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 (= $\underline{\boldsymbol{k}}_B$; *nicht mit Boltzmannkonstant* $\boldsymbol{k_B}$ *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.

$$\underline{\boldsymbol{k}} - \underline{\boldsymbol{k}}' = \underline{\boldsymbol{G}}$$

- 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*(*k*)**-Parabel.

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

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

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

- 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 $\underline{\boldsymbol{k}}$.
  - Qualitativ bleibt in dieser Betrachtung nur die Größe der Aufspaltung und der Verlauf in der Nähe der **BZ**.