

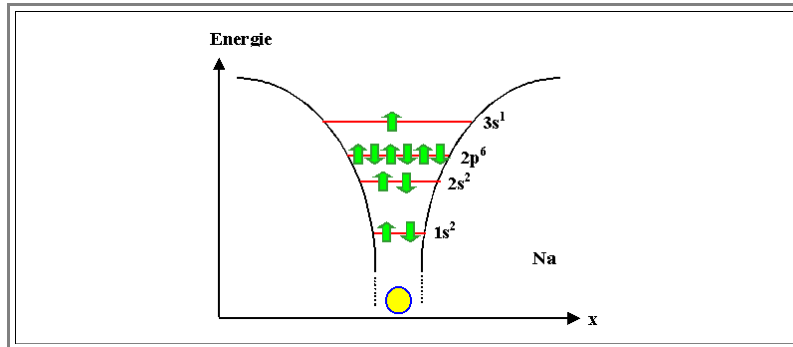
2.2 Quantenmechanische Betrachtung

2.2.1 Einleitung

Es ist nützlich, sich vor Aneignung dieses Kapitels noch einmal die Grundsätze der Quantentheorie ins Gedächtnis zu rufen. Das wird zwar in dieser Einleitung auch gemacht, aber ausführlicher findet sich das ganze in einem ["Basic" Modul](#).

Wir betrachten zunächst als Wiederholung (vergleiche [MatWiss I](#)) das Verhalten von Elektronen bei einzelnen Atomen. Es zeigte sich, daß die Elektronen wegen des [Pauli-Prinzips](#) auf verschiedene [Orbitale](#) mit verschiedenen Energien verteilt sind.

Das Bild unten zeigt die [Potentialtopfdarstellung](#) eines **Na**-Atoms. Wer Probleme hat, dieses Bild zu interpretieren, sollte dringend die entsprechende Module von [MaWi 1](#) nacharbeiten!



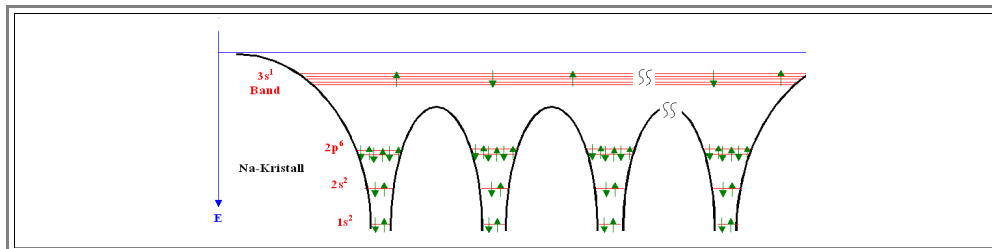
Bei der Annäherung von zwei Atomen (z.B. **H**-Atome des **H₂**-Moleküls) gibt es eine Aufspaltung der Atom-Energieniveaus in jeweils zwei Einzelniveaus.

Das muß ganz allgemein so sein, denn Atomverbände - ob zweiatomige Moleküle, große Moleküle oder Kristalle - haben immer nur Orbitale, oder besser **Zustände für Elektronen**, die alle zur Lösung *einer* Schrödingergleichung gehören. Falls die Atomzustände nicht aufspalten würden, gäbe es sehr schnell keinen Platz mehr für die Elektronen, die im Atom einen bestimmten Zustand bevölkern, denn nach dem Pauli-Prinzip können sie nicht alle im selben Zustand sein.

Das ist sofort evident für einen Festkörper: In einem Festkörper haben sich **N** (mit $N \approx 10^{22}$) Atome soweit angenähert, daß sich jedes Energieniveau des Einzelatoms, das im Prinzip allen Elektronen des gesamten Kristalls "zugänglich" ist, in **N Sub-Niveaus** aufspalten muß. Dies gilt also insbesondere für die Energie-Orbitale der äußeren Elektronen, weil sich deren **Wellenfunktionen** stark überlappen.

In dieser qualitativen Betrachtung scheint ein Stück Willkür zu stecken - tut es auch. Aber jede Willkür verschwindet sofort, wenn man die Schrödingergleichung wirklich löst (die "Willkür" steckt dann in den verwendeten Näherungen).

Das Prinzip der Bildung von **Energiebändern** aus bestimmten Atomorbitalen (bei **Na**-Beispiel aus dem **3s**-Orbital) ist aber im graphischen Potentialtopfmodell problemlos nachzuvollziehen; es ist unten [abermals](#) gezeigt.



Die Energie-Subniveaus liegen energetisch sehr dicht und werden auch als **Energieband** bezeichnet.

Es gibt in dem **3s¹** Band genau doppelt soviel Plätze wie Elektronen, da jedes Atom ein Energie(sub)niveau mit zwei Plätzen beisteuert.

Die Aufspaltung der **2p⁶**, **2s²** und **1s²** Niveaus ist so gering, dass wir in diesem Bild keine Bänder einzeichnen, sondern einfach die Atomniveaus beibehalten. Letztlich sind bei jeder Bindung ja auch nur die äußeren Elektronen betroffen.

Energiebänder in Festkörpern haben einige allgemeine Eigenschaften, die wir kurz aufzählen wollen, bevor wir sie im Detail herleiten und interpretieren:

Die **Energieniveaus** des Festkörpers liegen energetisch *niedriger* als bei den isolierten Atomen. Das muß einfach so sein, denn sonst gäbe es keinen Grund, daß die Atome "zusammenhalten". Die durch die Bildung des Festkörpers gewonnene Energie stimmt im wesentlichen mit der **Bindungsenergie** (pro Atom ca. **1eV**) überein.

