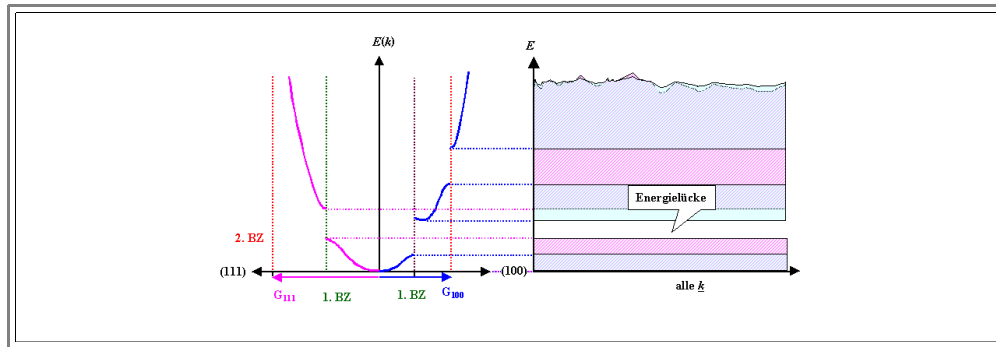


4.2.3 Zusammenfassung Kapitel 4.2

Wichtig ist, das folgende Bild in allen Details zu verstehen:



Links eine reale **Dispersionskurve**. Der wesentliche Unterschied zu den aus freiem Elektronengas + Beugung konstruierten Kurven ist:

1. Die Größe der Energielücke (weiterhin auf Rändern der Brillouinzone) ist wohldefiniert und für einen gegebenen Kristall gegeben (und tabelliert).
2. Der Verlauf der Dispersionskurve zwischen 2 Brillouinzone kann deutlich von der freien Elektronengasparabel abweichen, insbesondere müssen die Maxima und Minima **nicht** immer auf den Rändern der BZ liegen.

In jeder reziproken Gitterrichtung sieht die Dispersionskurve anders aus. Aus **allen** Dispersionkurven läßt sich das stark abstrahierende **Banddiagramm** bilden. Je nach Ausprägung der Dispersionkurven findet man eine **Energie-** oder **Bandlücke** mit einer mehr oder weniger großen Bandlückenenergie E_G ("G" steht für engl. "Gap" = Lücke).

Die Zahl der Zustände in einem Ast der Dispersionskurve (der Bereich zwischen zwei BZ) ist genau die Zahl der Elementarzellen des Gitters.

- Die Zahl der auf die Zustände zu verteilenden (mehr oder weniger freien, d.h. durch Bandstrukturen zu beschreibenden) Elektronen ist damit Zahl der EZ mal Zahl der durch die Atome der Basis eingebrachten freien Elektronen.
- Damit steht im Prinzip fest, wieviele Bänder man braucht um **alle** (freien) Elektronen unterzubringen.
- Das letzte mit Elektronen (voll- oder teilbesetzte) Band heißt **Valenzband**, das darüberliegende (leere) Band **Leitungsband**.

Die **Zustandsdichte** muß ebenfalls modifiziert werden.

- In der Bandlücke des (perfekten!) Kristalls ist die Zustandsdichte per definitionem = 0.
- Entlang eines Astes einer Dispersionskurve sind die nötigen Modifikationen zwar nicht dramatisch; in einem aus der Überlagerung vieler Äste gewonnenem **Band** kann die Zustandsdichte dann aber aber ziemlich bizarr werden.
- Reale Zustandsdichten sind deshalb für analytische Formeln nicht mehr geeignet; entweder muß man jetzt nähern oder numerisch rechnen.

Die Banddiagramme realer Kristalle erlauben einfache Definitionen von Materialklassen:

- Da in "vollen" Bändern (d.h. alle vorhandenen Zustände sind mit Elektronen besetzt) die dort "sitzenden" Elektronen ihren Zustand grundsätzlich nicht ändern können, tragen volle Bänder **nicht** zur Leitfähigkeit bei. Damit ergibt sich folgende Klassifikation:
- Metalle** (und **Halbmetalle**) sind Materialien mit Bandstrukturen die entweder keine oder nur eine kleine ($E_G \leq 0,5 \text{ eV}$) Bandlücke haben.
- Halbleiter** sind Kristalle mit voll besetztem Valenzband und einer Bandlücke im Bereich von $0,5 \text{ eV} \leq E_G \leq 2,5 \text{ eV}$.
- Isolatoren** sind Kristalle mit voll besetztem Valenzband und $E_G \geq 2,5 \text{ eV}$.