



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 21**

Vorlesungsstunde: 26.01.2021

- **Modell stark-gebundener Elektronen (tight binding):** gebundene Elektronen + Hüpfen zu NN

$$\mathcal{H}\Psi_{\mathbf{k}}^i(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}}^i(\mathbf{r}) = E^i(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}^i(\mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{r}) = V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0) + \tilde{V}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$$

Lösungsansatz:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \underbrace{\phi_A^i(\mathbf{r} - \mathbf{R})}_{\text{Linearkombination von atomaren Orbitalen}}$$

$V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$ = atomares, $\tilde{V}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$ = zusätzliches Coulomb-Potenzial aller anderen Atome

Linearkombination von **atomaren Orbitalen**

- **Eigenenergien:**

$$E(\mathbf{k}) = E_A^i \cdot \alpha^i \cdot \beta^i \sum_{NN} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}')} \leftarrow k\text{-abhängig} \rightarrow \text{Dispersion}$$

Energie-Eigenwert des gebundenen Atomelektrons im i -ten Niveau

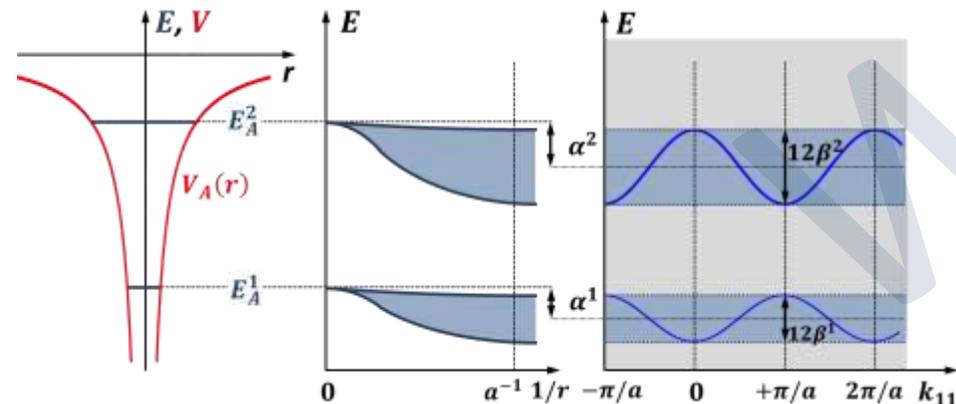
Coulomb-Integral $\alpha^i = - \int dV (\phi_A^i)^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0) \tilde{V}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0) \phi_A^i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$

zusätzliche Coulomb-Energie durch Coulomb-Potenzial \tilde{V} aller anderen Atome

Transfer-Integral $\beta^i = - \int dV (\phi_A^i)^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \tilde{V}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0) \phi_A^i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$

Änderung der Coulomb-Energie durch Hüpfen zu NN-Plätzen

- **Änderung der Energieniveaus bei Änderung des Atomabstands:**



Bildung von Bändern mit N dicht liegenden Niveaus durch WW von N atomaren Niveaus

Zusammenfassung: Teil 20, 21.01.2021/2

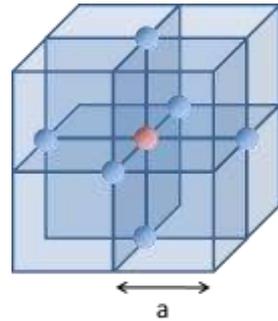
- **Tight Binding Modell:**

$$E(\mathbf{k}) = E_A^i - \alpha^i - \beta^i \sum_{NN} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')}$$

- **Beispiel: kubische Gitter**

3D, sc:

$$E(\mathbf{k}) = E_A - \alpha - 2\beta [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

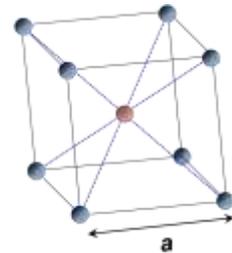


6NN, Bandbreite: 12 β

$$\mathbf{R}_{1,2} = (\pm a, 0, 0), \quad \mathbf{R}_{3,4} = (0, \pm a, 0), \\ \mathbf{R}_{5,6} = (0, 0, \pm a)$$

3D, bcc:

$$E(\mathbf{k}) = E_A - \alpha - 8\beta [\cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2)]$$

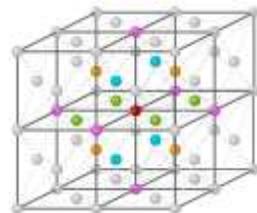


8NN, Bandbreite: 16 β

$$\mathbf{R}_{1,2} = \left(\pm \frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right), \quad \mathbf{R}_{3,4} = \left(\pm \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right), \\ \mathbf{R}_{5,6} = \left(\pm \frac{a}{2}, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \right), \quad \mathbf{R}_{7,8} = \left(\pm \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \right)$$

3D, fcc:

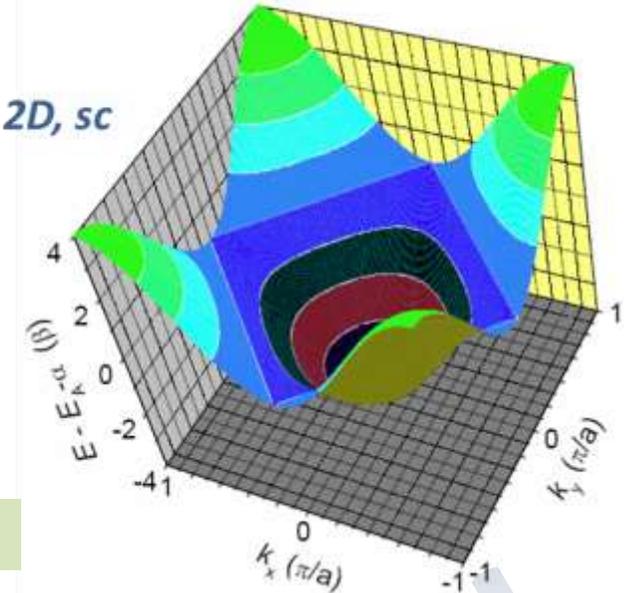
$$E(\mathbf{k}) = E_A - \alpha - 4\beta [\cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) + \cos(k_z a/2) \cos(k_x a/2) + \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2)]$$



12NN, Bandbreite: 24 β

$$\mathbf{R}_{1,2,3,4} = \left(\pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2}, 0 \right), \quad \mathbf{R}_{5,6,7,8} = \left(\pm \frac{a}{2}, 0, \pm \frac{a}{2} \right), \quad \mathbf{R}_{9,10,11,12} = \left(0, \pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2} \right)$$

2D, sc



8.4 Metalle, Halbmetalle, Halbleiter, Isolatoren

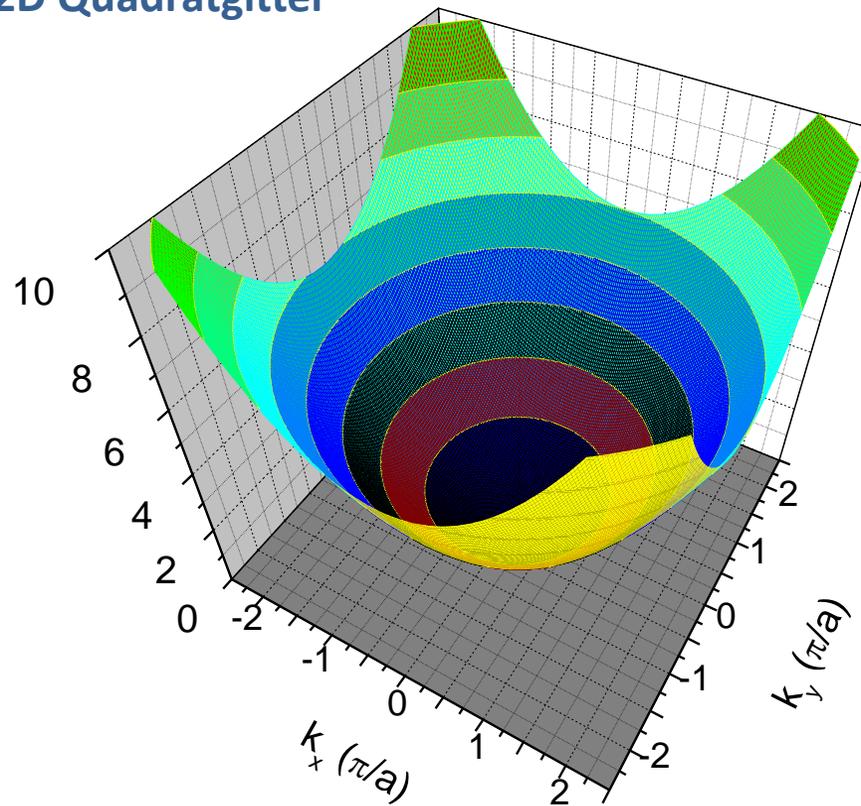
- bisher diskutiert:
 - ➔ Bestimmung der Eigenenergien $E_n(\mathbf{k})$ der Kristallelektronen in der Ein-Elektron-Näherung
- wie bei freien Elektronen:
 - ➔ Auffüllen der Energiezustände unter Berücksichtigung von Pauli-Prinzip
 - ➔ bei $T = 0$ höchste erreichte Energie ist die Fermi-Energie E_F
- wir unterscheiden zwei grundlegend verschiedene Fälle:
 - i. ein oder mehrere Energiebänder sind vollkommen gefüllt, die weiteren sind alle leer
 - ➔ Fermi-Energie liegt zwischen oberstem gefüllten und unterstem leeren Band
 - ➔ keine Umbesetzung von Zuständen in vollem Band möglich (z.B. durch angelegte E -Feld),
Summe über alle Elektronengeschwindigkeiten = null

elektrischer Isolator, Halbleiter
 - ii. ein Energieband ist nur teilweise gefüllt
 - ➔ Fermi-Energie liegt in oberstem, nur teilweise gefülltem Band
 - ➔ Umbesetzung von Zuständen innerhalb von Band leicht möglich,
Summe über alle Elektronengeschwindigkeiten \neq null

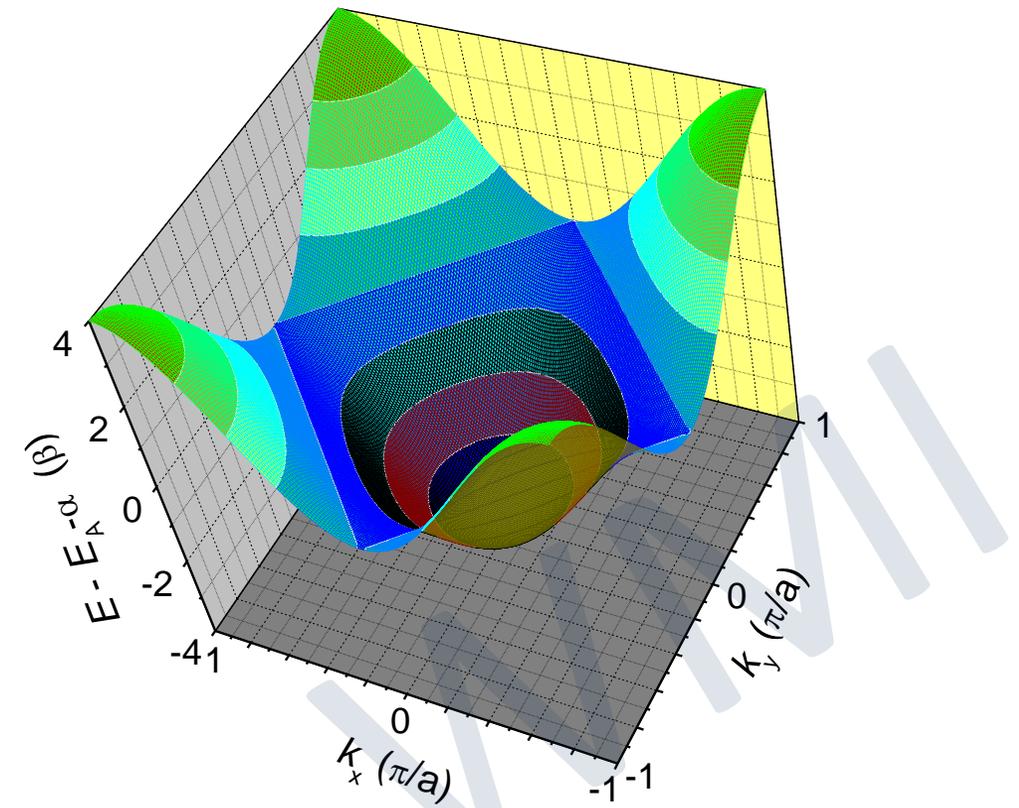
elektrischer Leiter, Metall, Halbmetall

8.4 Metalle, Halbmetalle, Halbleiter, Isolatoren

- Fermi-Fläche:
 - ➔ die Fläche konstanter Energie, $E(\mathbf{k}) = E_F$, trennt bei $T = 0$ besetzten und unbesetzten Zuständen
 - ➔ Fermi-Fläche ist für Kristallelektronen keine Kugel (3D) oder Kreis (2D) mehr wie bei freien Elektronen
- Beispiel: 2D Quadratgitter



