

4.1.4 Merkpunkte Kapitel 4.1

Auch die Elektronen(wellen) des Kristall werden gebeugt; es gilt die Bragg-Bedingung:

- Die Bragg-Bedingung ist für alle Zustände ($= \mathbf{k}_B$; *nicht mit Boltzmannkonstant k_B verwechseln!*) erfüllt, die auf den Rändern einer *Brillouinzone* liegen
- Brillouinzonen sind die ineinandergeschachtelten Polyeder im reziproken Gitter, die man mit der "Mittelhalbierenden" Konstruktion erhält.
- Die **1. BZ** ist die *Wigner-Seitz EZ* des reziproken Gitters.

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$$

Die Untermenge der gebeugten Elektronenwellen überlagern sich zu stehenden Wellen; es gibt grundsätzlich *zwei* Möglichkeiten:

- Die Maxima der *stehende Wellen* liegen bei oder zwischen den Gitterpunkten/Atomen (a = Gitterkonstante).
- Die zugehörigen Energien *müssen* verschieden sein; wir erhalten auf den Rändern der Brillouinzonen eine Energieaufspaltung der $E(\mathbf{k})$ -Parabel.

$$\psi^{\pm} = \exp(i\mathbf{k}_B \mathbf{r}) \pm \exp(-i\mathbf{k}_B \mathbf{r})$$

$$\psi^+_{\max} = n \cdot a \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi^-_{\max} = n \cdot a + a/2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Das kann nur so aussehen:

- Nur in der Nähe einer **BZ** ist die freie Elektronengas Dispersionskurve "verbogen"; direkt auf der **BZ** macht sie einen Sprung, d.h. erlaubt *zwei* Energiewerte für ein $\mathbf{k}$.
- Qualitativ bleibt in dieser Betrachtung nur die Größe der Aufspaltung und der Verlauf in der Nähe der **BZ**.

