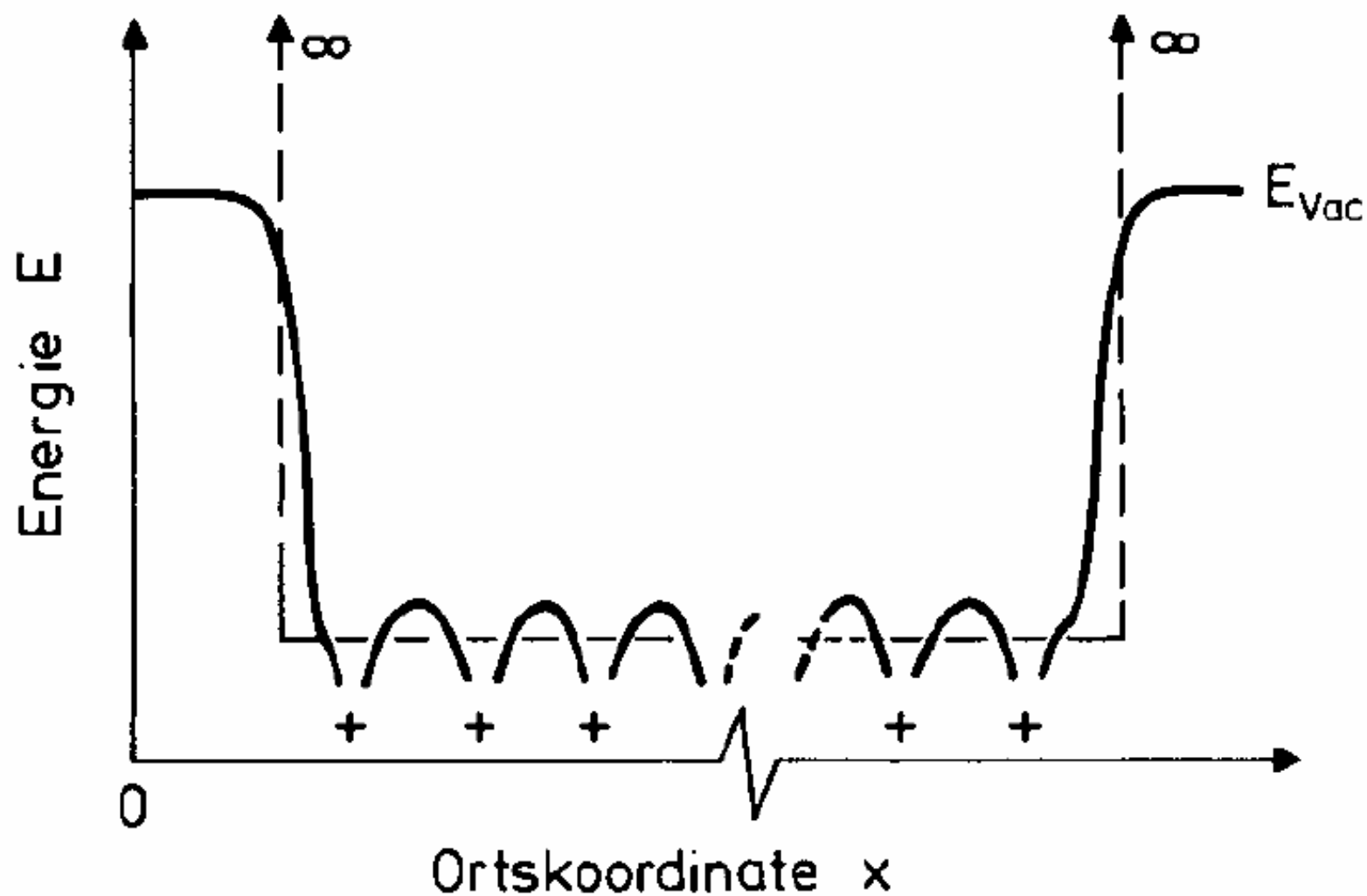


# Elektronische Eigenschaften von Festkörpern II

Das „fast“ freie Elektronengas  
Blochwellen

Elektronische Zustände von Rumpfelektronen  
Elektronische Bandstruktur