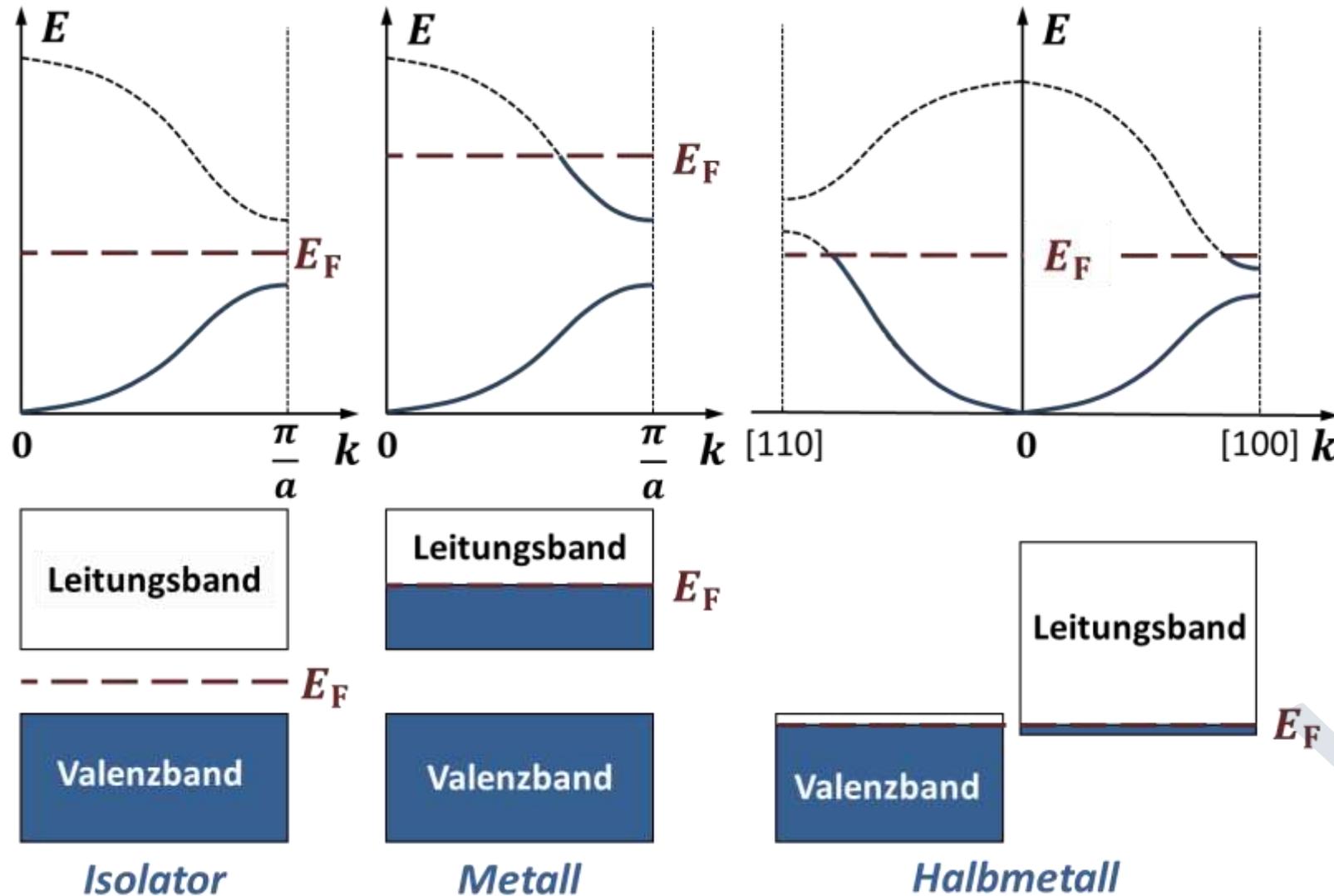
freie Elektronen (2D):
Fermi-Fläche ist immer Kreis



Kristallelektronen (2D):
Fermi-Fläche kann stark von Kreis abweichen

8.4 Metalle, Halbmetalle, Halbleiter, Isolatoren

- Lage des Fermi-Niveaus bei Metallen, Halbmetallen und Isolatoren/Halbleitern



Anmerkung:

bei Halbleitern liegt wie bei Isolatoren das Fermi-Niveau in einer Bandlücke

→ kein prinzipieller Unterschied

→ Halbleiter = Isolatoren, die dotiert werden können

Leitungsband:

unterstes, nur teilweise gefülltes Band

Valenzband:

oberstes, vollkommen gefülltes Band

8.4.1 Anzahl der Zustände pro Band

- Frage: wann ist ein Festkörper ein Metall, wann ein Isolator?
 → Antwort hängt mit der Zahl der in einem Band verfügbaren Zustände zusammen
- Frage: wie viele Zustände gibt es in einem Band?

i. fast freie Elektronen:

- Zahl der Einheitszellen in Festkörper: $N = V/V_{\text{Zelle}}$
- Volumen von einem Zustand in k -Raum: $(2\pi)^3/V$
- Volumen der Brillouin-Zone in k -Raum: $(2\pi)^3/V_{\text{Zelle}}$
- k -Zustände in Brillouin-Zone pro Band: $V/V_{\text{Zelle}} = N$

→ mit Spin-Freiheitsgrad gibt es **$2N$ -Zustände pro Band**

ii. stark gebundene Elektronen:

- die N Energieniveaus der N Atome des Festkörpers spalten durch Wechselwirkung auf
- Wechselwirkung führt zu Bändern mit N -Zuständen
- ohne Entartung und mit zusätzlichen Spin-Freiheitsgrad:

→ es gibt **$2N$ -Zustände pro Band**

8.4.1 Anzahl der Zustände pro Band

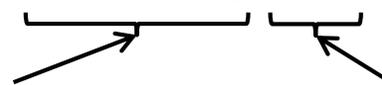
- Folgerung:

→ ob ein Festkörper ein Metall oder Isolator ist, wird durch Zahl der Elektronen pro Einheitszelle bestimmt

- i. Kristalle mit einer ungeraden Zahl von Elektronen pro Einheitszelle
 - besitzen ein nur teilweise gefülltes oberstes Energieband
 - **Metalle**
- ii. Kristalle mit einer geraden Zahl von Elektronen pro Einheitszelle
 - besitzen ein völlig volles oberstes Energieband
 - **Isolatoren, Halbleiter, Halbmetalle**

- Beispiel Natrium:

Elektronenkonfiguration: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$



 volle Bänder halb gefülltes Band

→ Metall

ähnlich: Cu ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^1$), Ag ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^1$),
 Au ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^{14}, 5d^{10}, 6s^1$),

8.4.1 Anzahl der Zustände pro Band

- Beispiel Kohlenstoff (etwas komplizierterer Fall):

Elektronenkonfiguration: $1s^2, 2s^2, 2p^2$ → aufgrund der Elektronenkonfiguration eines einzelnen Atoms wird Metall erwartet, da in $2p$ -Band insgesamt 6 Elektronen passen

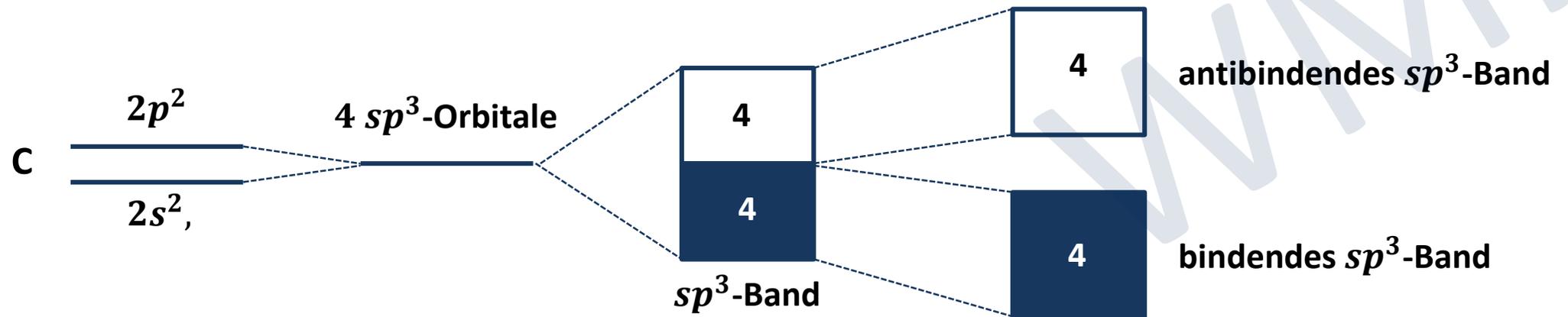
in Festkörper erfolgt sp^3 -Hybridisierung der $2s$ - und $2p$ -Zustände (Basis der starken kovalenten Bindung)

→ $2s^2$ - und $2p^2$ -Zustände bilden vier sp^3 -Hybridorbitale

(können mit Spin-Freiheitsgrad 8 Elektronen aufnehmen)

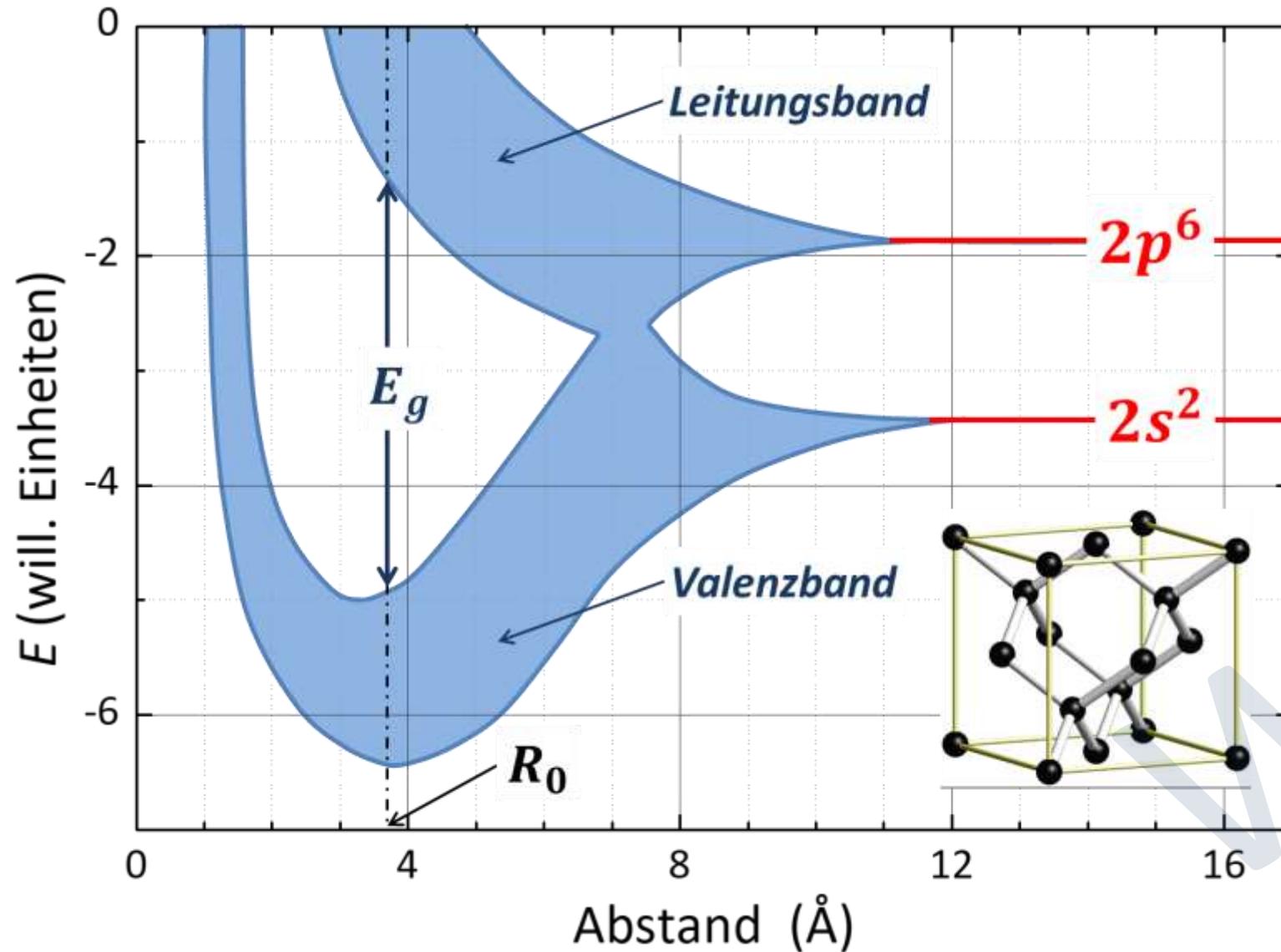
→ in Festkörper führt die Wechselwirkung zwischen den Atomen zu einem bindenden und anti-bindenden sp^3 -Hybridorbital

