

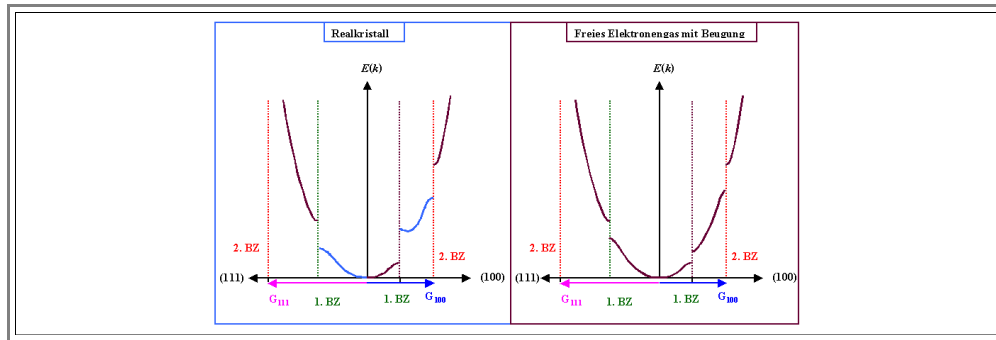
4.2 Banddiagramme

4.2.1 Konstruktion von Banddiagrammen und Zustandsdichte

Wir basteln ein Banddiagramm

Im vorhergehenden Kapitel haben wir uns klar gemacht, wie die $E(\mathbf{k})$ -Kurve eines realen Kristalls *prinzipiell* aussehen muß.

- Wir nehmen nun diese Kurve und fragen uns, wie sie *wirklich* aussieht. Dazu müssen einige prinzipielle Erkenntnisse einfließen, die von der Festkörperphysik mit harten Rechnungen erarbeitet wurden.
- Um das zu verstehen, stellen wir einfach die *alte "Prinzip"kurve* und die *reale* Kurve eines realen Kristalls einander gegenüber:



Im Grunde brauchen wir nur zwei, "irgendwie" auch ohne lange Rechnung verständliche Verallgemeinerungen:

1. Die *Größe* der Aufspaltung, d.h. die Breite der **Energielücke**, ist kristall- und richtungsspezifisch. Das ist im linken Ast für die Kurve in der **1. BZ** angedeutet.

- Das heißt, z.B. daß die Energielücke in der **{100}**-Richtung des **Si** verschieden sein wird von der im **Ge**, oder **GaAs**, oder ..., (immer im reziproken Gitter natürlich).
- Es heißt auch, daß die Energielücke in der **{100}**-Richtung des **Si** verschieden sein wird von der Energielücke in der **{111}**-Richtung des **Si**, oder der **{110}**-Richtung, oder der **{hkl}**-Richtung. Allerdings sind natürlich Kristallsymmetrien gewahrt, d.h. die *geschweiften* Klammern sind absichtlich gesetzt.

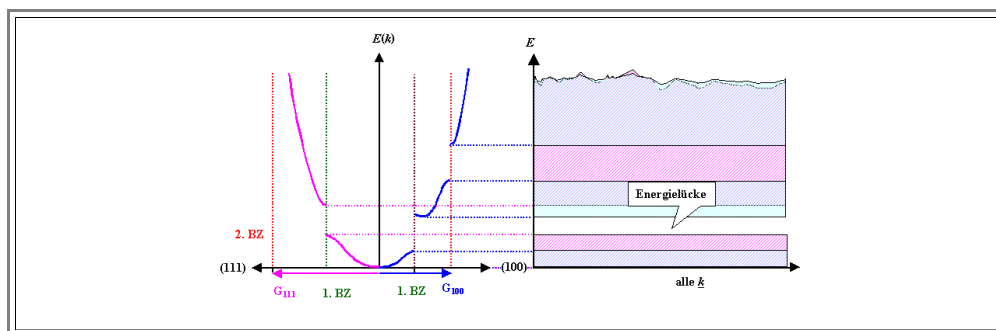
2. Der genaue Verlauf der $E(\mathbf{k})$ Kurve kann sich kräftig von der einfachen Parabel des freien Elektronengases unterscheiden. Das ist im rechten Ast für die Kurve in der **2. BZ** angedeutet.

- Insbesondere muß das **Minimum** oder **Maximum** des Energiewertes für irgendeinen Zweig, so wie im rechten Ast gezeigt, nicht unbedingt auf dem Rand einer **BZ** liegen. *Das wird weitreichende Konsequenzen haben.*

Unterstellen wir einfach, daß die richtigen Kurven für einen gegebenen Kristall in allen Details bekannt sind (falls nicht gerechnet, dann wenigsten gemessen), dann haben wir alles was wir brauchen. Das Problem ist nur: Viele Kurven in all diese Richtungen - es wird unübersichtlich.