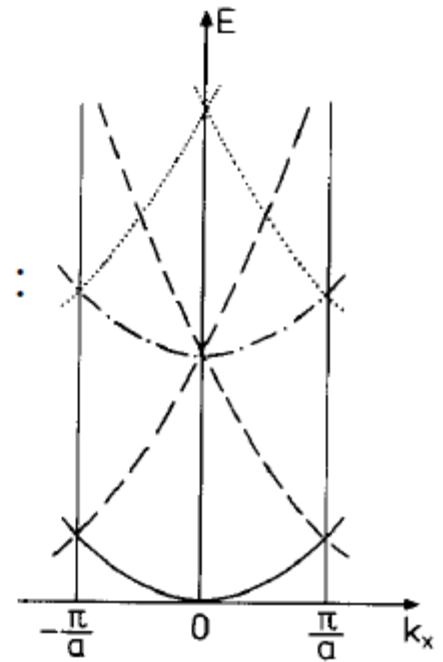
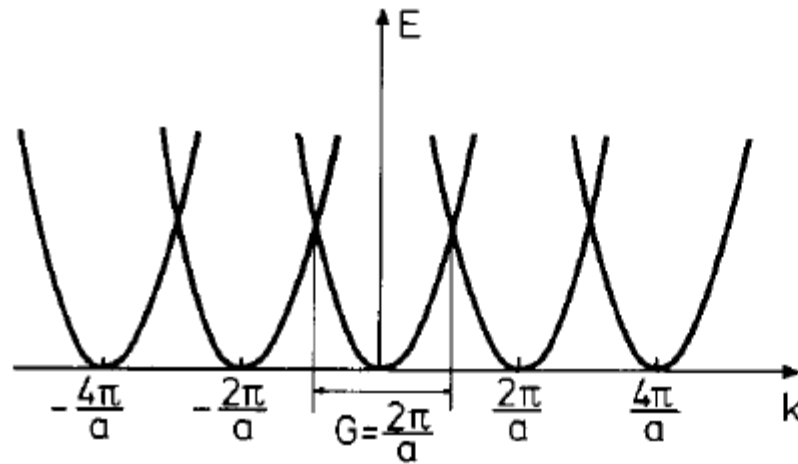
# Periodisches Hintergrundpotential im Kristall



„Leeres“ Gitter :

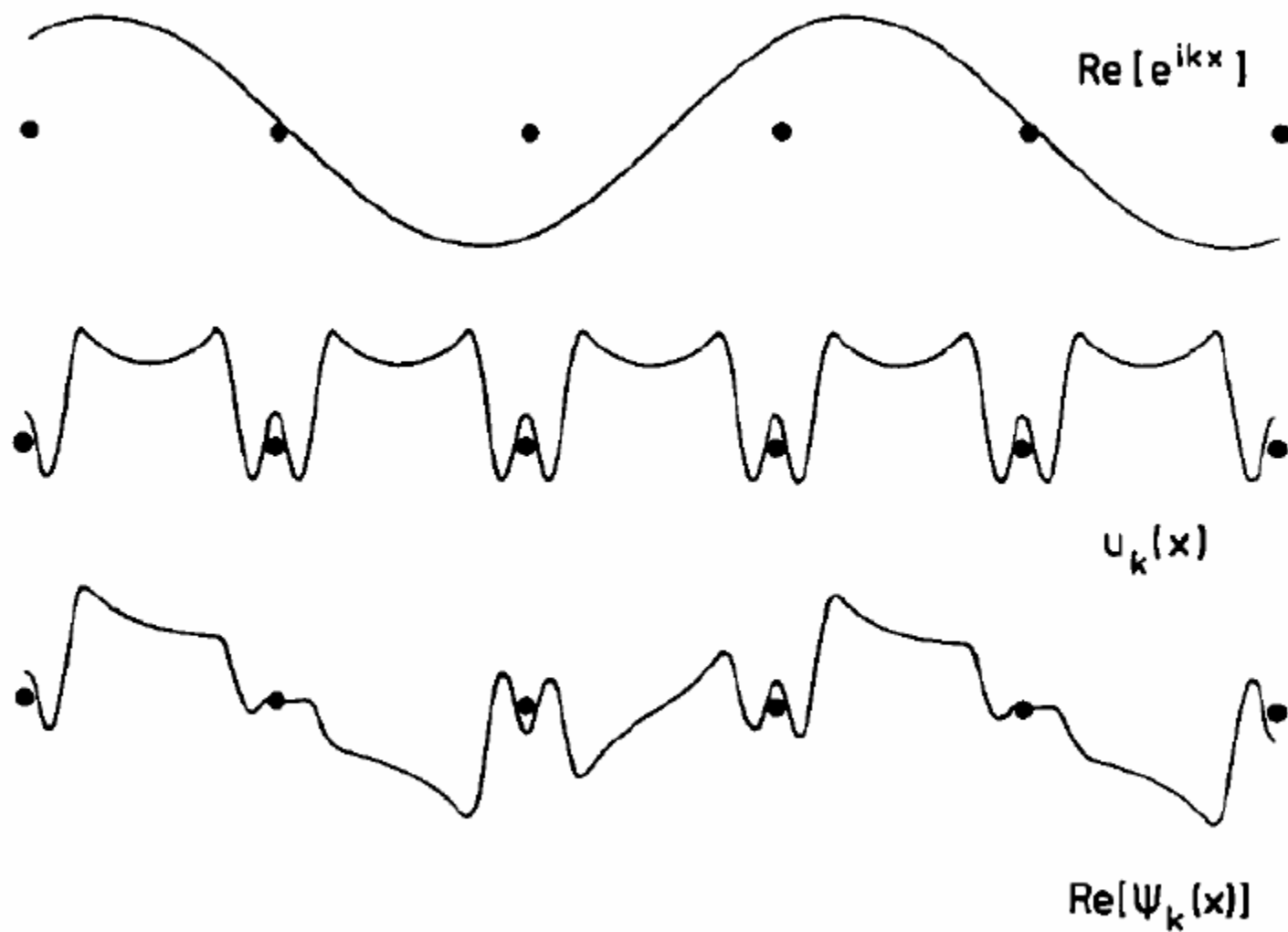
Reduziertes  
Zonenschema :

