

8.2.4 Merkpunkte zu Kapitel 8.2: Elektronenwellen und Bandstruktur

Von einer Beugung **am** Kristallgitter sind auch die Elektronen betroffen, die sich **im** Kristallgitter befinden – weil sie quantenmechanisch durch (modifizierte) ebene Wellen beschrieben werden.

- Für den Beugungswinkel Θ_B gilt die **Bragg-Bedingung** $\Rightarrow$
- Wenn die Bragg-Bedingung **nicht** erfüllt wird, läuft die Welle **unverändert** durch den Kristall.
- Daher verhalten sich Kristallelektronen, die von einer nicht gebeugten Welle beschrieben werden, wie freie Elektronen.
- In Vektorschreibweise lautet die Bragg-Bedingung:

$$\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G}_{hkl} \quad \text{und} \quad |\underline{k}| = |\underline{k}'|$$

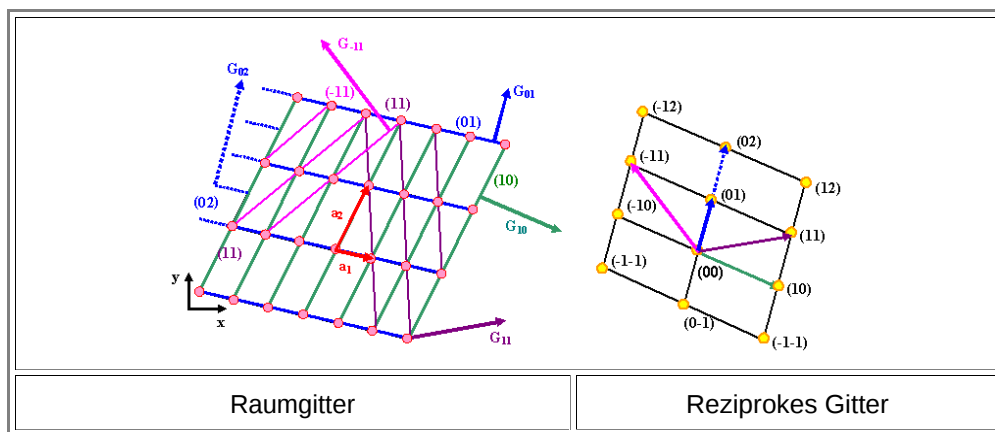
$$\sin \Theta_B = \frac{n \cdot \lambda}{2 \cdot d_{hkl}}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$|\underline{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

- Dabei ist $\underline{G}_{hkl}$ ein Vektor des reziproken Gitters.

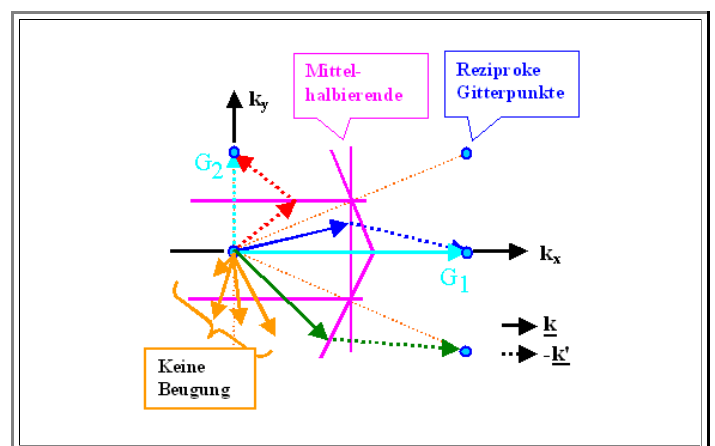
Das reziproke Gitter lässt sich in eindeutiger Weise aus den Raumgitter konstruieren:



- Das reziproke Gitter ist Teil des reziproken Raumes.