- Wir gehen deshalb über zu einer *stark vereinfachten* Darstellung der Elektronen in Kristallen: Wir betrachten nur noch, welche Energiewerte erlaubt, und welche verboten sind - für beliebige Richtungen. Das Ergebnis ist dann ein **Banddiagramm**.

- Wie man vorgeht ist im nächsten Bild schematisch gezeigt; wir bedienen uns der Kurve aus dem [obigen Bild](#).



Wir projizieren einfach *alle* erlaubten Energiewerte für *alle* Richtungen auf *ein* $E(\mathbf{k})$ Diagramm, wobei wir aber den jeweiligen \mathbf{k} -Wert gar nicht mehr betrachten.

- Gezeigt ist die Projektion von *zwei* Ästen der Dispersionskurve, die zwei *Teilbänder* ergeben. Wir können die Vorgehensweise natürlich "leicht" auf *alle* Äste ausdehnen, die dadurch erhaltenen "*Bänder*" *aller* möglichen Energiewerte geben dem Diagramm den Namen: Es heißt **Banddiagramm**.
- Die Energielücke ist prominent zu sehen, wir nennen sie ab jetzt auch **Bandlücke**, oder in **Denglisch** "**Bandgap**".

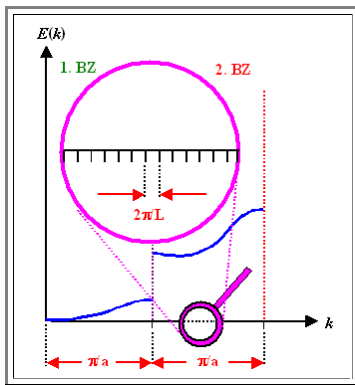
- Wir haben zwar nach wie vor zu jeder beliebigen herausgegriffen Energie (mehrere) bestimmte k -Werte, aber die interessieren uns nicht mehr.
 - Falls wir das Banddiagramm als stark vereinfachte Darstellung der Gesamtheit der $E(k)$ Kurven betrachten, steht an der x -Achse natürlich k . Wir können aber die Achsenbezeichnung im Moment auch weglassen, da sie keinerlei Information enthält.
 - Wir können *noch* einen Schritt weitergehen und z.B auch " x " oder " z " oder $\langle 110 \rangle$ an die Abszisse schreiben, d.h. eine Darstellung der erlaubten Energien im *Ortsraum* wählen - das Banddiagramm sieht genau so aus.
- Das sieht wirklich nach einer massiven Vereinfachung aus. Aber das werden wir auch brauchen, denn aus dem hier noch einfachen Banddiagramm wird schnell genug wieder ein kompliziertes Gebilde werden.

Zahl der Zustände in einem Band

Wieviele Zustände N_B gibt es in einem Band? Dazu muß man nur die Zustandsdichte über die Energie von der Bandunterkante bis zur Bandoberkante integrieren - leider kennen wir die Zustandsdichte nicht mehr.

- Die Frage ist trotzdem ganz leicht zu beantworten - wenn wir ein bißchen nachdenken. Man kann sogar eine Antwort aus zwei grundverschiedenen Betrachtungsweisen finden, die wir beide kurz anschauen:
- 1. Abzählen der möglichen Wellenvektoren in einer **BZ**, und
- 2. Betrachtung der *Aufspaltung der Energieniveaus* der Einzelatome bei der Bildung eines Kristalls.

Im ersten Fall betrachten wir nochmals die Dispersionskurve wie gehabt; schauen aber etwas genauer auf die k -Achse



- Dort finden wir diskrete Werte für die erlaubten k -Vektoren. Sie haben auf den k -Achsen, die der $\langle 100 \rangle$ Richtung in reziproken Gitter entsprechen, immer den Abstand

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}$$

- daran hat sich nichts geändert.

- Jedes Band entsteht durch die Überlagerung diverser Teilbänder, die jedoch alle aus derselben Brillouin Zone stammen. Die Breite $2k_{BZ}$ der Brillouin Zone in Richtung der $\langle 100 \rangle$ Achsen des reziproken Gitters ist aber immer die halbe Länge des reziproken Gittervektors $\{100\}$ mal 2 d.h

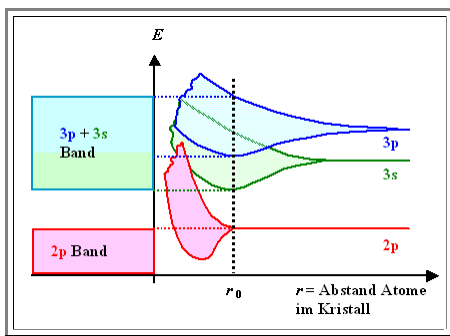
$$2k_{BZ} = \frac{2 \cdot \pi}{a}$$

- a ist die Gitterkonstante des Raumgitters. Damit passen

$$N_B = \frac{2\pi}{a} : \frac{2\pi}{L} = \frac{L}{a} = \text{Zahl der EZ}$$

- Zustände in ein Band. Das ist ein einfaches Ergebnis. *Wir haben genau so viel Zustände in jedem Band, wie wir Elementarzellen im Gitter haben.*