Erweitertes Zonenschema :



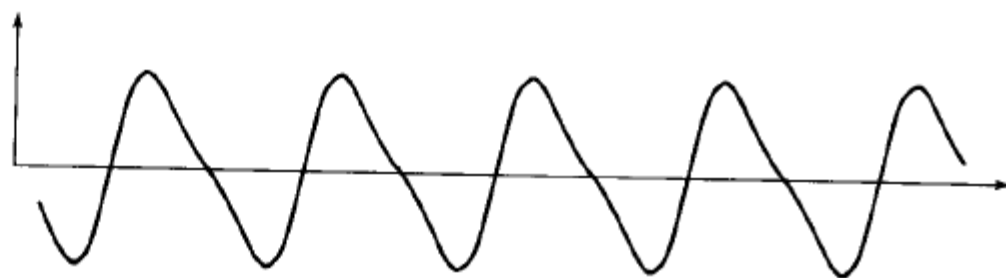
**Abb. 7.3.** Bänderschema für das freie Elektronengas in einem kubisch primitiven Gitter (Gitterkonstante  $a$ ), dargestellt als Schnitt längs  $k_x$  innerhalb der ersten Brillouin-Zone. Das periodische Potential ist als verschwindend angenommen („leeres“ Gitter). Die verschieden dargestellten Äste rühren von Parabeln her, deren Ursprung im reziproken Raum mittels der Miller-Indizes  $h k l$  angegeben ist. (—)  $000$ , (---)  $100, \bar{1}00$ , (-·-)  $010, 0\bar{1}0, 001, 00\bar{1}$ , (····)  $110, 101, 1\bar{1}0, 10\bar{1}, \bar{1}10, \bar{1}01, \bar{1}\bar{1}0, \bar{1}0\bar{1}$