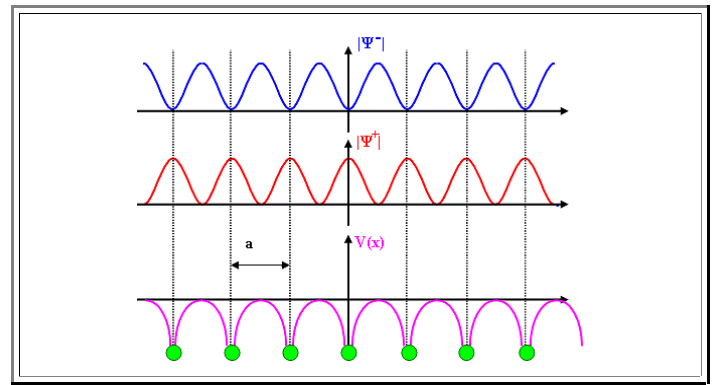
Die Vektorschreibweise der Bragg-Bedingung zeigt, daß auch die Wellenvektoren $\underline{k}$ im reziproken Raum liegen.

- Alle Wellenvektoren $\underline{k}_{Br}$, die die Bragg-Bedingung erfüllen, liegen auf der Mittelhalbierenden eines reziproken Gittervektors $\Rightarrow$
- Im dreidimensionalen Fall haben wir **Flächen** als Mittelhalbierende.
- Diese Flächen schneiden sich und bilden ein System von ineinandergeschachtelten Polyedern, genannt **Brillouin-Zonen**.
- Das kleinstmögliche dieser Polyeder ist die erste Brillouin-Zone, abgekürzt **1. BZ**.



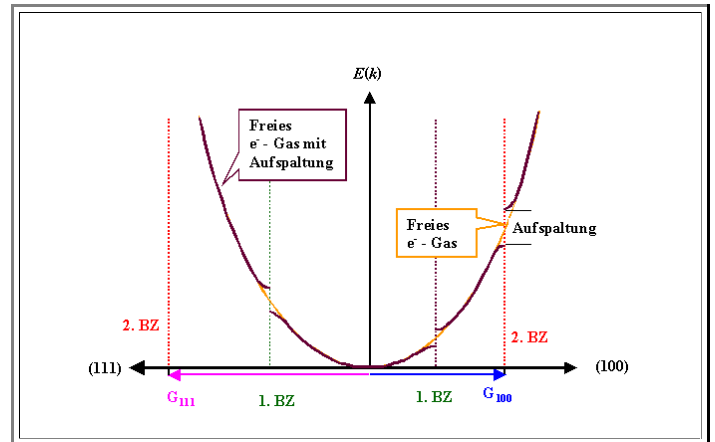
Die elektronischen Wellenfunktionen mit einem solchen Wellenvektor $\mathbf{k}_{Br}$ sind stehende Wellen.

- Aufgrund der zugehörigen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich für die betreffenden Elektronen ein Zusatzbeitrag der potentiellen Energie.
- Dabei gibt es zwei Möglichkeiten, je nach Lage der Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit *zwischen* den Atomen (blaue Kurve; Bereiche hohen Potentials) oder *nahe bei* den Atomen (rote Kurve; Bereiche niedrigen Potentials) $\Rightarrow$
- Die Energie für Wellenvektoren auf den **Rändern** der **BZ** nimmt daher **zwei** Werte an; wir haben eine **Energieaufspaltung**.

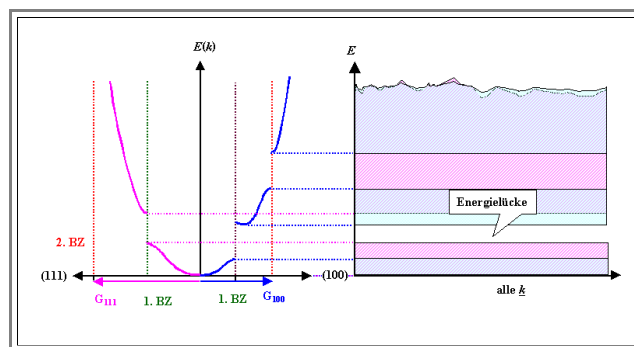


Die Energie als Funktion des Wellenvektors ist an all den Stellen, an denen die Wellenvektoren auf den Rändern (und in der Nähe) einer **BZ** liegen, durch die Aufspaltung modifiziert gegenüber dem parabelförmigen Verlauf beim freien Elektronengas.