- das bindende sp^3 -Hybridorbital ist mit 4 Elektronen vollkommen gefüllt
- das antibindende sp^3 -Hybridorbital ist vollkommen leer



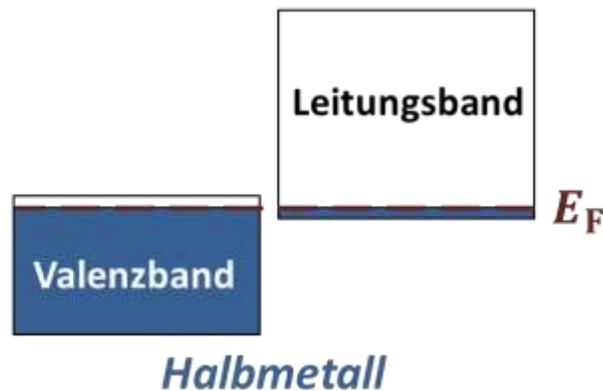
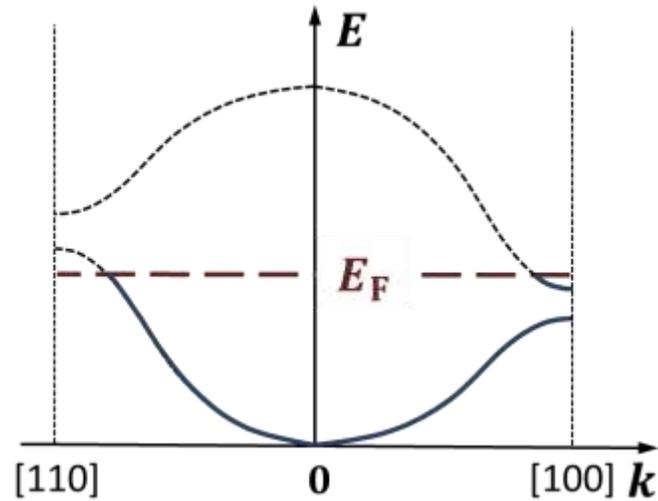
8.4.1 Anzahl der Zustände pro Band

- Verlauf der Energiebänder in Diamant als Funktion von Atomabstand



8.4.2 Halbmetalle

- Halbmetalle: es liegt eine geringfügige Überlappung des Valenzbandes und des Leitungsbandes vor



- ➔ auch bei gerader Elektronenzahl ist VB nicht vollkommen gefüllt und LB nicht vollkommen leer
- ➔ VB enthält kleine Dichte n_h von fehlenden Elektronen ("Löchern"), LB enthält kleine Dichte n_e von Elektronen

Halbmetalle sind häufig Elemente der 5. Hauptgruppe

- Gitterzelle enthält 2 Atome mit je 5 Valenzelektronen (10 Elektronen pro Einheitszelle)
 - ➔ Isolator oder Halbleiter
 - ➔ wegen Bandüberlappung meist Halbmetall

| Halbmetall | n_h (cm ⁻³) | n_e (cm ⁻³) |
|------------|---------------------------|---------------------------|
| Arsen | 2.12×10^{20} | 2.12×10^{20} |
| Antimon | 5.54×10^{19} | 5.49×10^{19} |
| Bismut | 2.88×10^{17} | 3.00×10^{17} |
| Graphit | 2.72×10^{18} | 2.04×10^{18} |

- Typen von Isolatoren – es gibt viele !!

- i. **Bandisolatoren:**

- vollkommen gefülltes Valenzband und vollkommen leeres Leitungsband

Weitere Typen von Isolatoren mit anderer Ursache für isolierenden Zustand

- ii. **Anderson-Isolatoren:**

- Unordnung führt zu Rückstreuung von Elektronenwellen

- Lokalisierung der Elektronen in Metallen durch Unordnung

- iii. **Mott-Isolatoren:**

- Lokalisierung von Elektronen aufgrund von starken Korrelationseffekten

- Coulomb-Abstoßung unterbindet Hüpfen von Elektron zum Nachbaratom, wenn dieser Platz bereits durch anderes Elektron besetzt ist

- iv. **Peierls-Isolatoren:**

- Instabilität gegenüber der Ausbildung von Ladungsdichtewellen, besonders in niedriddimensionalen Systemen

- v. **Topologische Isolatoren:**

- im Innern isolierend, besitzen aber Oberflächenzustände, die zu Leitfähigkeit führen

8.5 Zustandsdichte und Bandstrukturen

- Elektronische Zustandsdichte

- völlig analoge Diskussion wie bei der Herleitung der Zustandsdichte von Phononen oder freien Elektronen
- Erhaltung der Zahl von Zuständen:

$$2 \int_{k(E)}^{k(E+\Delta E)} Z(k) d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k(E)}^{k(E+\Delta E)} d^3k = \int_{E(k)}^{E(k)+\Delta E} D(E) dE \approx D(E) \Delta E$$

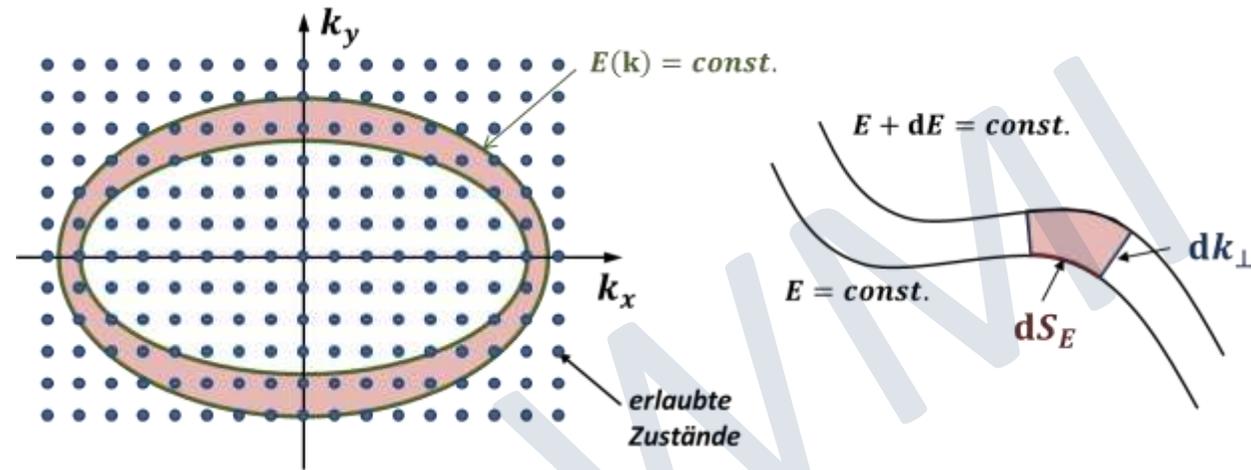
(Spin)

$D(E)$: Zustandsdichte für beide Spin-Richtungen

wir benutzen

$$d^3k = dS_E dk_{\perp} = \frac{dS_E}{dE/dk_{\perp}} dE \approx \frac{dS_E}{dE/dk_{\perp}} \Delta E$$

$$\Rightarrow D(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=const} \frac{dS_E}{|dE/dk_{\perp}|}$$



- Zur Erinnerung:

für freies Elektronengas sind die Flächen konstanter Energie Kugeloberflächen ($E(k) \propto k^2$) $\Rightarrow D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}$

8.5 Zustandsdichte und Bandstrukturen

- **Qualitative Diskussion der Zustandsdichte von Kristallelektronen**

- die Flächen konstanter Energie können komplizierte Form haben (keine Kugeloberflächen mehr wie bei freien Elektronen)
- es können k -Raumpunkte auftreten, an denen $|dE/dk_{\perp}| = 0$

→ **kritische Punkte**

→ resultieren in **van Hove Singularitäten**

1D-Systeme: *Wurzel-Singularität*

2D-Systeme: *logarithmische Singularität*

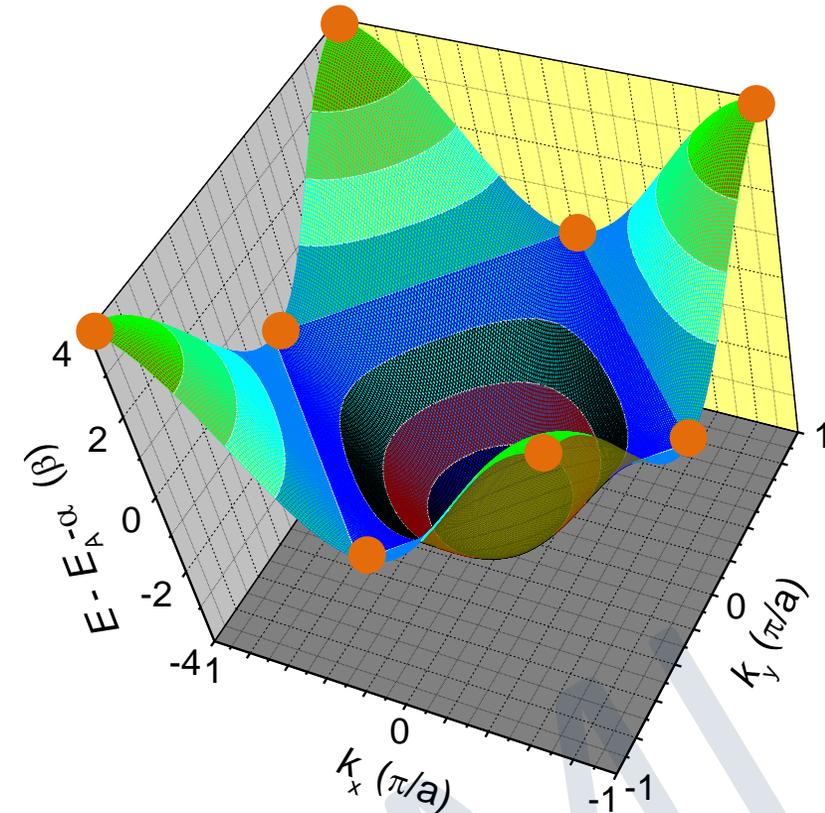
3D-Systeme: für 3D Systeme wird $D(E)$ nicht singulär, aber $D(E)$ besitzt Knick

Hinweis:

für 3D Systeme wird $D(E)$ in der Nähe der kritischen Punkte nicht singulär, da eine Entwicklung von $E(k)$ um diese kritischen Punkte immer $E(k) \propto k^2$ liefert

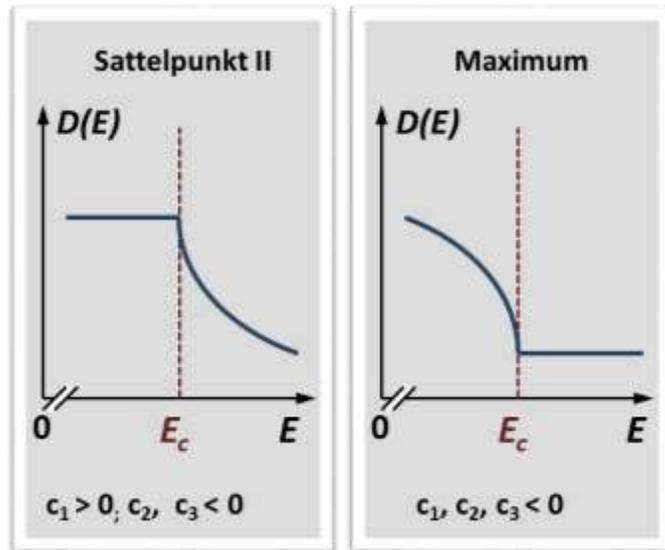
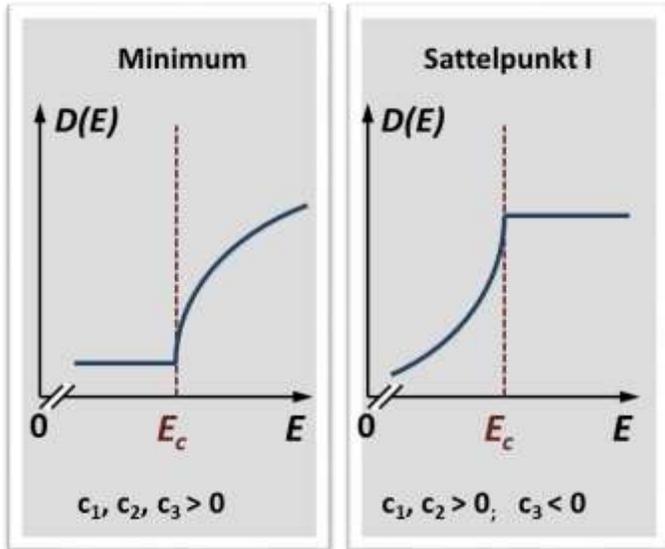
→ $|dE/dk_{\perp}|^{-1}$ besitzt eine $1/k$ Singularität

→ das Integral über die Fläche $E(k) = const.$ besitzt eine lineare k -Abhängigkeit

