

03 Was ist die Bandstruktur?

Dazu soll das Modell des freien Elektronengases erläutert werden.

Das freie Elektronengas

Wir versuchen Aussagen über die elektronischen Eigenschaften von Festkörpern zu treffen, um beispielsweise den Unterschied zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren erklären zu können. Diese werden durch das Verhalten des Elektrons bestimmt.

Das einfachste Modell für die Beschreibung eines Elektrons, ist das Elektron, das sich nur innerhalb eines Kastens der Länge L aufhalten kann. Das heißt, dass das Potential in x , y und z Richtung jeweils zwischen 0 und L (also innerhalb des Kastens) konstant gleich dem Wert V_0 und außerhalb des Kastens unendlich groß ist.

Auf Grund der Annahme, dass sich die Atome nicht bewegen, können wir von einem statischen Potential ausgehen.

Wir müssen also die zeitunabhängige Schrödingergleichung lösen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E'\Psi(\mathbf{r})$$

Dies ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung, wir können sie noch vereinfachen, indem wir die Gleichung für eine um V_0 vermehrte Energie E ausrechnen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r}) + \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

Da sich das Teilchen nicht außerhalb des Potentialkastens aufhalten kann, müssen die festen Randbedingungen gelten. Das heißt, dass Ψ überall außerhalb des Kastens $= 0$ ist.

Zusammen mit der Normierung, die die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Kasten mit 1 angibt, ergibt sich die Lösung der Schrödingergleichung

$$\Psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$$

Diese ist abhängig vom Wellenzahlvektor k des Elektrons, hier in seinen Komponenten dargestellt. Diese Komponenten können wiederum verschiedene Quantenzustände n annehmen.

Die Lösung der Schrödingergleichung ist hier für die Werte $n=1,2$ und 3 dargestellt.

Durch Einsetzen in die Schrödingergleichung ergeben sich die Energieeigenwerte $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$. In einer Dimension betrachtet liegen diese auf einer Parabel.

Wir erhalten diskrete Energiewerte, von denen jeder auf Grund des Spins der Elektronen zweimal eingenommen werden kann. Diese diskreten Werte liegen aber wegen der großen Ausdehnung des Kristalls sehr dicht beieinander. Man spricht von einer quasikontinuierlichen Verteilung.

Die tatsächliche Besetzung der Zustände, muss der mittleren thermischen Energie des Systems entsprechen und ist damit von der Temperatur abhängig. Für $T \rightarrow 0$ K nehmen alle Elektronen den niedrigst möglichen Energiezustand an. Da wir von Fermionen sprechen, muss das Pauli Prinzip berücksichtigt werden und die Energiezustände werden „von unten nach oben“ besetzt. Der höchste bei 0 K besetzte Energiewert wird Fermi Energie E_F genannt.

Auf Grund der Periodizität des Kristalls setzt sich dieses Schema im Abstand von $\frac{2\pi}{a}$ mit weiteren Parabeln fort. Dies ist genau der Abstand der Gitterpunkte im reziproken Gitter.

Bei Vielfachen von $\frac{\pi}{a}$ schneiden sich die Parabeln. Das bedeutet, dass die Wellenzahlvektoren genau gleich sind, also die Wellen eine feste Phasenbeziehung zueinander haben. Sie überlagern sich zu einer stehenden Welle.

Wir erkennen aber auch, dass sich das Pattern immer wiederholt. Deshalb kann man das Schema wieder auf den Bereich von 0 bis $\frac{\pi}{a}$ reduzieren. Bei $\pm \frac{\pi}{a}$ befinden sich die Grenzen der sogenannten ersten Brillouin-Zone.

Die Besetzungswahrscheinlichkeit wird durch die Fermi Verteilungsfunktion beschrieben.

Hier ist die Besetzungswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Energiedifferenz zur Fermienergie für verschiedene Temperaturen dargestellt.

Bei 0 K sieht man eine strenge Grenze zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen. Je höher die Temperatur, desto stärker weicht diese Grenze auf und es werden zunehmend Zustände oberhalb der Fermienergie besetzt, einige Zustände unterhalb der Fermienergie bleiben frei.