# Bloch-Wellen

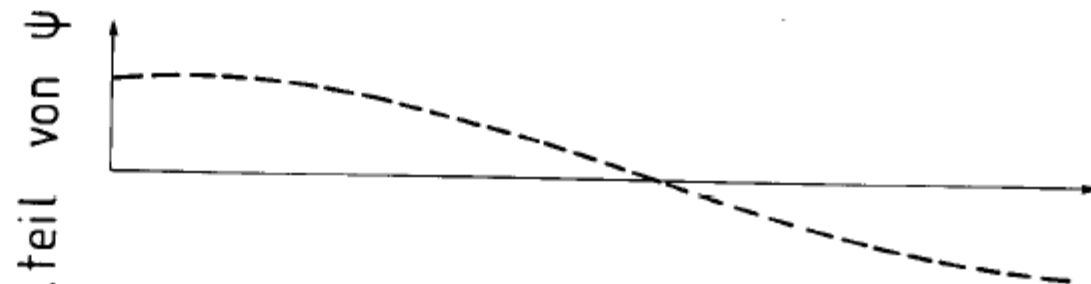


## Blochwellen :

p-artige gitterperiodische Funktion  $u_k(x)$

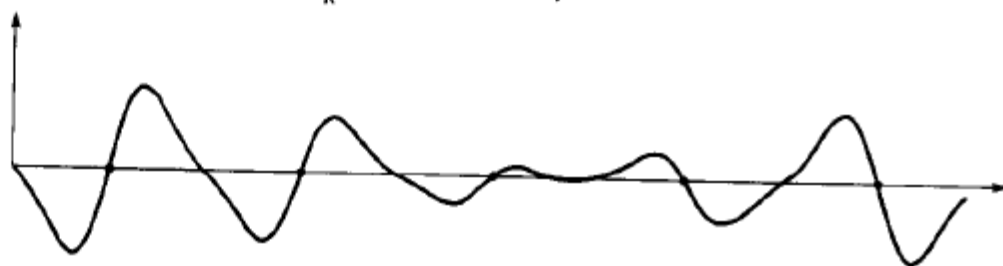


Wellenfunktion  $\cos(kx + \delta)$



Realteil von  $\psi$

Blochwelle  $u_k(x) \cos(kx + \delta)$



Ortskoordinate  $x$

## „Quasifreies“ Elektronengas :

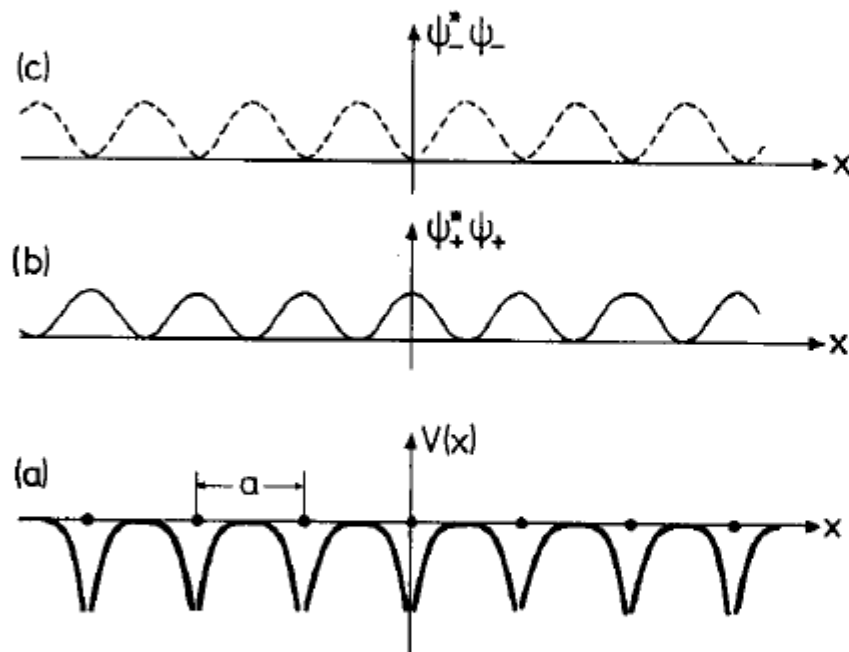


Abb. 7.4

Stehende Wellen am Rand der BZ  
(Bragg-Reflexion)