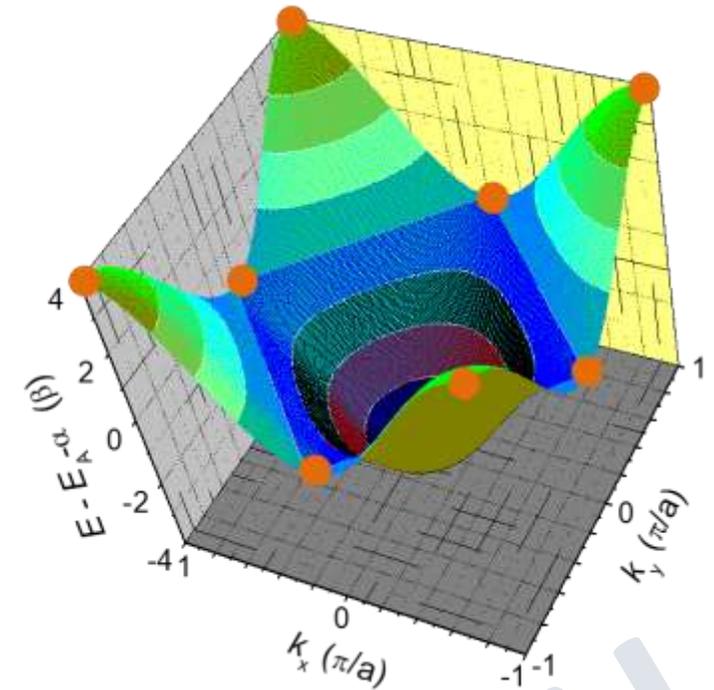


8.5.1 Zustandsdichte

- Form der Dispersion in der Nähe von **kritischen Punkten**:



$$E(\mathbf{k}) = E_c + \sum_{i=1}^3 c_i (k - k_{c,i})^2$$



Form von $D(E)$ in Nähe eines **kritischen Punktes**

$D(E) = D_0 + C\sqrt{E - E_c}$ $c_1, c_2, c_3 > 0$ **Bandminimum**

$D(E) = D_0 - C\sqrt{E_c - E}$ $c_1, c_2 > 0, c_3 < 0$ **Sattelpunkt I**

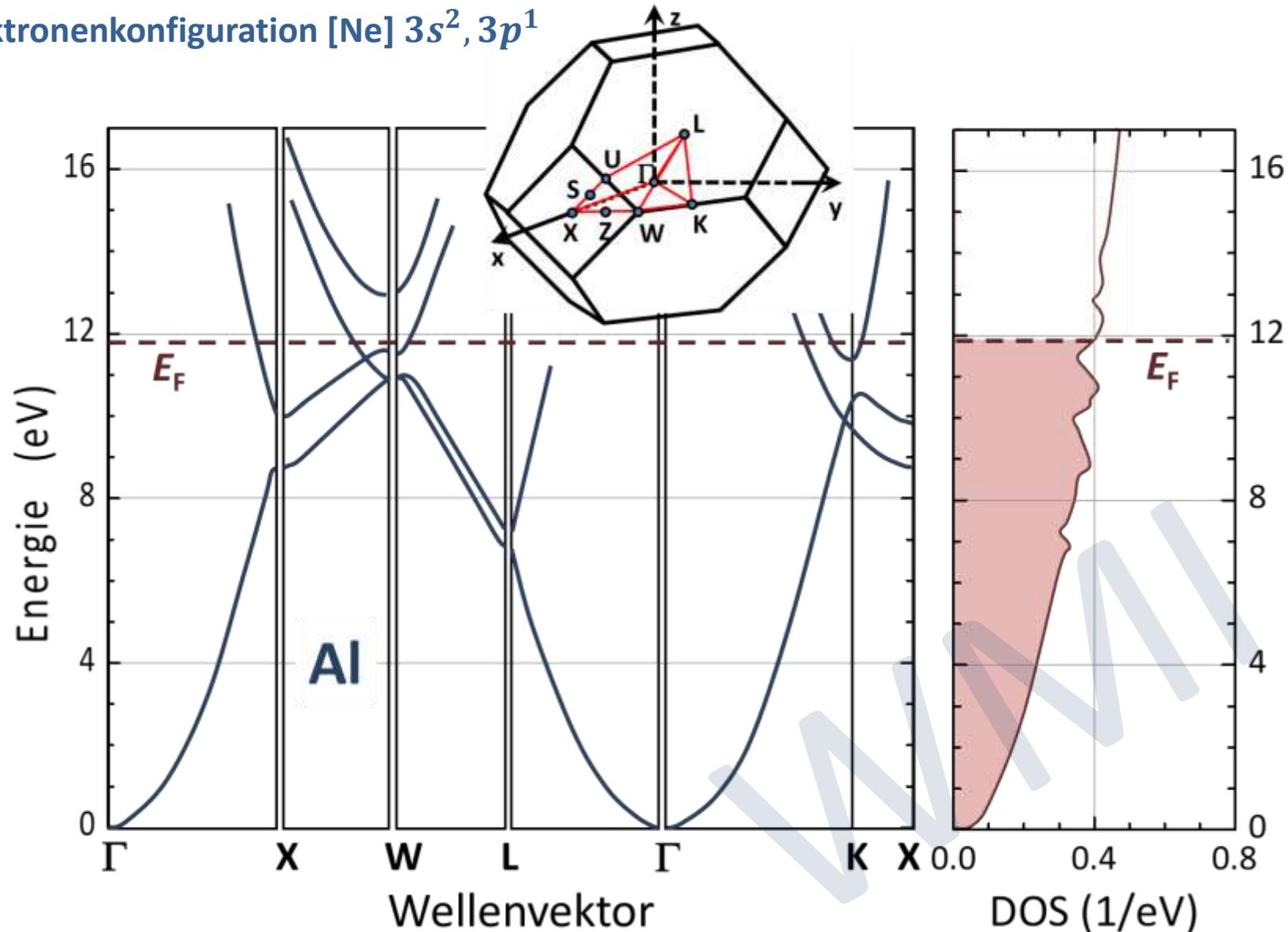
$D(E) = D_0 - C\sqrt{E - E_c}$ $c_1 > 0, c_2, c_3 < 0$ **Sattelpunkt II**

$D(E) = D_0 + C\sqrt{E_c - E}$ $c_1, c_2, c_3 < 0$ **Bandmaximum**

8.5.2 Einfache Bandstrukturen

- Aluminium: einfaches Metall, Elektronenkonfiguration [Ne] $3s^2, 3p^1$

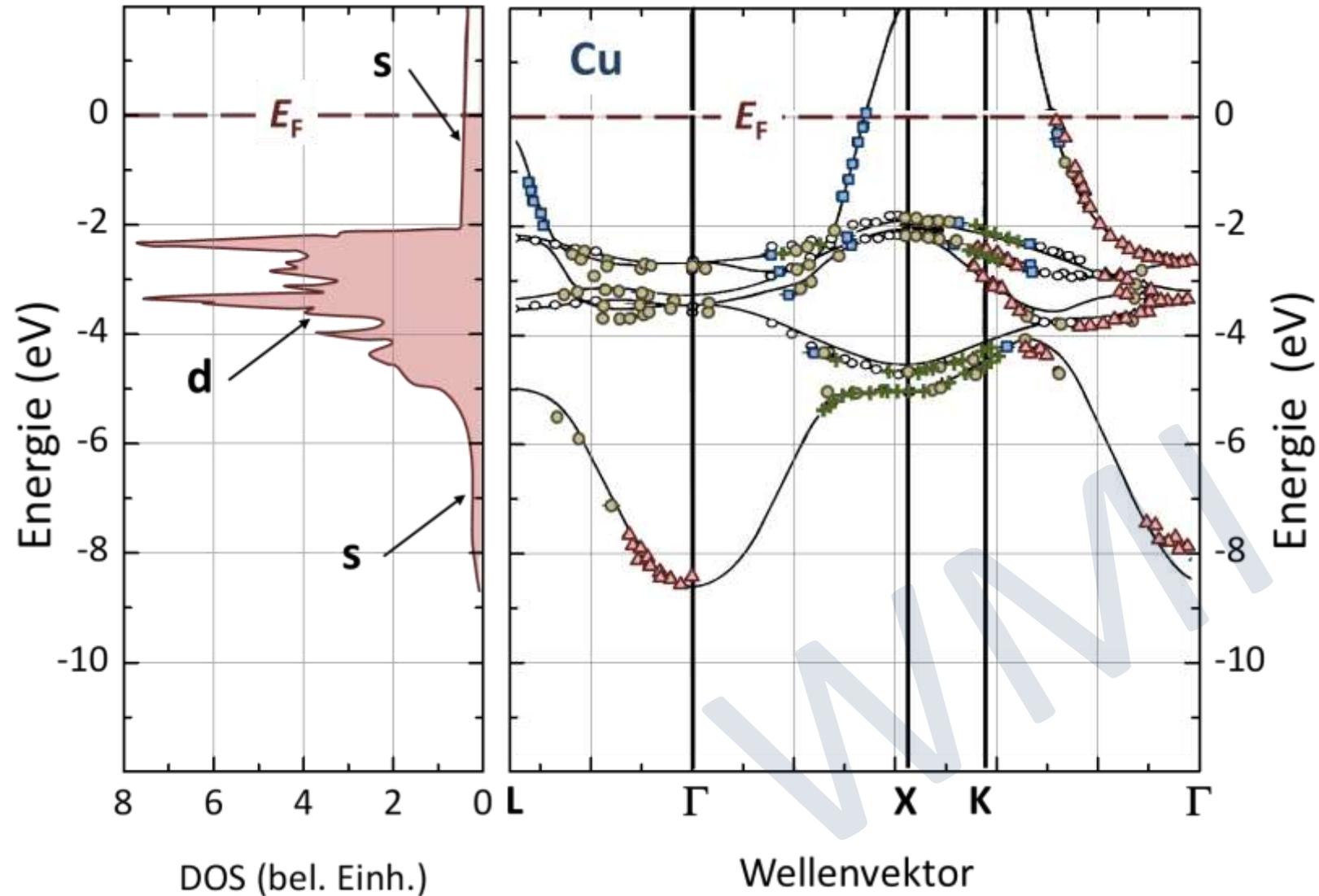
- fcc-Gitter
→ 1. BZ = Rhombendodekaeder
- breites Band durch s -Elektronen, fast parabolisch
- etwas schmäleres Band durch p -Elektronen
- $D(E) \propto \sqrt{E}$



8.5.2 Einfache Bandstrukturen

- Kupfer: 3d-Übergangsmetall, Elektronenkonfiguration [Ar] 3d¹⁰, 4s¹

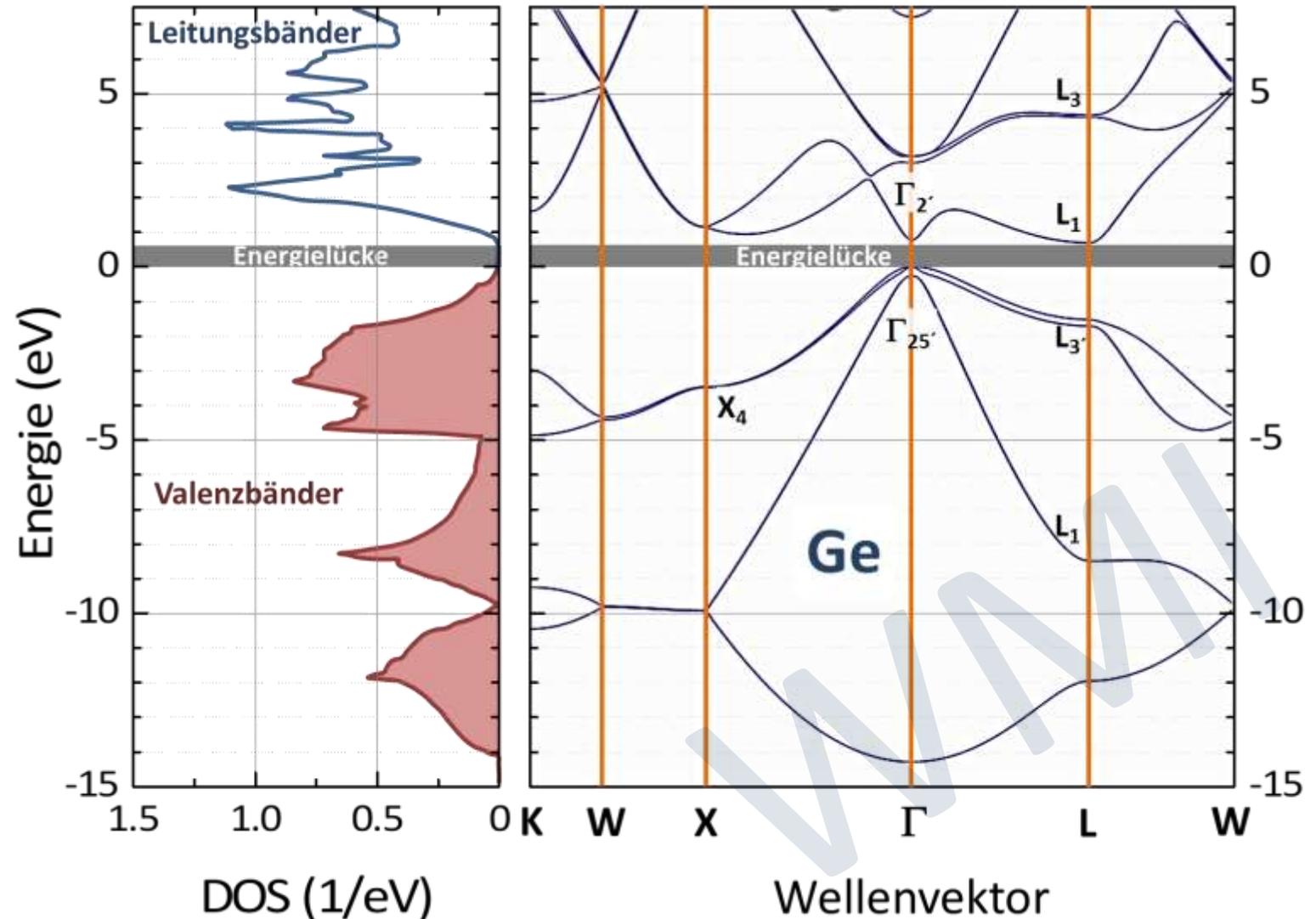
- im Vergleich zu 4s-Elektronen kleiner Überlapp der 3d-Elektronen
 ➔ breites 4s-Band
 ➔ schmale 3d-Bänder
- bei E_F dominiert 4s-Band, das dem von quasi-freien Elektronen gleicht
- bei Fe, Co, Ni:
 E_F liegt im Bereich der 3d-Bänder
 ➔ komplexes Verhalten von $D(E)$
 ➔ Beschreibung mit fast freien Elektronen schwierig



