

# Übungen zur Einführung in die Gruppentheorie

14. Übung am 30. Januar 2002

---

## U24) Die Bandstruktur von Si und GaAs

Der Halbleiter Si hat eine sogenannte Diamand-Struktur (Punktgruppe  $O_h$ ), GaAs hat eine Zinkblende-Struktur (Punktgruppe  $T_d$ ). Beide Materialien haben ein flächenzentriert-kubisches Bravais-Gitter mit zwei Atomen pro Elementarzelle, wobei die zwei Atome um  $\frac{a}{4}(1, 1, 1,)$  mit Gitterkonstante  $a$  gegeneinander verschoben sind. Beim Diamand-Gitter sind beide Untergitter mit den gleichen Atomen besetzt, beim Zinkblende-Gitter sind die Untergitter mit verschiedenen Atomen besetzt.

- a) Diskutieren Sie die Bandstruktur dieser Halbleiter. Interpretieren Sie die Aufspaltung der Bänder jenseits der Hochsymmetrie-Punkte  $\Gamma$ ,  $L$ ,  $X$ ,  $U$  und  $K$  unter Verwendung der Kompatibilitätsrelationen der irreduziblen Darstellungen von  $O_h$  bzw.  $T_d$  und ihrer jeweiligen Untergruppen.

### b) Optische Übergänge

Wir betrachten optische Übergänge am  $\Gamma$ -Punkt. Zwischen welchen Bändern sind optische Übergänge erlaubt, zwischen welchen Bändern sind sie verboten?

Hinweis: Optische Übergänge werden beschrieben durch den Dipol-Operator  $\equiv$  Ortsoperator.

Multiplikationstabelle für die irreduziblen Darstellungen von  $T_d$

| $T_d$      | $\Gamma_1$ | $\Gamma_2$ | $\Gamma_3$                       | $\Gamma_4$                                  | $\Gamma_5$                                  |
|------------|------------|------------|----------------------------------|---|---|
| $\Gamma_1$ | $\Gamma_1$ | $\Gamma_2$ | $\Gamma_3$                       | $\Gamma_4$                                  | $\Gamma_5$                                  |
| $\Gamma_2$ |            | $\Gamma_1$ | $\Gamma_3$                       | $\Gamma_5$                                  | $\Gamma_4$                                  |
| $\Gamma_3$ |            |            | $\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3$ | $\Gamma_4 + \Gamma_5$                       | $\Gamma_4 + \Gamma_5$                       |
| $\Gamma_4$ |            |            |                                  | $\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$ | $\Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$ |
| $\Gamma_5$ |            |            |                                  |   | $\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$ |