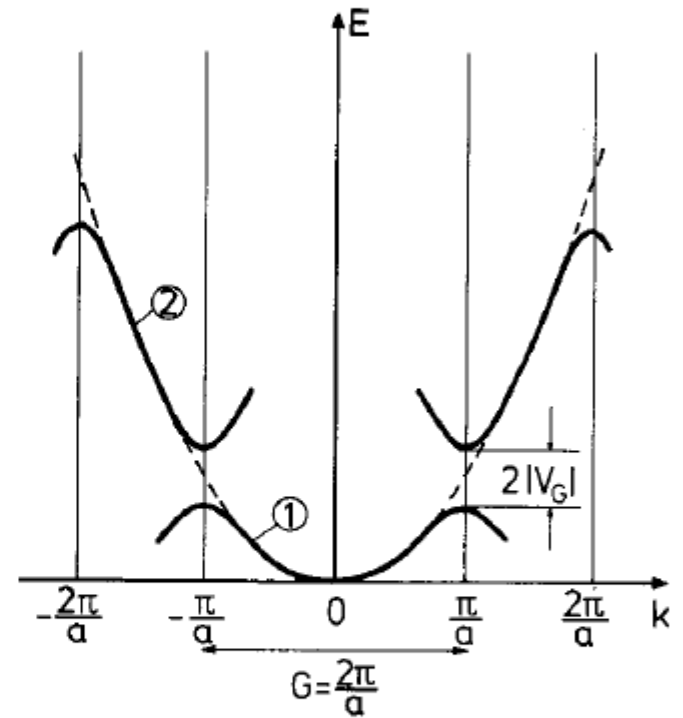
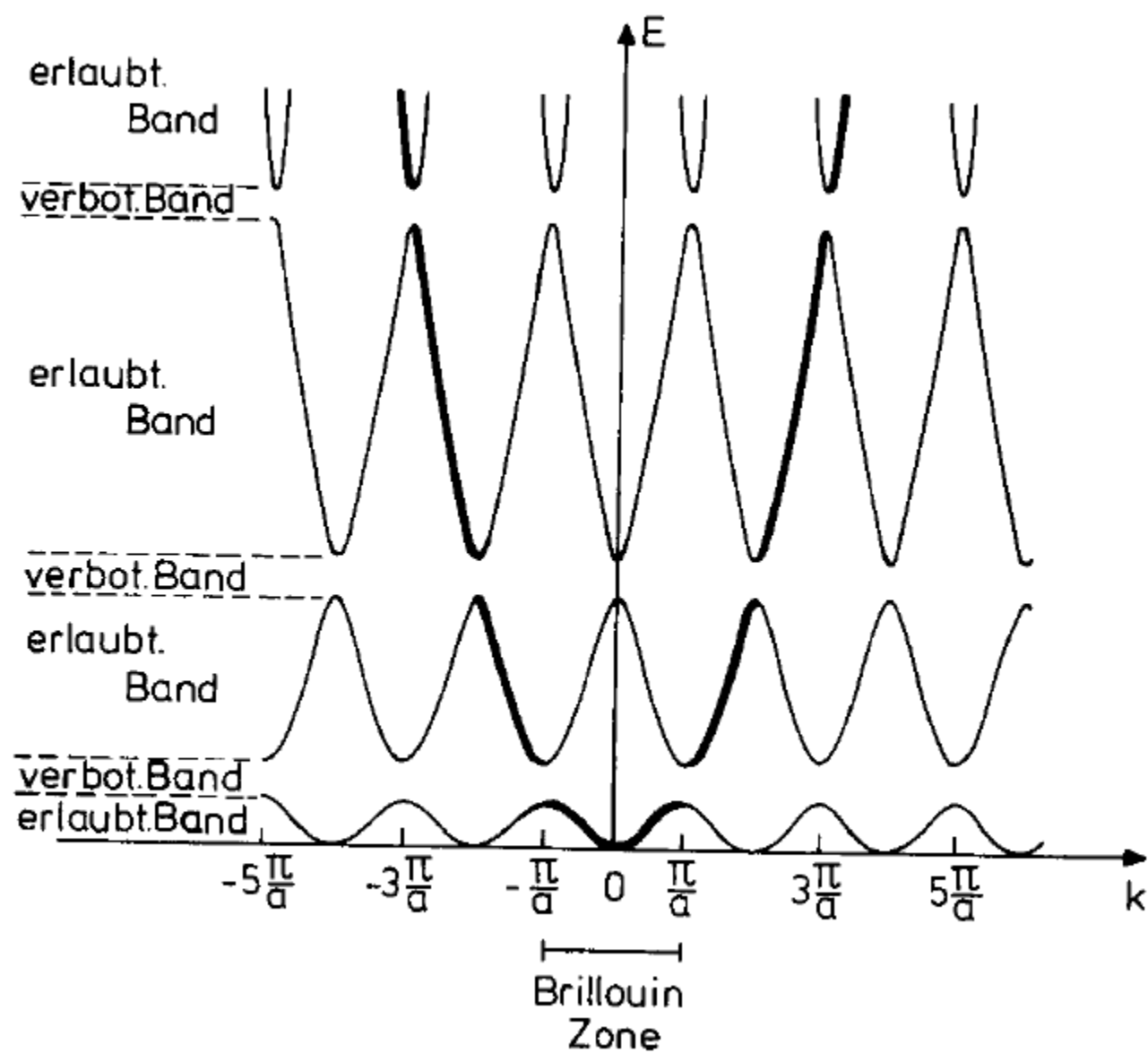