8.5.2 Einfache Bandstrukturen

- Germanium: Halbleiter, Elektronenkonfiguration [Ar] $3d^{10}, 4s^2, 4p^2$

- Diamantstruktur: sp^3 -Hybridisierung
- zwei energetisch getrennte sp^3 -Bänder
 - ➔ unteres Band voll, oberes leer
 - ➔ Halbleiter
- kleinste Lücke zwischen Γ - und L -Punkt
 - ➔ indirekter Halbleiter



8.5.3 Experimentelle Bestimmung der Bandstruktur

- zahlreiche Methoden, erlauben Untersuchung von verschiedenen Aspekten

1. Energielücke von Halbleitern:

- Messung der T -Abhängigkeit des Hall-Effekts der elektrischen Leitfähigkeit
- Messung der optischen Absorption

} Diskussion erst in Kapitel 10

2. Effektive Masse:

- Messung der Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme des Elektronensystems

3. Zustandsdichte am Fermi-Niveau:

- Messung der Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme des Elektronensystems

4. Fermi-Fläche:

- **Photoelektronenspektroskopie**
- Messung des de Haas-van Alphen oder Shubnikov-de Haas Effekts
- Analyse der Magnetotransporteigenschaften

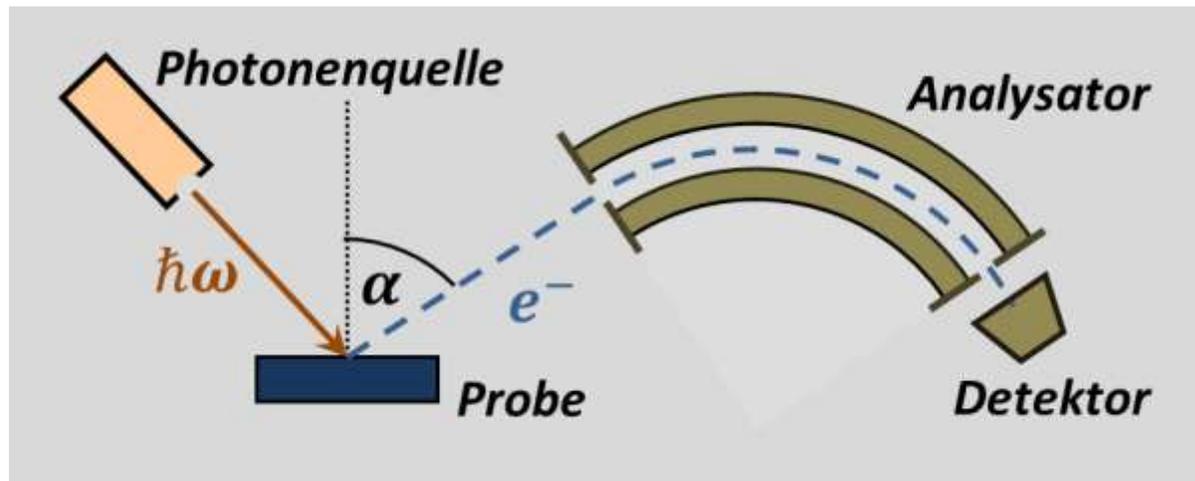
} Diskussion erst in Kapitel 9

8.5.3 Experimentelle Bestimmung der Bandstruktur

- Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie (ARPES: Angle Resolved Photo Electron Spectroscopy)

Funktionsweise:

- man schießt Photon auf Festkörper und misst die Energie der ausgelösten Photoelektronen
Photonenquelle: Laser, Synchrotronstrahlung
- winkelabhängige Messung ergibt Information über k -Abhängigkeit (erfordert aber einigen Aufwand)
- Problem ist geringe Austrittstiefe der Photoelektronen: nur wenige nm (erfordert sehr saubere Probenoberflächen, UHV-Technologie)



8.5.3 Experimentelle Bestimmung der Bandstruktur

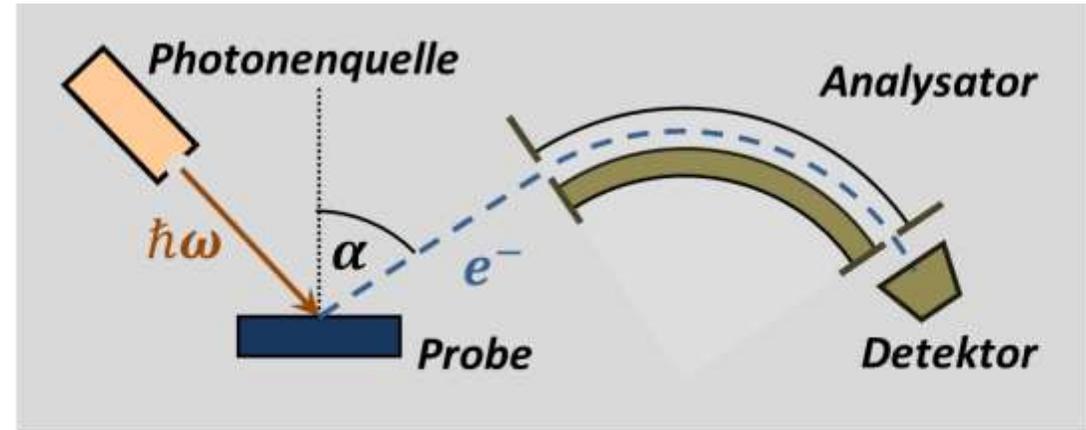
- Funktionsweise von ARPES

$$\hbar\omega = \Phi_A + E_{\text{kin}} + E_b$$

Austrittsarbeit
(bekannt)

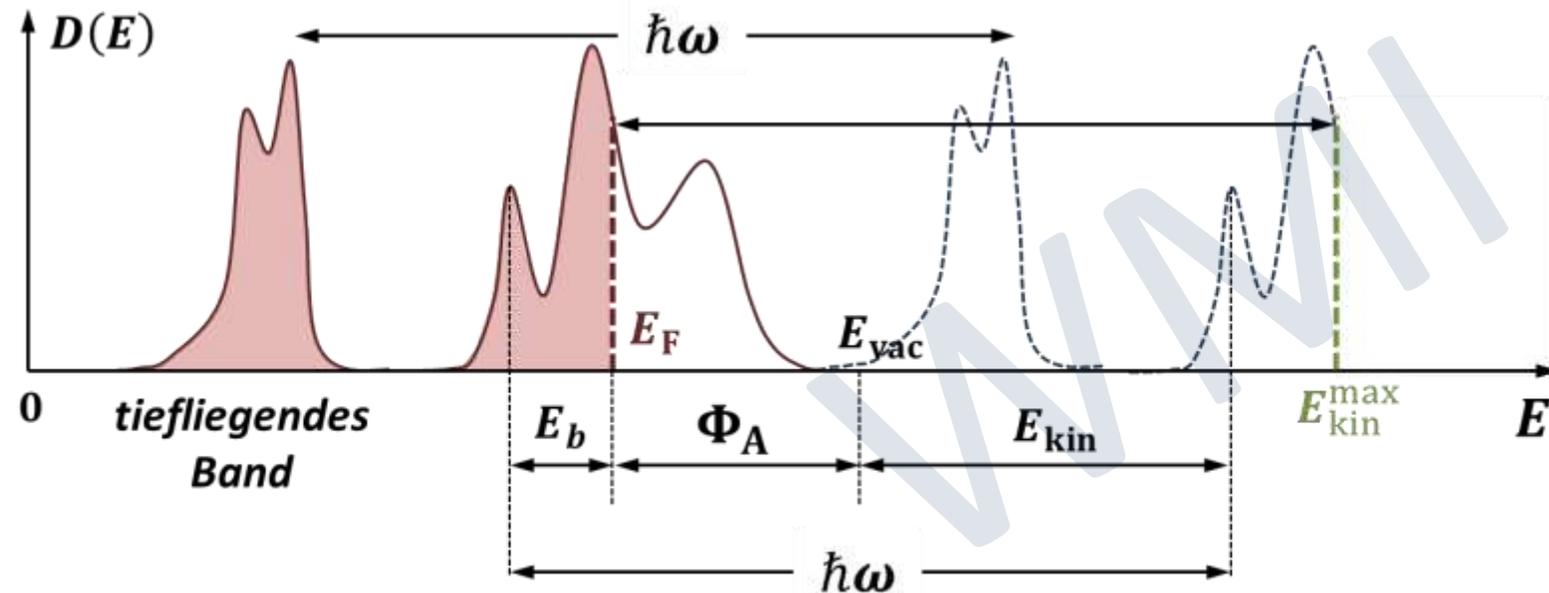
gemessen

Bindungsenergie der El.
im Festkörper



- maximale Energie der austretenden Elektronen:
(Elektronen mit $E_b = 0$, also bei Fermi-Niveau)

