

## 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. Naturforschg. **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<sup>1</sup> 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  $\alpha$ -<sup>2</sup> und  $\beta$ -<sup>3</sup> 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:

$$E, 2C_3, 3C_2, J, 2JC_3, 3JC_2.$$

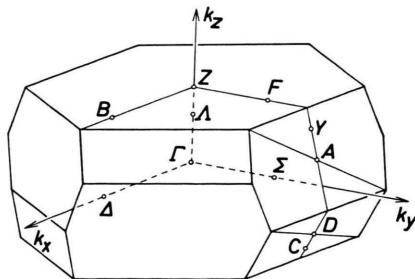


Abb. 1. BRILLOUIN-ZONE für rhomboedrisches Bor.

Die Gruppen der Wellenvektoren für Punkte und Linien hoher Symmetrie in der BRILLOUIN-ZONE (Abb. 1) sind: für  $\Gamma$  und  $Z$ :  $D_{3d}$ , für  $A$ :  $C_{3v}$ , für  $B$ ,  $\Delta$ ,  $F$ ,  $\Sigma$ ,  $Y$ ,  $C$ :  $C_2$  oder  $C_s$  und für  $A$  und  $D$ :  $C_{2h}$ . Die Charaktertafeln zu diesen Gruppen sind bei KOSTER<sup>4</sup> angegeben. Die Gruppen der Wellenvektoren von  $\Gamma$ ,  $Z$ ,  $A$  und  $D$  enthalten die Inversion, deshalb verschwindet  $\nabla \mathbf{k} E$  in alle Richtungen, und wir können in diesen Punkten Extrema erwarten. Im Spinfall sind infolge Zeitumkehrsymmetrie die Energiebänder in jedem Punkt der BRILLOUIN-ZONE zweifach entartet. Im einzelnen ergeben sich aus der Kp-Methode folgende  $E(\mathbf{K})$ -

<sup>1</sup> M. LIETZ u. U. RÖSSLER, Z. Naturforschg. **19 a**, 850 [1964].  
— R. SANDROCK u. J. TREUSCH, Z. Naturforschg. **19 a**, 844 [1964].

<sup>2</sup> B. F. DECKER u. J. S. KASPER, Acta Cryst. **12**, 503 [1959].

Funktionen. Für die eindimensionalen Darstellungen  $\Gamma_1^\pm$  und  $\Gamma_2^\pm$  im Punkt  $\Gamma$  ist der Bandverlauf parabolisch:

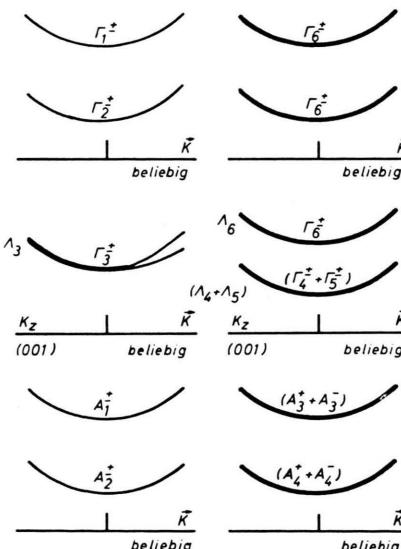
$$E_i(\mathbf{K}) = E_i + B_i K_\perp^2 + C_i K_z^2, \quad i = 1, 2,$$

mit der Abkürzung  $K_\perp^2 = K_x^2 + K_y^2$ . Auch die zweidimensionale Darstellung  $\Gamma_3^\pm$  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 Spinfall gehen  $\Gamma_1^\pm$  und  $\Gamma_2^\pm$  über in die

OHNE SPIN MIT SPIN

Abb. 2. Bandverlauf in der Umgebung der Punkte  $\Gamma$ ,  $Z$  wie  $\Gamma$ ,  $A$  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  $\Gamma_6^\pm$ . 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  $\Gamma$  Rotationsellipsoide um die  $A$ -Achse. Diese Ergebnisse gelten auch für den Punkt  $Z$ . In den Punkten  $A$  und  $D$

<sup>3</sup> R. E. HUGHES, C. H. L. KENNARD, D. B. SALLINGER, H. A. WEAKLIEM, D. E. SANDS und J. L. HOARD, J. Amer. Chem. Soc. **85**, 361 [1963].

<sup>4</sup> G. F. KOSTER, Solid State Phys. **5**, 174 [1957].



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  $\Gamma$ ,  $Z$ ,  $A$  und  $D$  Extrema vorausgesagt 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 ( $R_{\square} = \varrho/d$ ;  $\varrho$  = 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  $\Omega$  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  $\omega$  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  $C_x/C$  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  $\omega$  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  $\omega$  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 ( $\omega = 10^4 \text{ sec}^{-1}$ ,  $C \approx 6 \text{ pF}$ ).