Schauen wir uns das noch in der 2. Betrachtung an



- Wir formen einen **Na Kristall**, indem wir gedanklich die Potentialtöpfe der **Na** Atom überlagern. Das Bild dazu [kennen wir schon](#) und zeigen es nicht nochmal.
- Hier betrachten wir diesen Vorgang etwas quantitativ, indem wir die Größe der Aufspaltung, d. h. die Differenz zwischen höchster und niedrigster Energie in dem entstehenden **Band**, über den Abstand der Atome auftragen.
- Aus jedem der bei großem Abstand diskreten Niveaus wird ein Band; die einzelnen Teilbänder mögen sich bei einem bestimmten Abstand überlappen oder auch nicht.
- Im gezeigten Beispiel **Na** ist das letzte besetzte Niveau das **3s¹ Niveau**; wir erwarten den Gleichgewichtsabstand **r₀** (= Gitterparameter) im Minimum des **3s** Bandes (Warum wohl?).

Die Bandstruktur ergibt sich wie gezeichnet, indem man die jeweiligen Energiewerte der "Bänder" bei **r₀** in ein Banddiagramm einzeichnet.

- Der Name "**Bänder**" ist nicht zufällig derselbe wie beim freien Elektronengas + Beugung - es **sind** dieselben Bänder, über die wir hier reden.
- Nur können wir hier die Entstehung aus diskreten Energieniveaus der Atome nachvollziehen und damit auch sofort sagen, wieviele Zustände in einem Band vorliegen: **N_B** = Zahl der Atome mal Zahl der Zustände in den diskreten Niveaus, aus denen sich das Band zusammensetzt.
- Wie so ein Diagramm für **Si** aussieht, [kann man im Link anschauen](#).

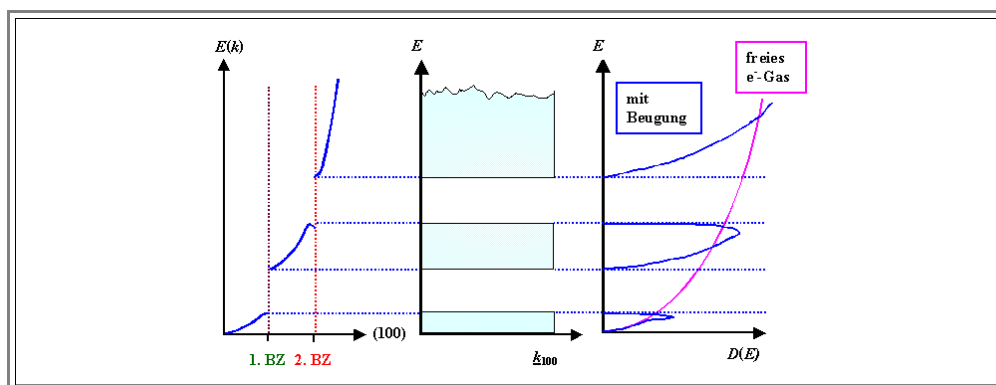
Das ist natürlich nicht dasselbe, wie die Zahl der Zustände im ersten Ansatz. Das kann es aber auch nicht sein, denn im ersten Fall hatten wir ein "leeres Gitter" im zweiten Fall einen realen Kristall.

- Jedenfalls aber halten wir fest: Die Gesamtzahl der Zustände in einem Band ist eine feste Größe, die unmittelbar aus Gitter, Basis und Bindungsverhältnissen folgt. Sie liegt in der Größenordnung der Zahl der beteiligten Atome.

Zustandsdichte in Bändern

Zu Beginn dieses Kapitels haben wir uns gefragt, was bei "Einschalten" eines periodischen Potentials aus der Zustandsdichte des freien Elektronengases wird und [vermutet](#), daß es an den Rändern der **BZ** Änderungen geben muß.

