen Kontakt

anbringen, so arbeitet man zweckmäßig in der in Abb. 1 a dargestellten Anordnung. Ist das nicht möglich, so arbeitet man mit der Anordnung nach Abb. 1 b, bei der zwei leitende Metallplatten (K_1 und K_2) parallel zur Schicht angeordnet sind.

In beiden Fällen ist für $R_{\square} = \infty$ die zwischen K_1 und K_2 gemessene Impedanz $Z \approx 0$, für $R_{\square} = 0$ ist $Z \approx 1/j\omega C$, wobei C die statische Kapazität zwischen K_1 und K_2 , j die imaginäre Einheit und ω die Kreisfrequenz ist. Abb. 2 zeigt ein Beispiel einer Impedanzmessung an einer Ag-Schicht in Abhängigkeit von der Aufdampfzeit, der die Schichtdicke nahezu proportional ist (allerdings wird der Proportionalitätsfaktor sich bei verschiedenen Aufdampfungen unterscheiden). Aufgetragen sind die beiden dimensionslosen Größen $P_x/C = 2/(\omega C R_x)$ und C_x/C , die proportional zu Real- und Imaginärteil von $1/Z = 1/R_x + j\omega C_x$ sind. Ist ein bestimmter Flächenwiderstand erreicht, so steigt bei weiterem Aufdampfen C_x/C schnell von nahezu 0 auf 1; im gleichen Bereich durchläuft P_x/C ein Maximum, dessen Ordinate unter 1 liegt. (Der Zahlenwert hängt von der Form der Schicht und der Kontakte ab.)

Der Anstieg der gemessenen Kapazität C_x zum statischen Wert C rückt natürlich zu um so größeren Schichtdicken, d. h. kleineren R_{\square} , je größer ω ist. Man kann zeigen, daß die Meßgrößen P_x/C und C_x/C nur von dem Produkt $\omega R_{\square} C$ abhängen, und daß insbesondere der Wert $(\omega R_{\square} C)_{\max} = K$ im Maximum von P_x/C nur von der Geometrie der Anordnung (Größe der Schicht, Form der Kontakte usw.) abhängt. K läßt sich nur in einfachen Fällen ohne größeren Aufwand berechnen; auch eine experimentelle Bestimmung kann schwierig sein. — Da P_x/C und C_x/C nur von $(\omega R_{\square} C)$ abhängen, erhält man Kurven wie in Abb. 2 auch dann, wenn man statt R_{\square} entweder ω oder C ändert.

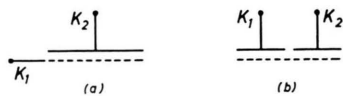


Abb. 1. Meßanordnungen schematisch: a) dünne Schicht mit Kontakt K_1 , parallel dazu Metallplatte K_2 . b) Dünne Schicht ohne Kontakte, parallel dazu zwei Metallplatten K_1 und K_2 .

Abb. 2. P_x/C und C_x/C einer Ag-Schicht auf Formvarunterlage von $30 \times 60 \text{ mm}^2$ in Abhängigkeit von der Aufdampfzeit T , gemessen mit einer Wayne-Kerr Universal Bridge in der Anordnung nach Abb. 1 a ($\omega = 10^4 \text{ sec}^{-1}$, $C \approx 6 \text{ pF}$).