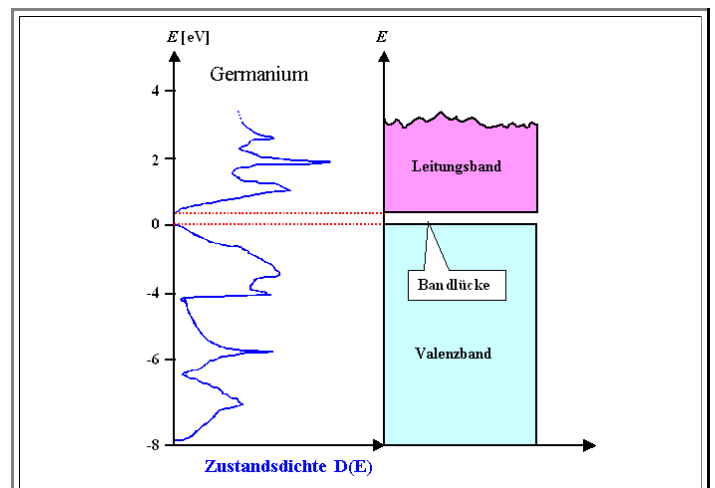
- Für **verschiedene** Richtungen im reziproken Gitter geschieht das an **verschiedenen** Stellen.
- Die orangefarbene Parabel im Bild rechts ist die Energie der quasi-freien Elektronen, denn für diese gilt $E(\mathbf{k}) \sim k^2$.
- An den Schnittpunkten der $E(\mathbf{k})$ -Kurve mit den Rändern der **BZ** haben wir **zwei** Energiewerte.
- Bei realen Materialien kann sich genaue Verlauf der $E(\mathbf{k})$ -Kurve erheblich von der einfachen Parabel des freien Elektronengases unterscheiden (und insbesondere weit mehr sein als eine bloße Aufspaltung).



Wegen der Kompliziertheit der vollständigen Bandstruktur geht man zu einer **stark vereinfachten** Darstellung der Energien von Kristallelektronen über: Es wird nur noch betrachtet, welche Energiewerte erlaubt und welche verboten sind – und das ganz und gar unabhängig von der Richtung im reziproken Raum. Das Ergebnis ist dann ein **Banddiagramm**:



- Das Banddiagramm ist eine stark vereinfachte Darstellung der Gesamtheit der $E(\mathbf{k})$ -Kurven, daher steht an der **x**-Achse keine Achsenbezeichnung – sie enthält keinerlei Information mehr. (Das in der Zeichnung oben angegebene "alle $\mathbf{k}$ " ist rein symbolisch zu verstehen!)
- An der Abszisse kann auch "**x**" oder "**z**" oder $\langle 110 \rangle$ stehen, dann ist es eine Darstellung der erlaubten Energien im **Ortsraum** – das Banddiagramm sieht weiterhin genauso aus. (Davon werden wir später bei der Beschreibung einer Diode oder anderer Bauelemente viel Gebrauch machen!)
- Aussagekräftiger ist es, auf der Abszisse die Zustandsdichte $D(E)$ aufzutragen. Hier ist es an einem konkreten Beispiel (Germanium) gezeigt $\Rightarrow$



- In der Bandlücke des **idealen** Kristalls ist die Zustandsdichte per definitionem **=0**. (Das läßt sich aber durch wohldosierte Abweichungen von der Idealität gezielt ändern, wie wir später noch sehen werden!)