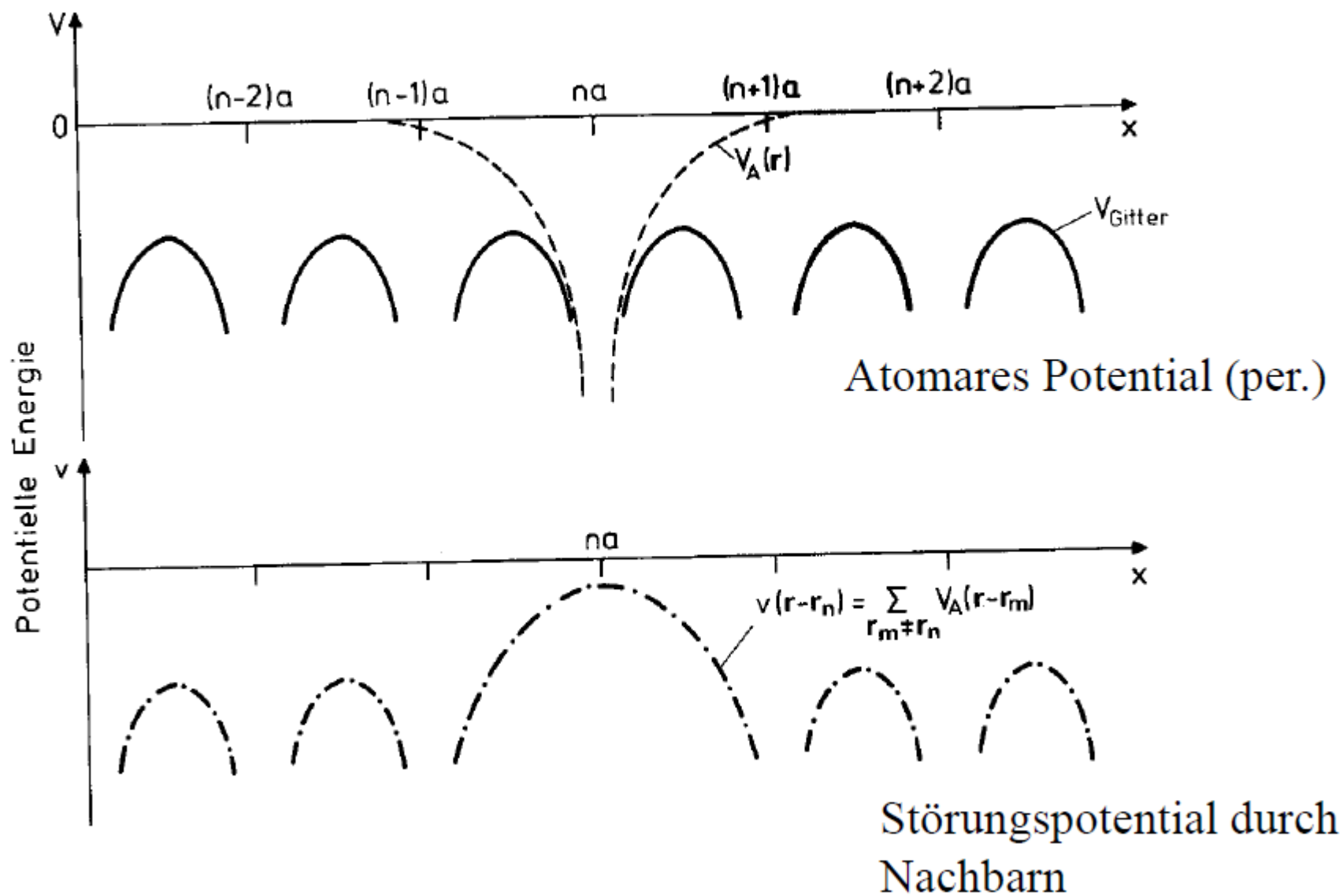
Abb. 7.5

Aufspaltung von  $E$  am  
Rand der BZ

## Ausbildung „erlaubter“ und „verbotener“ Bänder (1D)

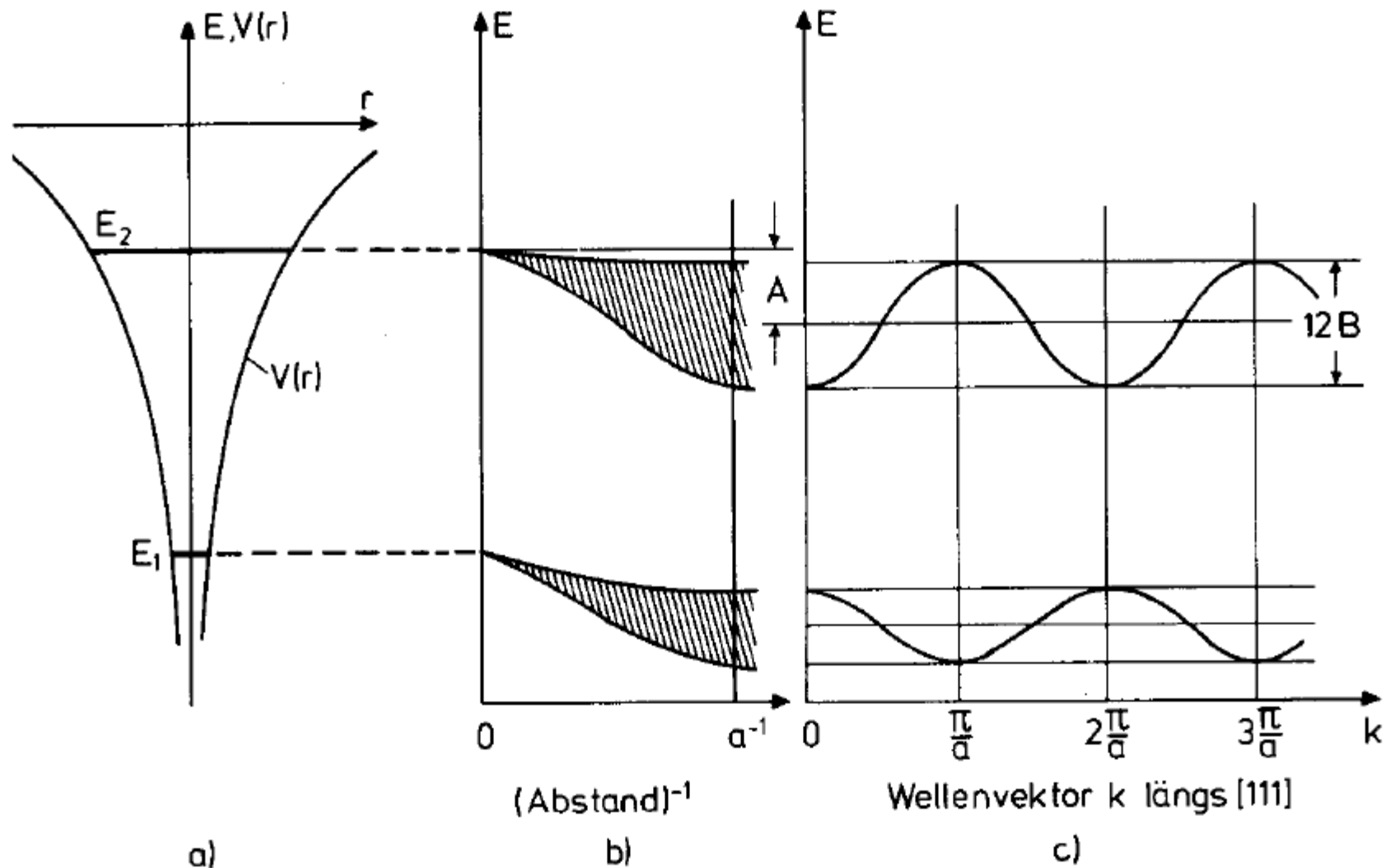