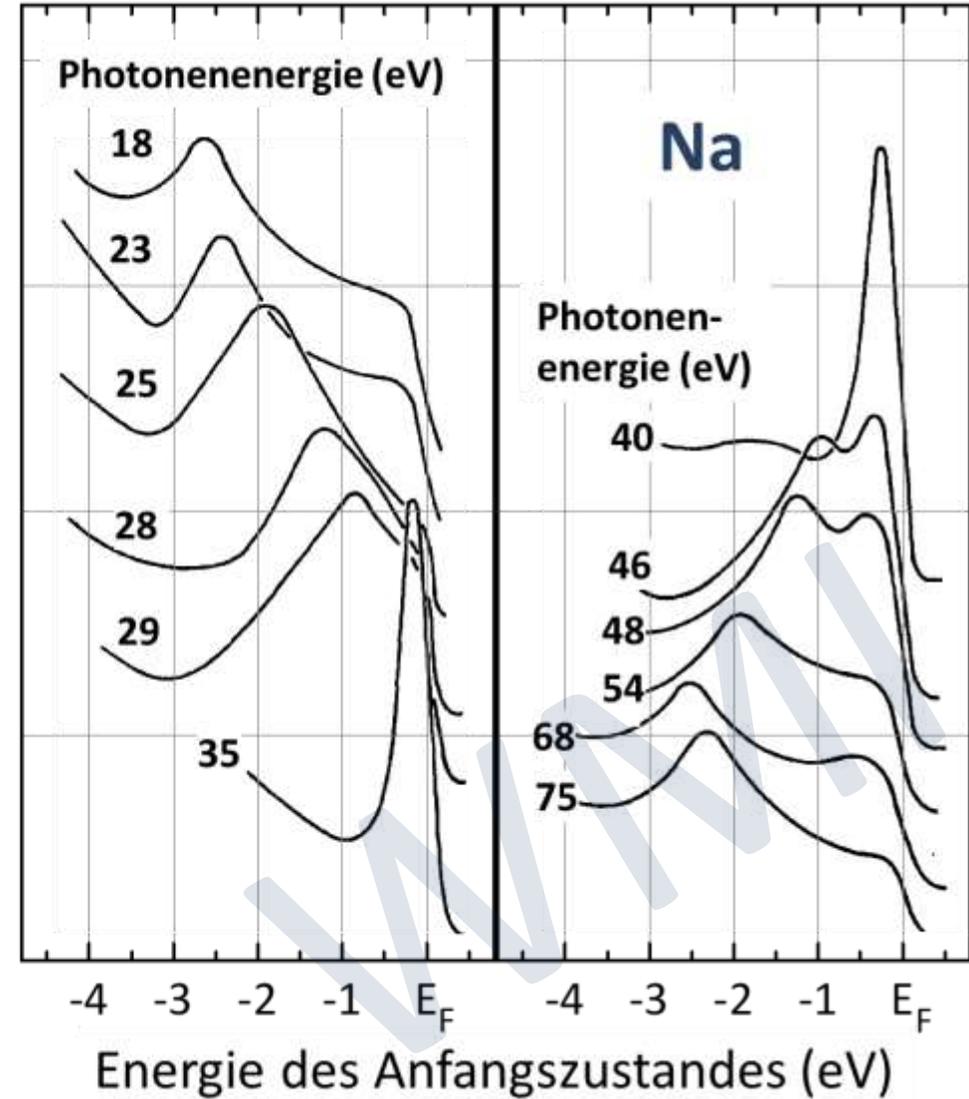
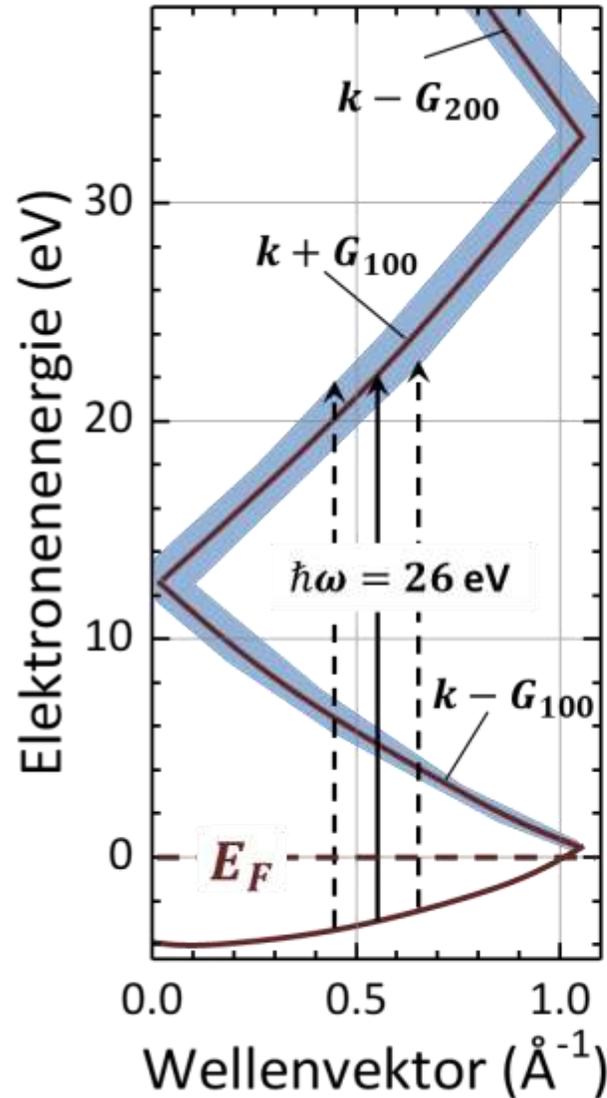
$$E_{\text{kin}}^{\text{max}} = \hbar\omega - \Phi_A$$



8.5.3 Experimentelle Bestimmung der Bandstruktur

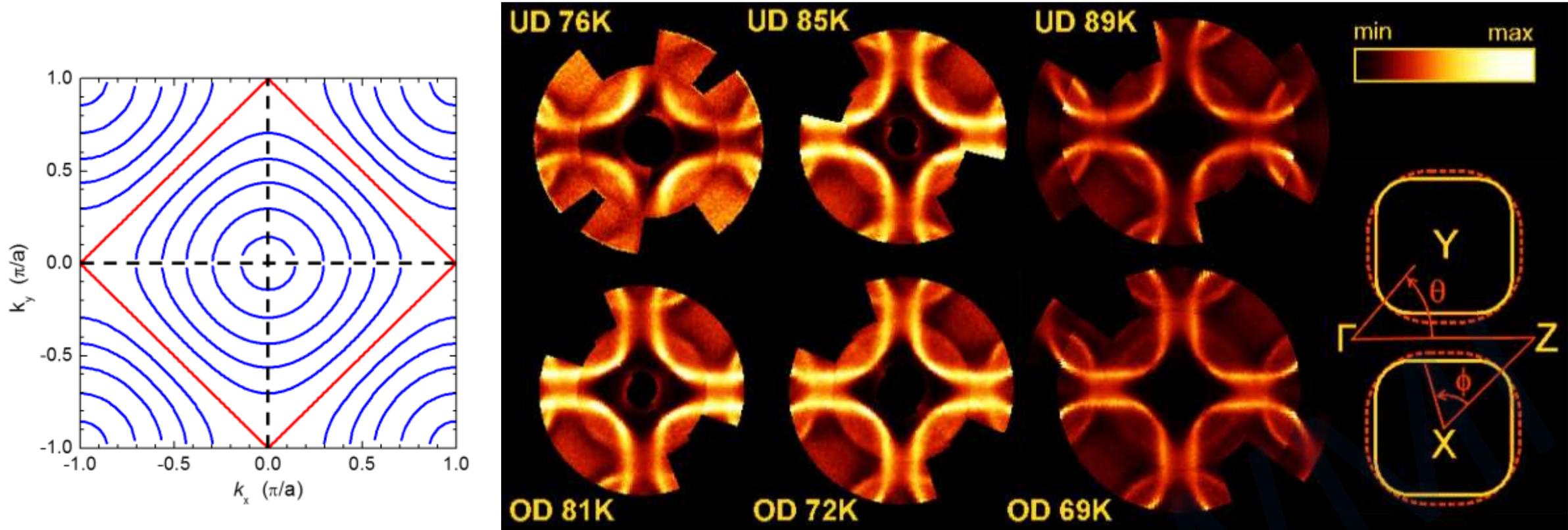
- PES-Spektren einer Na (110)-Oberfläche

gemessen für senkrechte Emission



8.5.3 Experimentelle Bestimmung der Bandstruktur

- Beispiel: Messung der Fermi-Oberfläche von Hochtemperatur-Supraleiter (Bi,Pb)-2212



➔ Änderung der Fermi-Fläche mit Änderung der Dotierung (Ladungsträgerdichte)

PRL 84, 4453 (2000)
PRB 64, 094513 (2001)
PRB 66, 014502 (2002)

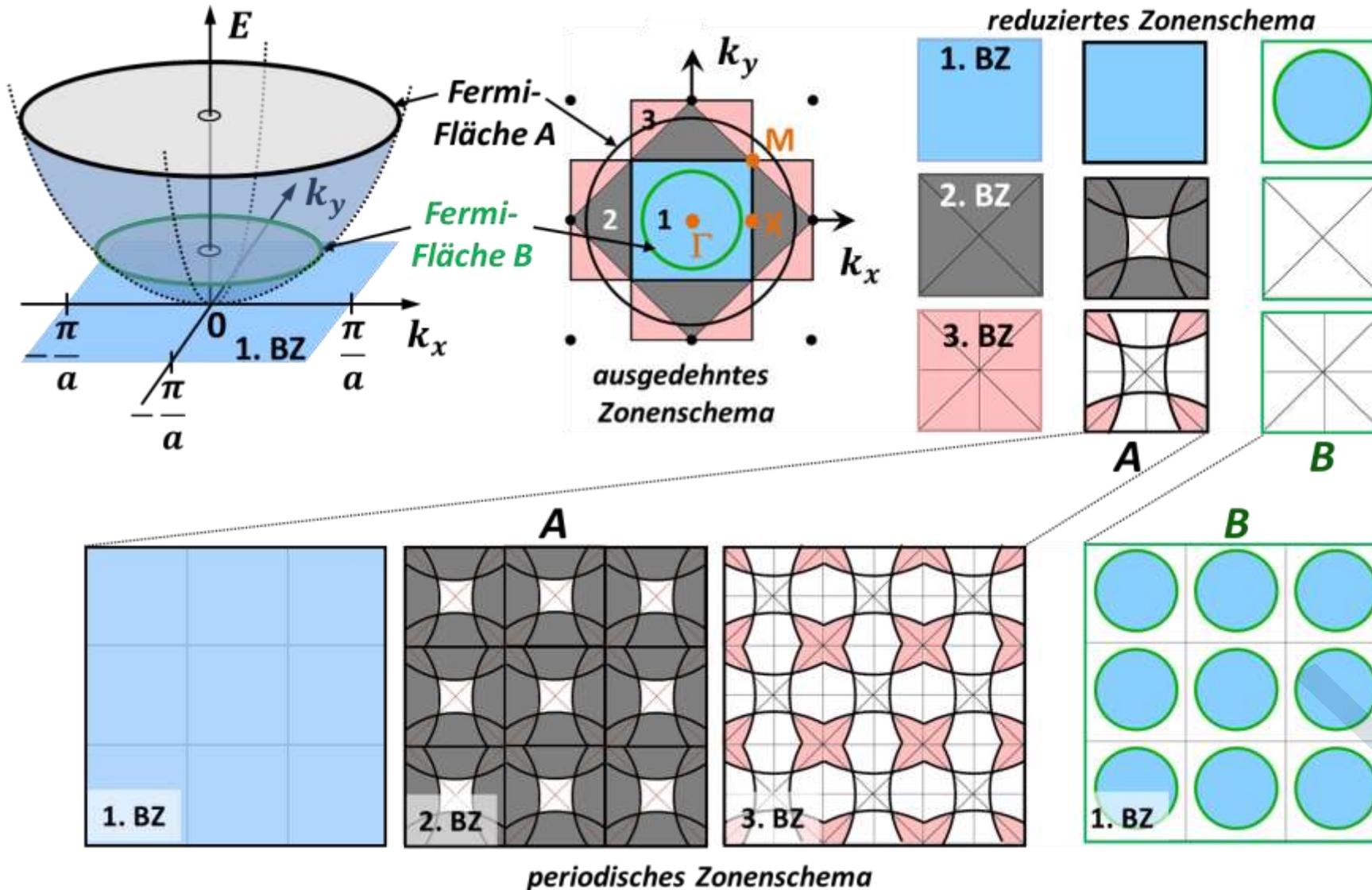
8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Fermi Fläche $E(\mathbf{k}) = E_F$ trennt bei $T = 0$ die besetzten von den unbesetzten Zuständen
- Form der Fermi-Fläche besitzt für die Eigenschaften von Metallen große Bedeutung
 - ➔ bei externer Störung findet nur Umverteilung der Elektronenzustände nahe bei E_F statt
- für freie Elektronen (3D) war Fermi-Fläche eine Kugel mit Radius k_F
 - ➔ jetzt viel kompliziertere Fermi-Flächen, da komplexere Bandstruktur: $E(\mathbf{k}) \neq \hbar^2 k^2 / 2m$
 - ➔ Aufspaltung der Energieeigenwerte am Rand der Brillouin-Zone führt zu starke Abweichung von Kugelgestalt

