

4.4.1 Merkpunkte Kapitel 4

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**.

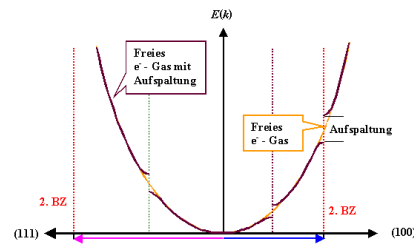
$$\psi^\pm = \exp(i\mathbf{k}_B \mathbf{r}) \pm \exp(-i\mathbf{k}_B \mathbf{r})$$

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

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

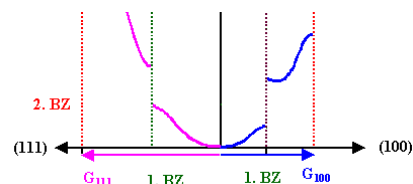
Das kann nur so aussehen:

- 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**.



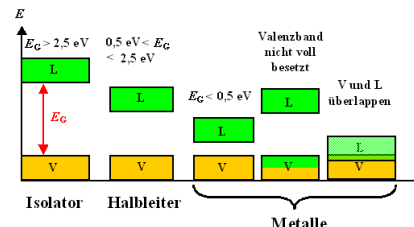
Reale **Dispersionskurven** können auch zwischen **BZ** von der idealen "freien Elektronengasparabel" abweichen

- Insbesondere müssen die Maxima und Minima **nicht** immer auf der **BZ** liegen.
- Die Größe der Energieaufspaltung ist ein Materialparameter



Ein Banddiagramm ist die stark vereinfachte Pauschaldarstellung der erlaubten Energien.

- Nur **Valenzband** (letztes mit Elektronen teil- oder vollbesetztes Band) und das darüberliegende **Leitungsband** sind wichtig
- Ein Band hat genau so viele Zustände wie die Zahl der **EZ** im Kristall
- Die Bandstruktur ist ein "Materialparameter"; wichtig ist die Größe der Energielücke **E_G** .



Allein die Größe der Energielücke entscheidet darüber, ob ein (perfekter) Kristall ein Leiter (= Metall; Halbmetall), Halbleiter oder Isolator ist.

-

-

-

-