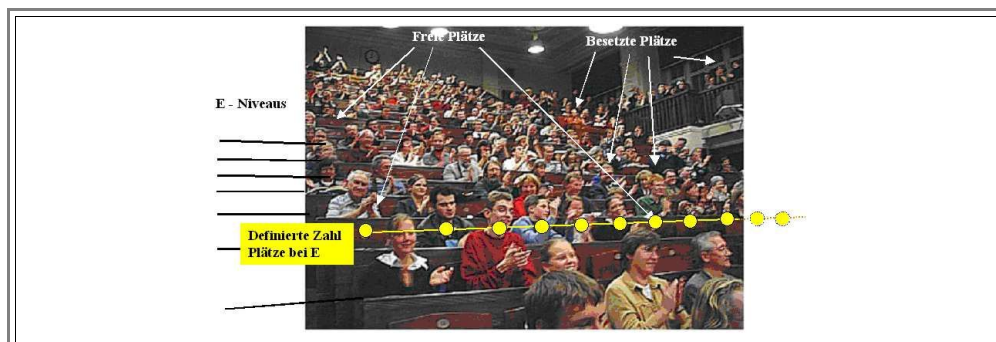
- Nicht alle Energiezustände in den Bändern müssen mit Elektronen besetzt sein. So ist z.B. beim **Na** das **2p**-Band voll besetzt, das **3s**-Band aber nur halb mit Elektronen gefüllt; die höheren Bänder sind vollständig leer - siehe unten.
- Bei einigen Materialien (Isolatoren, Halbleiter) stellt man im Bänderschema innerhalb eines gegebenen Bands **Energielücken** (engl: "gap") fest, d.h. Energiebereiche, in denen **keine** Energiezustände für Elektronen existieren.
- Die Besetzung der Energiezustände mit Elektronen ist bei endlicher Temperatur nicht für alle Zustände gleich wahrscheinlich. Die Besetzungswahrscheinlichkeit der Niveaus mit Elektronen regelt **nicht** mehr die [Boltzmannverteilung](#), die nur für "klassische" Teilchen gilt, sondern die **Fermi-Dirac Statistik**; die wir uns noch erarbeiten müssen.

Die Thematik der kommenden Kapitel ist damit vorgegeben. Insbesondere interessieren wir uns für folgende Themen:

- Wie genau kommen die Bänder zustanden? Wie entstehen Energielücken?
- Wie groß sind die beteiligten Energien? Welche Faktoren bestimmen die Zahlenwerte?
- Wie genau sind die einzelnen Zustände in einem Band verteilt? Wie groß ist die "**Zustandsdichte**", d.h. die Zahl der individuellen Niveaus in einem Band in einem gegebenen Energieintervall bei der Energie **E**?
- Welche Niveaus werden von den vorhanden Elektronen auch bevölkert oder anders gefragt, wie groß ist die Besetzungswahrscheinlichkeit für einen bestimmten Platz? Was genau bedeutet die bereits angesprochene Fermi-Dirac Statistik?

Diese Fragen lassen sich leicht veranschaulichen. Wir betrachten dazu den Übergang vom Studierenden**gas**, in dem **N** Studierende (aus Sicht des Professors alle ununterscheidbar) in der Lobby wild und völlig ungeordnet durcheinanderlaufen, zum Studierenden**festkörper**.

- Der Studierenden**festkörper** ist durch den Hörsaal vorgegeben, der definierte Energieniveaus hat (= Höhe der Sitzreihe in einem gestuften Hörsaal) mit einer bestimmten (und im allgemeinen verschiedenen) Zahl von Plätzen pro Energieniveau (= Zahl der Sitzplätze in einer Reihe). Das sind die durch die Art des Kristall vorgegebenen Energiewerte (= Stufung) plus der Zustandsdichte (= Zahl der Plätze pro Stufe).



- Es gibt eine definierte Zahl von Plätzen bei definierten; d.h. mit einem Index **n** numerierbaren (potentiellen) Energien **E_n** . Viele, aber nicht alle Plätze sind mit Studierenden besetzt. Welcher **Verteilungsfunktion** die Studis folgen d.h. mit welcher Wahrscheinlichkeit Plätze bei der Energie **E_n** besetzt werden, ist aber nicht so klar. Wir können nicht unbedingt davon ausgehen, daß die Studis die (freie) Energie minimieren, denn dann müßten sie die vorhandenen Plätze von "unten" kommend lückenlos auffüllen und die "oberen" Plätze freilassen
- Bei der derzeitigen Entwicklung der Architektur ist es nur eine Frage der Zeit, bis die Parameter Energieniveaus **E_n** und Zahl der Plätze bei **E_n** als Funktion einer Koordinate ziemlich beliebig werden (im Gegensatz zu dem altmodischen Hörsaal, in dem die Abstände der Stufen i.d.R. konstant sind (d.h. **$E_{n+1} - E_n = \text{const}$** , und pro Stufe gleichviel (oder stetig ansteigende) Platzzahlen vorliegen). Im allgemeinen wird es aber immer diskrete Energiewerte geben, mit einer beliebigen, aber gegebenen Zahl von Plätzen pro Energiewert.
- Die Verteilung der Studierenden auf die vorhandenen Plätze entspricht dann der Verteilung der Elektronen in einem Band. Und genausowenig wie Studis die vorhandenen Plätze von unten an vollständig auffüllen, tun das die Elektronen - das wäre zu ordentlich. Wir ahnen damit schon, daß die **Entropie** wieder eine wichtige Rolle spielen wird.

Fragebogen / Questionnaire

Multiple Choice Fragen zu 2.2.1