WMI

8.6.1 Fermi-Flächen von Metallen

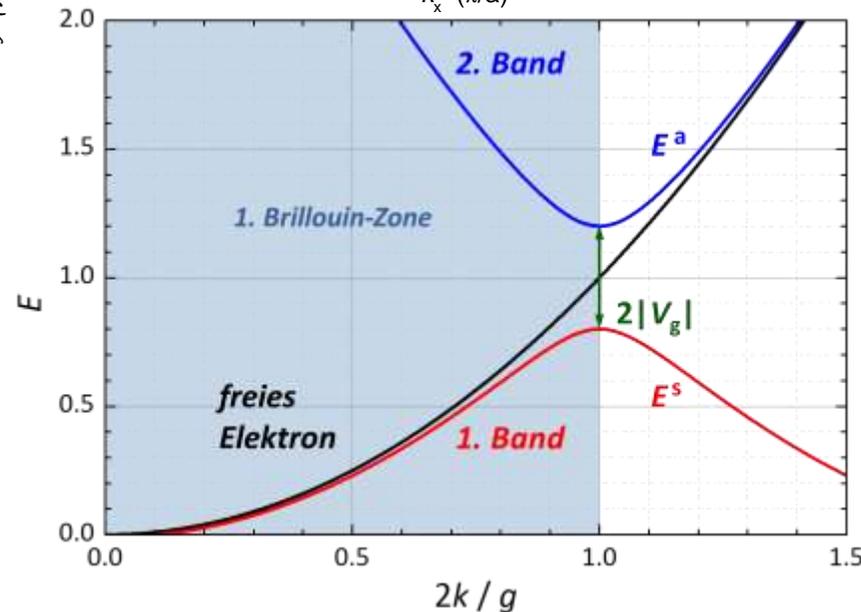
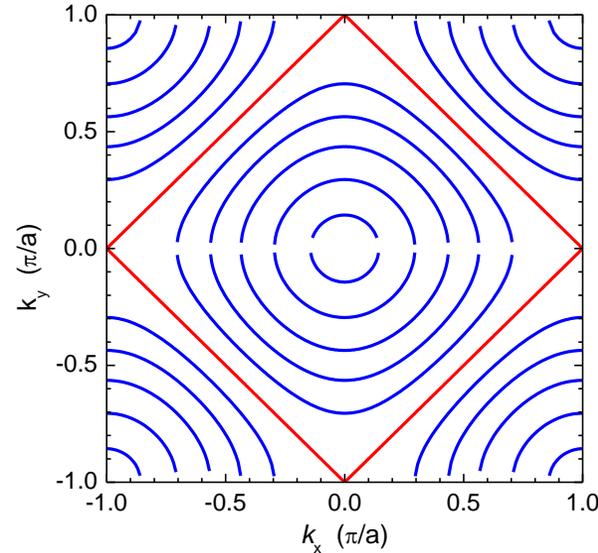
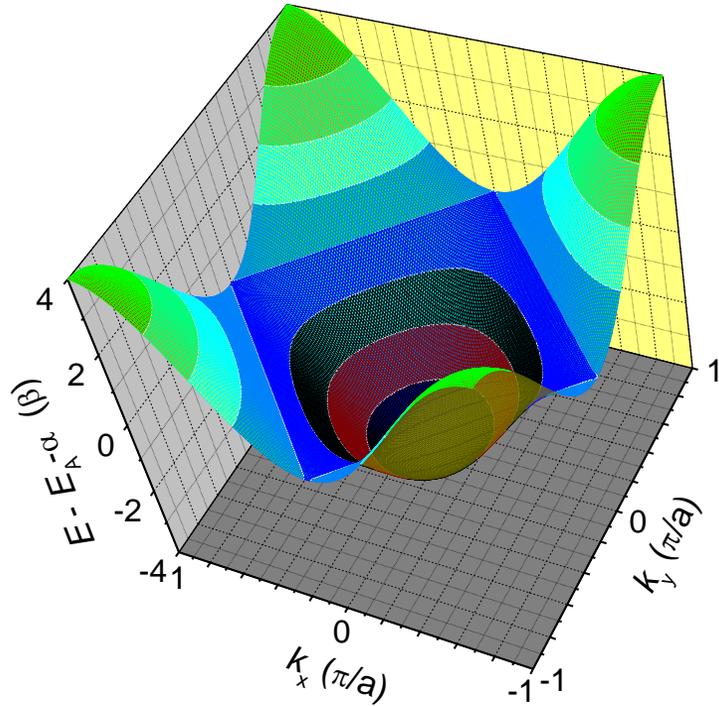
- Beispiel: 2D quadratisches Gitter, freie Elektronen (Wiederholung)



- 2D-System, da grafisch leichter darstellbar
- **wichtig:** Fermi-Fläche in der 2. BZ kann als „Loch“ (fehlende Elektronen) um das Zonenzentrum aufgefasst werden

8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Beispiel: 2D quadratisches Gitter, Kristallelektronen im periodischen Potenzial (tight binding Modell)

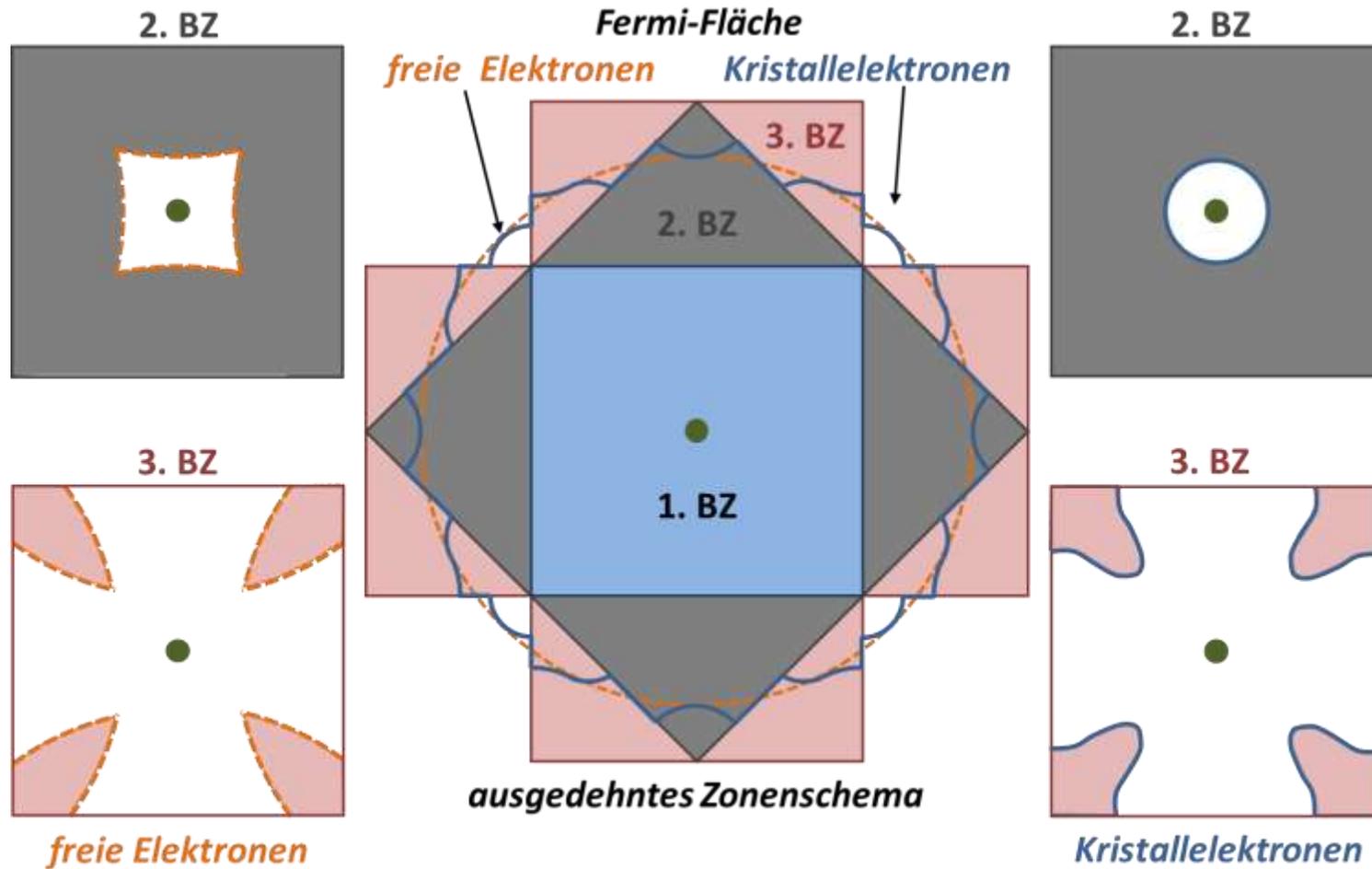


qualitative Änderungen beim Übergang von freien zu Bandelektronen:

- Flächen konstanter Energie sind keine Kreise mehr
- Energielücken an Rändern der Brillouin Zonen
- $E(\mathbf{k})$ -Kurven schneiden Brillouin-Zone senkrecht (stehende Wellen, $\mathbf{v}_g = 0$)
- scharfe Strukturen am Rand der BZ werden abgerundet
- von Fermi-Fläche eingeschlossenes Volumen bleibt gleich
➔ bestimmt durch Elektronenzahl

8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Beispiel: 2D quadratisches Gitter

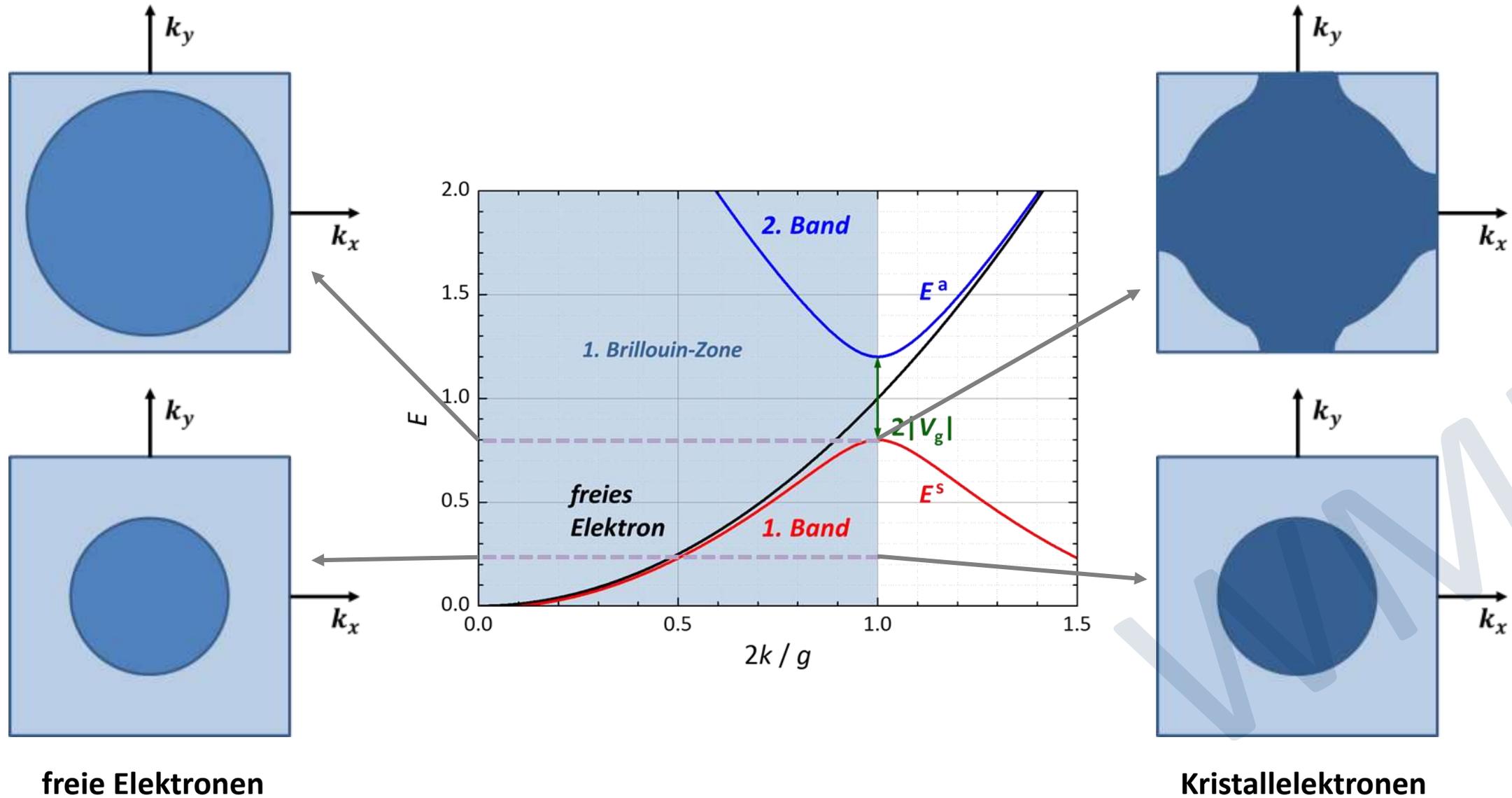


qualitative Änderungen beim Übergang von freien zu Bandelekttronen:

- Flächen konstanter Energie sind keine Kreise mehr
- Energielücken an Rändern der Brillouin Zonen
- $E(\mathbf{k})$ -Kurven schneiden Brillouin-Zone senkrecht (stehende Wellen, $\mathbf{v}_g = 0$)
- scharfe Strukturen am Rand der BZ werden abgerundet
- von Fermi-Fläche eingeschlossenes Volumen bleibt gleich
➔ bestimmt durch Elektronenzahl

8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Vergleich der Fermi-Flächen von Elektronen auf 2D Quadratgitter



8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- qualitative Diskussion von Fermi-Flächen

- i. Alkali-Metalle (bcc) sowie Cu, Ag, Au (fcc): nur ein s -Elektron in äußerster Schale

➔ Zahl der Elektronen im obersten Band beträgt N ➔ halbgefülltes Band (wegen Spin-Entartung)

➤ im k -Raum beanspruchtes Volumen eines Elektrons: $V_N = \frac{1}{2} \frac{(2\pi)^3}{V}$ (Spin)

➤ Fermi-Wellenvektor für freie Elektronen: $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$

➤ Elektronendichte für fcc-Gitter (4 Atome pro Einheitszelle): $n = N/V = 4/a^3$

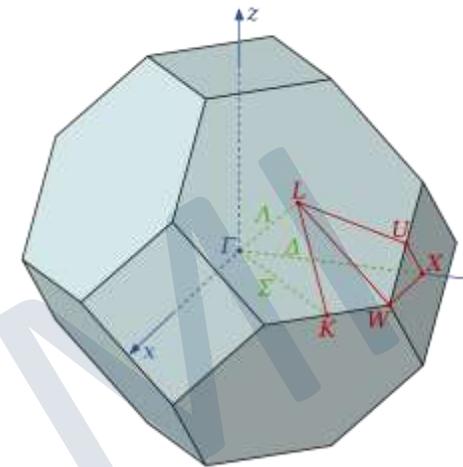
➤ Einsetzen in Ausdruck für k_F : $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \simeq 4.91/a$