# Störungspotential für stark gebundene Rumpfelektronen





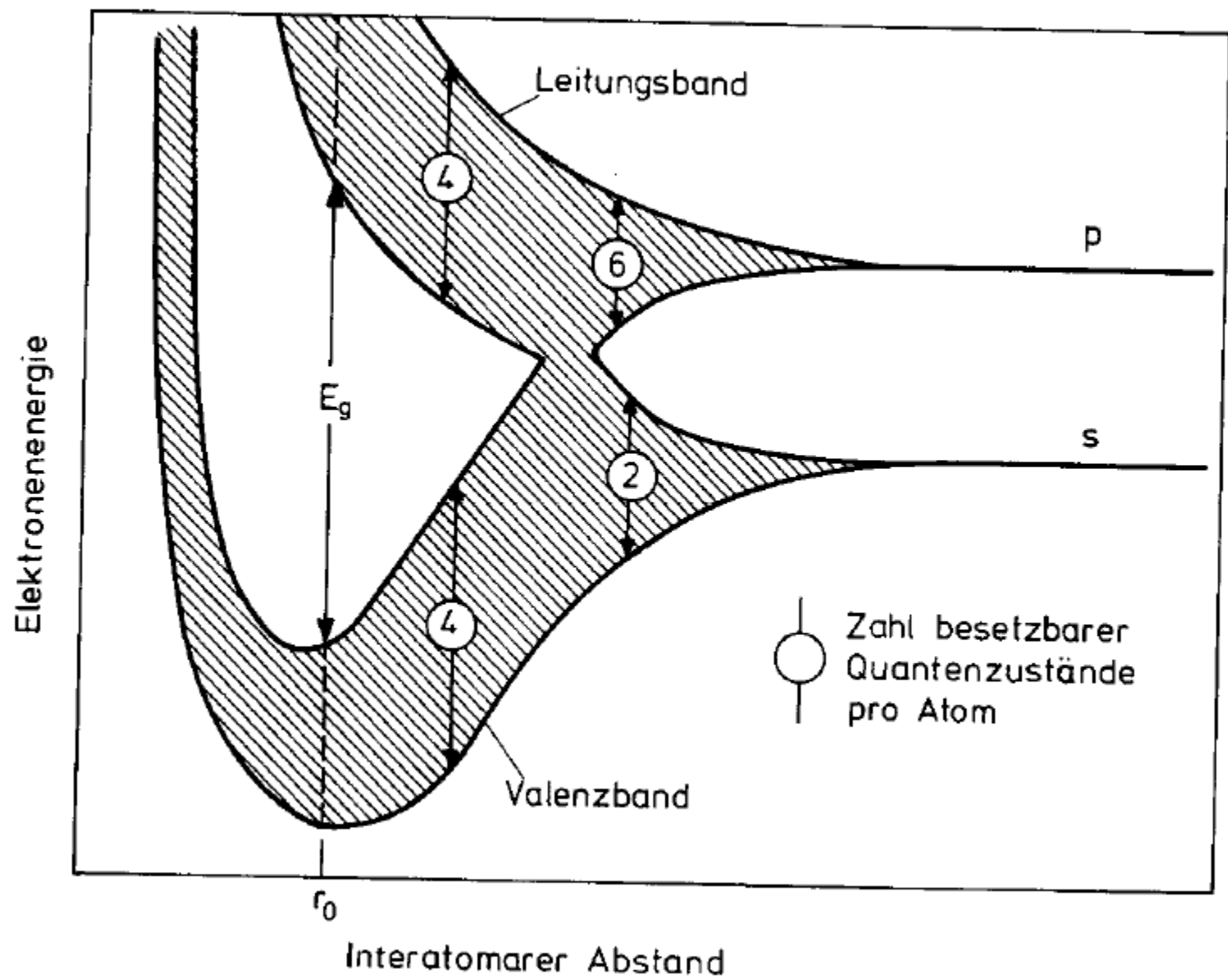
# Stark gebundene Elektronen : Energieabsenkung und Verbreiterung