Man sieht, dass bei "normalen" Temperaturen um 300 K der Fall für 0 K eine gute Näherung liefert.

Elektronen im periodischen Potential

Die stark vereinfachte Theorie des freien Elektrons soll nun verbessert werden. Wir treffen die Annahme, dass das Potential nicht mehr konstant ist, sondern durch die periodische Anordnung der Atomrümpfe bestimmt wird.

Die Periodizität des Potentials ist gleich dem Abstand a der Atome. An den Rändern des Festkörpers finden wir außerdem eine Potentialkante, da zum Verlassen des Kristalls die Austrittsarbeit überwunden werden muss.

Es gibt verschiedene Wellenfunktionen im Potential, abhängig vom energetischen Zustand und damit vom Wellenzahlvektor k der Elektronen.

Da wir nun ein endliches Potential betrachten, fällt die Wellenfunktion an den Rändern exponentiell im Potential ab. Die Ausdehnung des Kristalls ist jedoch sehr groß gegenüber den Abständen der Atome, deshalb werden wir zukünftig die Wellenfunktion im Potentialkasten betrachten und die Randeffekte vernachlässigen.

Bei beliebigen Wellenzahlvektoren finden wir fortlaufende Wellen, bei denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons so ist, dass das periodische Potential als ein konstantes, gemitteltes Potential angenähert werden kann. Die Energiewerte liegen, wie beim freien Elektron auf einer Parabel.

Liegt der Wellenzahlvektor jedoch bei ganzzahligen Vielfachen von $\frac{\pi}{a}$, so bilden sich stehende Wellen, bei denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen auf zwei verschiedene Arten einrasten kann. Im ersten Fall ist sie gerade an den Orten der Atomrümpfe groß. Dort ist die Energie dann tiefer als beim effektiven Potential. Die Energieverteilung weicht von der Parabelform ab.

Für den zweiten Fall ist die Wellenfunktion derart, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gerade an den Orten zwischen den Atomrümpfen groß ist. Die Energie ist höher als beim effektiven Potential. Auch hier weicht die Energieverteilung von der Parabelform ab. Auf Grund der Periodizität wiederholt sich dies wenn der Wellenzahlvektor Vielfache von $\frac{\pi}{a}$ annimmt.

Das Energieschema lässt sich wie bei dem des freien Elektrons periodisch fortsetzen, sodass diese Struktur entsteht. Wir finden also Energiebereiche, die die Elektronen annehmen dürfen und dazwischen „verbotene Bereiche“ in denen keine Energiewerte liegen, die von Elektronen angenommen werden. Die Energieverteilung kann demnach in Energiebänder und Bandlücken unterteilt werden.

Eine Unterscheidung zwischen Isolator, Halbleiter und Metall kann nun an Hand der Lage der besetzten Zustände in diesem Bänderschema erfolgen. Ein Stoff leitet den Strom, wenn durch das Anlegen einer Spannung eine Beschleunigung der Elektronen erfolgt. Das bedeutet, dass die Elektronen Energie für die Beschleunigung aufnehmen können müssen. Dies ist nur möglich, wenn es direkt über der Fermienergie, die im Metall die besetzten von unbesetzten Zuständen trennt, weitere erlaubte Energizustände gibt.

Liegt die Fermienergie innerhalb eines Bandes, handelt es sich um ein Metall.

Ist ein Band vollständig besetzt, und es folgt eine größere Bandlücke, so kann durch das Anlegen einer Spannung keine Beschleunigung der Elektronen erfolgen, da die entsprechenden Energiewerte nicht angenommen werden können.

Es handelt sich um einen Isolator.

Ist dagegen die Lücke vom besetzten bis zum nächsten freien Energiewert nur gering, so kann diese durch Zufuhr des entsprechenden Energiebetrages, wie zum Beispiel durch thermische Anregung, überbrückt werden. Wir sprechen von Halbleitern.

Die theoretischen Betrachtungen beruhen auf Annahmen und Idealisierungen. Eine genaue Berechnung wäre für einen Festkörper mit 10^{23} Atomen nicht realisierbar. Es ist daher nötig, dass im Experiment überprüft wird, in wie weit die entwickelten Theorien der Realität entsprechen.