

## 4. Elektronische Energiebänder

### 4.1 Erweiterung des Modells der freien Elektronen durch das periodische Gitterpotential

#### 4.1.1 Freies Elektronengas und Bragg-Bedingung

- Ein Elektron des freien Elektronengases, das mit  $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \psi_0 \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  beschrieben wird, *ist* eine ebene Welle - und ebene Wellen werden an der periodischen Kristallstruktur gebeugt, falls die Bragg-Bedingung erfüllt ist.
- Das gilt für *alle* Elektronenwellen - nicht nur für solche, die wir von außen "hineinschießen".
  - Sobald wir also in unserem Modell des freien Elektronengases ein noch so kleines periodisches Potential "einschalten", bewegen sich die Elektronen jetzt in einem *Kristall*, und wir müssen mit (noch so kleinen) Beugungseffekten rechnen.
- Man kann das Problem jetzt auf zwei Weisen angehen:
- Wir gehen voll *quantitativ* vor und lösen die Schrödingergleichung für ein periodische Potential, das die reale Situation in einem Kristall widerspiegelt. Das tut man am besten, indem man das periodische Potential in eine *Fourierreihe* entwickelt, und damit in die Schrödingergleichung eingeht. Man hat dann immer die Option, die Terme höherer Ordnung zu vernachlässigen, wenn man mathematisch nicht recht klar kommt.
    - Wie das aussieht kann man sich im Link anschauen. Die Beugerei muß in den Lösungen enthalten sein, und das ist sie auch.
    - Aber der dazu nötige Aufwand ist erheblich. Für unsere Zwecke reicht es, die Lage mehr qualitativ zu betrachten:
  - Wir betrachten also die Situation zunächst nur *qualitativ* mit wenigst möglichen Änderungen relativ zum freien Elektronengas. Dazu denken wir uns zwar ein periodisches Potential eingeschaltet, aber nur ein ganz kleines. So klein, daß wir nur mit *kleinen* Korrekturen zu den Lösungen für ein konstantes Potential rechnen müssen, aber nicht mit grundsätzlich neuen Dingen.
    - Das wird dann *nicht* die Realität widerspiegeln, aber vielleicht doch generelle Hinweise auf die zu erwartenden Änderungen geben.
    - Denn auch mit einem *kleinen* periodischen Potential werden wir Beugung haben. Wir müssen zwar erwarten, daß die Amplituden der gebeugten Wellen dann vielleicht klein sind; aber dafür interessieren wir uns zunächst noch nicht. Wir betrachten ausschließlich die *generellen* Effekte, die durch Beugung zustande kommen.
    - Und darüber hinaus machen wir uns klar, dass all die Elektronen, die keine Beugungsbedingung erfüllen, gar nichts tun. Sie benehmen sich nach wie vor wie die Elektronen des freien Elektronengas Modells.
- Wie es sich zeigen wird, reicht die 2. Vorgehensweise im wesentlichen aus, um alles abzuleiten was wir hier wissen müssen.
- Zur Wiederholung, und um einen ersten Eindruck zu bekommen, was uns erwartet, stellen wir die bisherigen Erkenntnisse (im wesentlichen freies Elektronengas) den *zu erwartenden* Änderungen gegenüber.
- Warum die *zu erwartenden* Änderungen erwartet werden können, wird uns in den nächsten Unterkapiteln beschäftigen. Es ist aber nicht verboten, schon jetzt mal selbst ein bißchen darüber nachzudenken.

	Freies Elektronengas	Freies Elektronengas mit Beugung
Potential $V(x, y, z)$	$V = \text{const} = 0$	$V_x = V_0 \cdot \cos(2\pi x/a_1)$ $V_y = V_0 \cdot \cos(2\pi y/a_2)$ $V_z = V_0 \cdot \cos(2\pi z/a_3)$ $V_0 \rightarrow 0$
Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$	$\psi = \left( \frac{1}{L} \right)^{3/2} \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$	$\psi = \left( \frac{1}{L} \right)^{3/2} \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  <i>außer</i> für Wellenvektoren $\mathbf{k}_B$ die gebeugt werden
Wellenvektoren $\mathbf{k}$	$k_x = \pm n_x \cdot 2\pi / L$ $k_y = \pm n_y \cdot 2\pi / L$ $k_z = \pm n_z \cdot 2\pi / L$  $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$	$k_x = \pm n_x \cdot 2\pi / L$ $k_y = \pm n_y \cdot 2\pi / L$ $k_z = \pm n_z \cdot 2\pi / L$  $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Energie $E$	Gesamtenergie = const = $E_{\text{kin}}$	Gesamtenergie = const = $E_{\text{kin}}$ <b>außer</b> für Wellenvektoren $\underline{k}_B$ die gebeugt werden, denn dann kommt etwas potentielle Energie ins Spiel
Dispersionsfunktion $E(\underline{k})$	$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ <b>außer</b> für Wellenvektoren $\underline{k}_B$ die gebeugt werden
Zustandsdichte $D(E)$	$D(E) = \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\hbar^3 \pi^2} E^{1/2}$	$D(E) = \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\hbar^3 \pi^2} E^{1/2}$ als <b>erste Näherung</b> . Könnte sich aber auch kräftig ändern
Besetzungswahrscheinlichkeit $f(E, T)$	$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right) + 1}$	$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right) + 1}$
<b>gilt immer !</b>		

- Im wesentlichen können wir für alle Funktionen, die  $\underline{k}$  als Variable haben, irgendwelche Änderungen erwarten, falls  $\underline{k}$  die Bragg-Bedingung ungefähr erfüllt.
- Für alle Wellenvektoren, die das nicht tun, sollten eigentlich die Formeln des freien Elektronengases weiter gelten
  - Obwohl es selbstverständlich ist, soll noch extra darauf hingewiesen werden, daß die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Energieniveaus  $E(\underline{k})$  **immer** durch die Fermiverteilung gegeben ist.
  - Damit sind auch alle wesentlichen Formeln, die wir im Zusammenhang mit der Fermiverteilung erhalten haben unverändert gültig. Man muß nur die richtige Formel für die Zustandsdichte einsetzen, denn hier müssen wir mit Änderungen rechnen

## Fragebogen / Questionnaire

Multiple Choice Fragen zu 4.1.1