- Das können wir ein bißchen vertiefen, wenn wir uns das Banddiagramm anschauen, wobei wir zunächst mal nur das Banddiagramm eines einzigen "Zweigs" betrachten



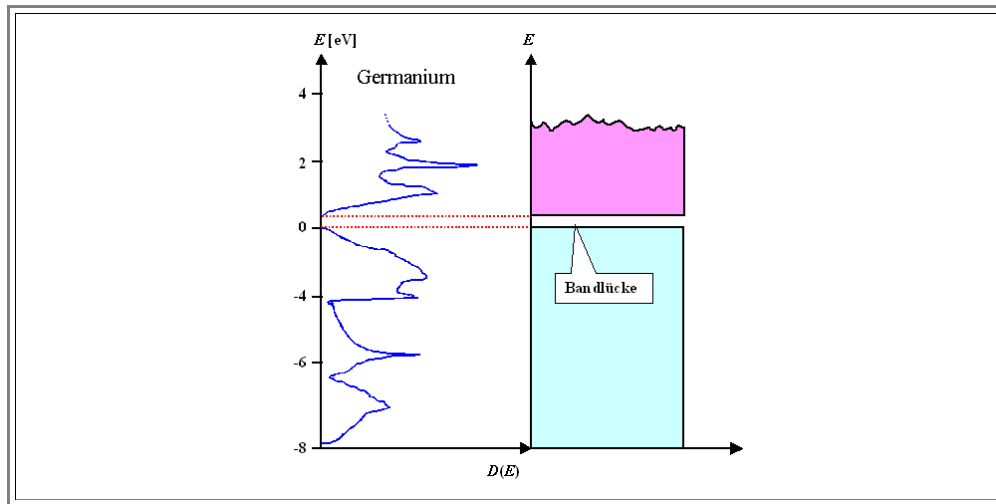
Zwei Schlußfolgerungen können gezogen werden - die erste leicht verständlich, die zweite etwas indirekter

1. In der Bandlücke gibt es **per definitionem** keine Zustände, also muß die Zustandsdichte = **0** sein.

- Da wir aber keine Zustände verlieren - wir haben die Zahl der **k**-Vektoren schließlich nicht geändert - müssen die Zustände, die vorher in einem Energiebereich waren, der jetzt der Bandlücke entspricht, irgendwie in die Zustände im Band "gequetscht" werden.
- In der Zeichnung ist das angedeutet; es könnten beispielsweise "Spitzen" in der Nähe der Bandkanten auftreten. Aber genaue Aussagen kann man qualitativ darüber nicht machen

2. Das freie Elektronengasmodell hat den Nullpunkt der Energie auf einen willkürlichen Wert gelegt. Im Grunde war das Kriterium, daß für **E > 0** die Elektronen frei sein sollen.

- Niemand hält uns nun davon ab, den "Boden" eines Bandes als Nullpunkt der Energie zu nehmen, d.h. jedes Band als eigenes System in der freien Elektronengasnäherung zu betrachten. Da jedes Minimum (und Maximum) des Bandes $E(\mathbf{k})$ in erster Näherung durch eine nach oben (bzw. nach unten) geöffnete Parabel beschrieben werden kann, erhalten wir zumindest in der Nähe der Bandkanten weiterhin eine Dispersionsrelation wie beim freien Elektronengas, d.h. wir können z.B. auch die Zustandsdichten in der Nähe der Bandkanten weiterhin sehr gut durch eine Wurzelfunktion $D(E) = \text{const.} \cdot E$ beschreiben. Nur wird sich im Allgemeinen die Konstante von der des freien Elektronengases unterscheiden.
- Dann hat jedes Band als Zustandsdichte modifizierte Wurzelfunktionen an den Bandkanten und möglicherweise recht komplizierte Strukturen dazwischen - so wie eingezeichnet.
- ▶ Aber es lohnt sich gar nicht, auf die Komplikationen in *einem* der vielen Teilbänder einzugehen.
- Denn wenn wir jetzt die *gesamte* Zustandsdichte in einem Band betrachten, das durch Überlagerung vieler Teilbänder zustande kam, erhalten wir die Überlagerung vieler mittelkomplizierter Zustandsdichten - das Gesamtergebnis kann beliebig kompliziert sein; das folgende Bild zeigt die (gemessene) Zustandsdichte von Germanium zusammen mit dem relevanten Teil der Bandstruktur



- ▶ Damit ist die (theoretische) Lage (fast) hoffnungslos- aber für uns ist das Leben einfacher geworden: Zustandsdichten muß/kann man messen und hinnehmen! Wir merken uns nur zwei Dinge
- Hinter jedem Banddiagramm verbirgt sich immer noch eine i.d.R. komplizierte Zustandsdichte
 - Die Grundformeln aus dem 2. Kapitel sind aber nach wie vor gültig. Wir müssen nur (numerisch) die richtige Zustandsdichte einsetzen. Für analytische Näherungen nutzt man weiterhin die Ergebnisse des Freien Elektronengases mit angepaßten Konstanten vor der Wurzelfunktion.
 - In der Nähe einer Bandkante sind alle Zustandsdichten noch "Wurzelfunktionen"; das sieht man in dem Beispiel oben ganz gut.

Fragebogen / Questionnaire

Multiple Choice Fragen zu 4.2.1