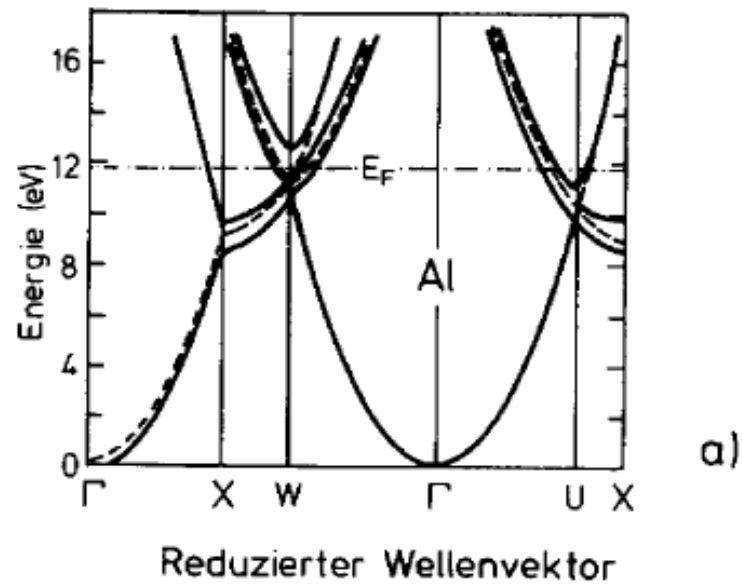
atomar

Festkörper Rumpfelektron

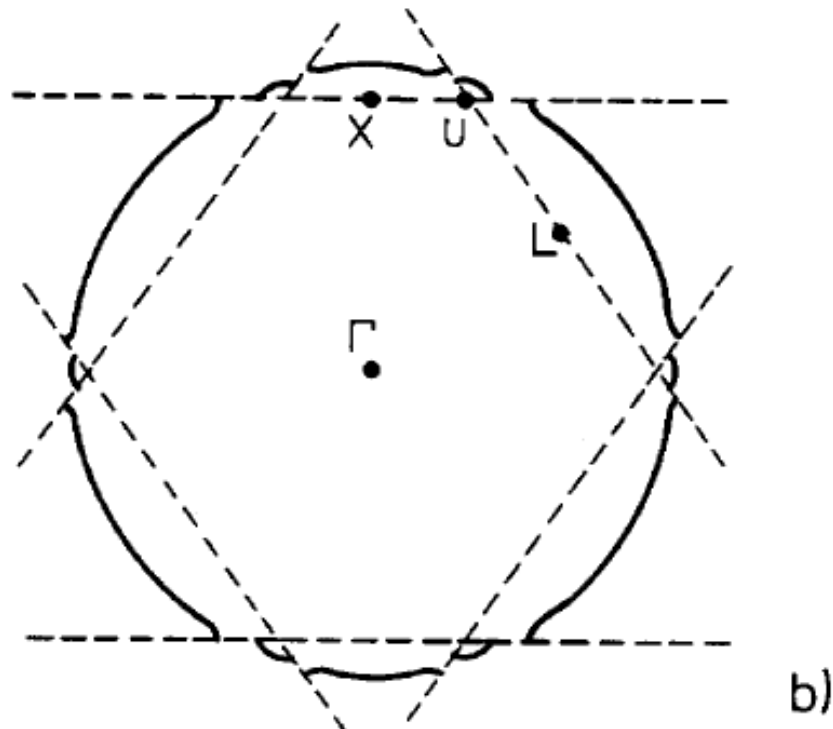
## sp<sup>3</sup> Hybridisierung



## Bandstruktur Aluminium :



## Fermiflächen Al :



# Bandstruktur freier Elektronen im fcc-Gitter

144

