

Über eine mögliche Art der Elektronenbindung an Kristalloberflächen.

Von Ig. Tamm in Moskau.

(Eingegangen am 13. Mai 1932.)

Ein Elektron kann unter Umständen an der Grenzfläche eines periodischen Potentialgitters (Kristall) gebunden werden, wenn seine Energie W erstens auf eine „verbotene Strecke“ des Energiespektrums des (unbegrenzt fortgesetzten) Potentialgitters fällt und zweitens kleiner als die Potentialenergie U_0 im Außenraum ist. Die Eigenfunktion ψ eines solchen Oberflächenzustandes fällt beiderseits der Grenzfläche exponentiell ab.

Die Bindung eines Elektrons an einem bestimmten Orte des Raumes wird gewöhnlich auf das Vorhandensein einer Potentialmulde an dem betreffenden Orte zurückgeführt; dabei müssen die Potentialschwellen beiderseits des Bindungsortes die Gesamtenergie des zu bindenden Elektrons übertreffen. (Wir beschränken uns hier der Einfachheit halber auf den eindimensionalen Fall.) Die Bindung eines Elektrons kann aber auch in einer anderen Weise zustande kommen. Statt beiderseits des Bindungsortes Potentialwände zu haben, kann z. B. die rechte Potentialwand durch ein periodisches Potentialfeld ersetzt werden. Ist der Maximalbetrag dieses Feldes $U(x)$ kleiner als die Gesamtenergie W des zu bindenden Elektrons, so wird es dennoch bei bestimmten Werten von W vorkommen, daß die entsprechende Elektronenwelle an dem Potentialgitter total reflektiert sein wird. Somit wird das Elektron zwischen der Potentialwand links und dem Potentialgitter rechts eingesperrt — die ψ -Funktion wird an der Trennungsoberfläche ein Maximum haben und von da ab beiderseits exponentiell abfallen.

Mathematisch läßt sich der Sachverhalt wie folgt beschreiben. In einem Potentialgitter der Periode d besitzt die Schrödingersche Wellengleichung nach den allgemeinen Sätzen der Theorie der Differentialgleichungen mit periodischen Koeffizienten zwei unabhängige Lösungen von der Form

$$\psi = e^{i\alpha_1 x} u_1(x) + e^{i\alpha_2 x} u_2(x),$$

wo $u_1(x)$ und $u_2(x)$ periodische Funktionen der Periode d und die Konstanten α_1 und α_2 bestimmte Funktionen der Elektronenenergie W sind.

In einem *unbegrenzten* Gitter führen die Schrödingerschen „natürlichen Bedingungen“ zu der Forderung, daß die Exponenten α_1 und α_2 reell ausfallen. Dementsprechend besteht das Energiespektrum aus kontinuierlichen Strecken oder „Zonen“ $W_h \leq W \leq W'_h$ (h -te Zone), innerhalb

deren diese Forderung erfüllt ist, und die durch „verbotene Strecken“ $W'_{h-1} < W < W_h$ (α_1 und α_2 imaginär oder komplex) getrennt sind.

Betrachtet man aber ein *begrenztes* Gitter, das sich z. B. von $x = 0$ in der Richtung der positiven x -Achse erstreckt, so werden auch die auf den „verbotenen“ Strecken liegenden Energiewerte W erlaubt, sofern man diejenige von den entsprechenden Wellenfunktionen ψ auswählt, deren Exponent $i\alpha x$ einen *negativen* Reellteil hat und die somit von $x = 0$ exponentiell nach rechts abfallen. Im Falle eines begrenzten Gitters müssen aber noch die Stetigkeitsbedingungen für ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ in dem Grenzpunkt $x = 0$ berücksichtigt werden.

Im Falle des einfachen Gittermodells von Kronig und Penney¹⁾ können alle Rechnungen sehr einfach durchgeführt werden. Übertrifft die potentielle Energie im Außenraum die Elektronenenergie W , so zeigt sich, daß es im allgemeinen auf jeder „verbotenen“ Strecke $W'_{h-1} < W < W_h$ einen Eigenwert W_h^* gibt, bei welchem die Grenzbedingungen erfüllt werden können. Diese Elektronenzustände können im Gegensatz zu den übrigen als Oberflächenzustände bezeichnet werden, denn die entsprechenden normierten Eigenfunktionen ψ besitzen nur dicht an der Oberfläche einen von Null merklich verschiedenen Wert.

Die mögliche Bedeutung dieser Elektronenzustände für die Frage nach der Natur der Potentialschwelle an einer Kristalloberfläche sowie für das Verständnis des in dielektrischen Kristallen auftretenden Gegensatzes zwischen der „freien“ Beweglichkeit der Photoelektronen im Kristallinnern und der Bindung der von außen in den Kristall eintretenden Elektronen an seiner Oberfläche wird in einer ausführlichen Mitteilung besprochen werden, die demnächst in der „Physikalischen Zeitschrift der Sowjetunion“ erscheinen wird.

Moskau, Physik. Forschungsinstitut der Universität.

¹⁾ R. de L. Kronig u. W. Penney, Proc. Roy. Soc. London (A) **130**, 499, 1931.