➤ kürzester Abstand zum Zonenrand von fcc-Gitter: $\frac{1}{2} \frac{2\pi}{a} \sqrt{3} \simeq 5.44/a$

➔ Fermi-Kugel von freiem Elektronengas würde fast den Rand der 1. BZ berühren

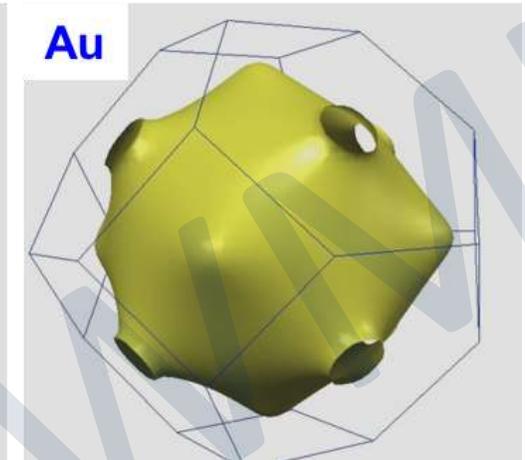
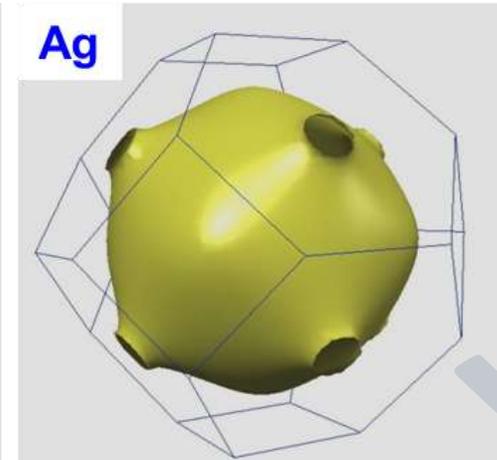
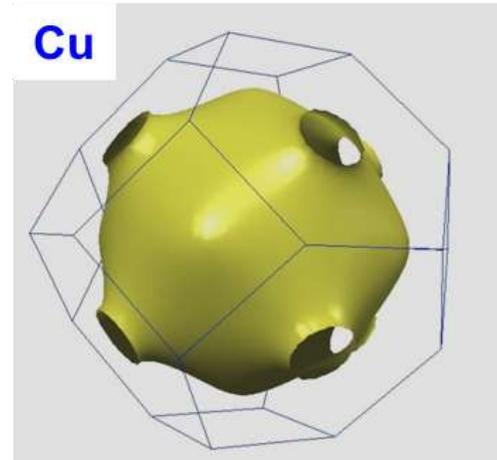
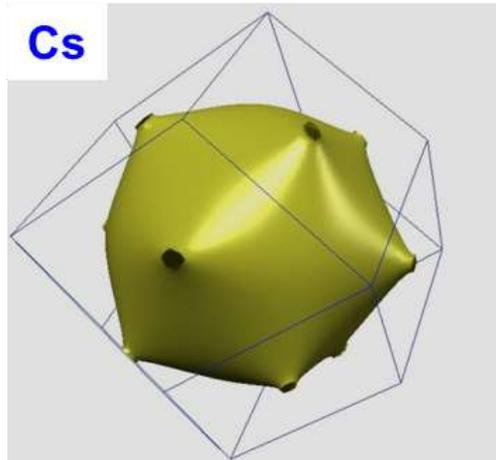
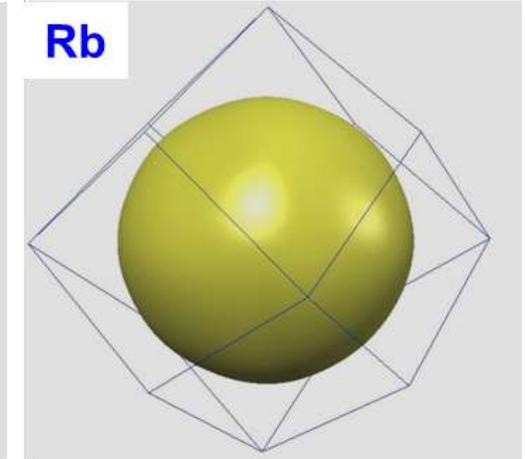
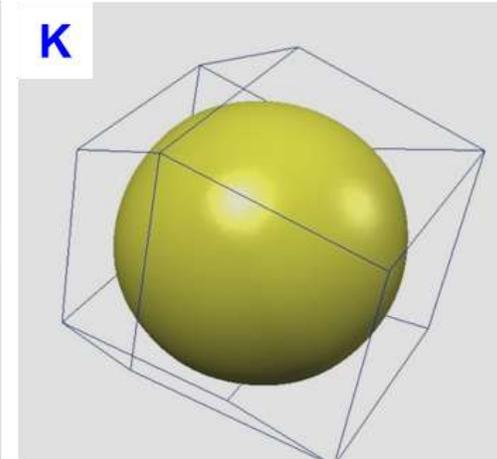
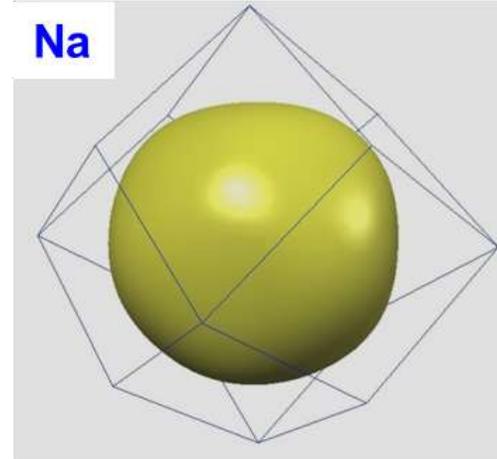
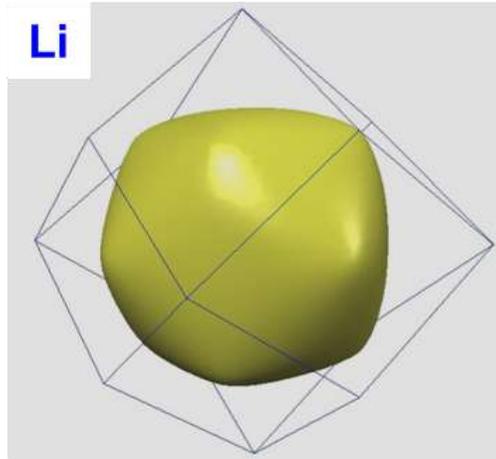
➔ Fermi-Fläche sollte fast Kugel sein mit Abweichungen an den Stellen, wo Kugel Rand von 1. BZ nahe kommt

➔ aber: zusätzliche Absenkung der Energie am Zonenrand durch periodisches Potenzial ➔ **Aufwölbungen, Ausbildung von Hälsen**



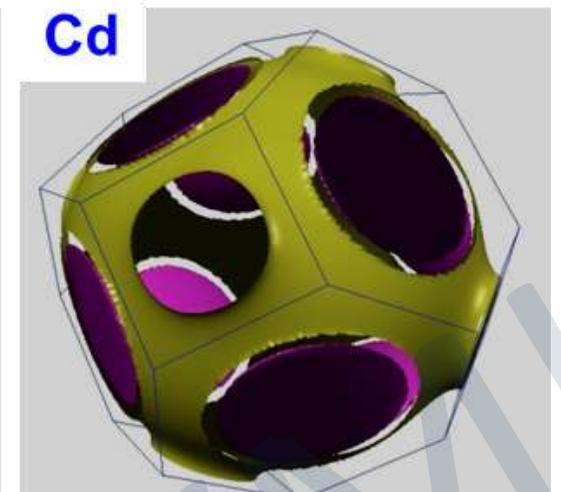
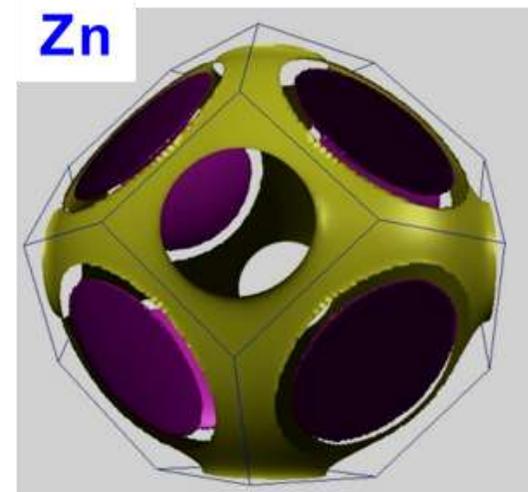
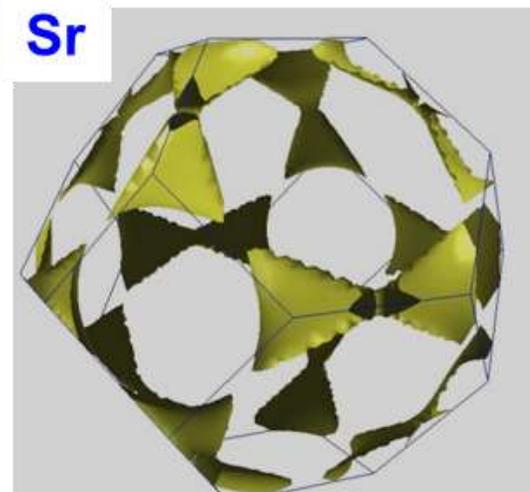
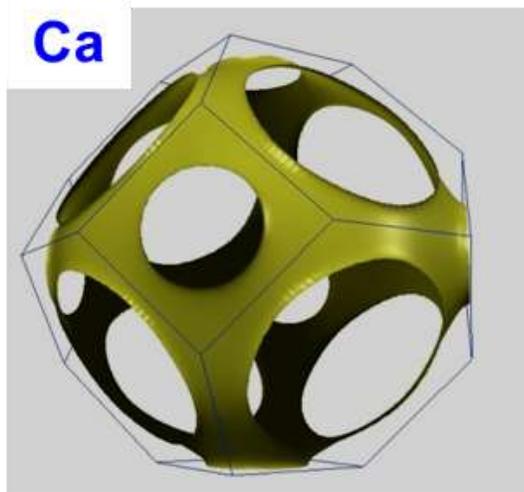
8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Fermi-Flächen von Alkali-Metallen, Cu, Ag und Au



8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Fermi-Flächen von Erdalkali-Metallen: Ca ($[\text{Ar}] 4s^2$), Sr ($[\text{Kr}] 5s^2$) sowie Zn ($[\text{Ar}] 3d^{10}, 4s^2$) und Cd ($[\text{Kr}] 4d^{10}, 5s^2$)
 2 Elektronen pro Einheitszelle, $2N$ Elektronen im obersten Band, eigentlich Isolatoren
 → Bandüberlappung resultiert in metallischem Verhalten
 → ähnliche Fermi-Flächen

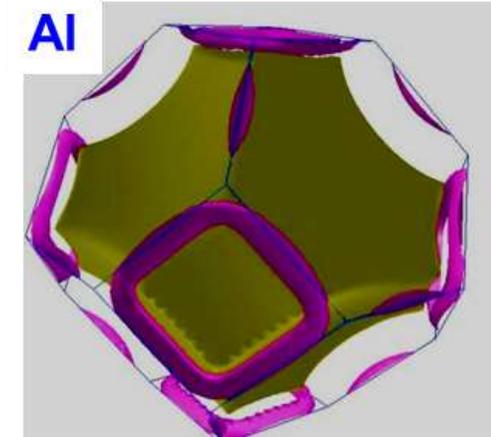


8.6 Fermi-Flächen von Metallen

- Fermi-Flächen von Aluminium: Al ($[\text{Ne}] 3s^2, 3p$)

3 Valenzelektronen pro Einheitszelle, 3 Bänder

→ erstes Band voll (nicht gezeigt), 2. Band = gelb, 3. Band = magenta

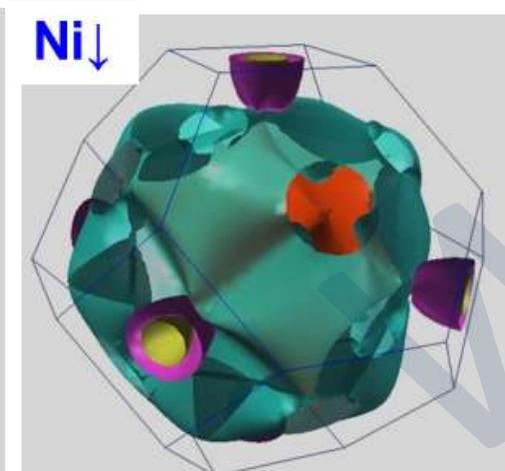
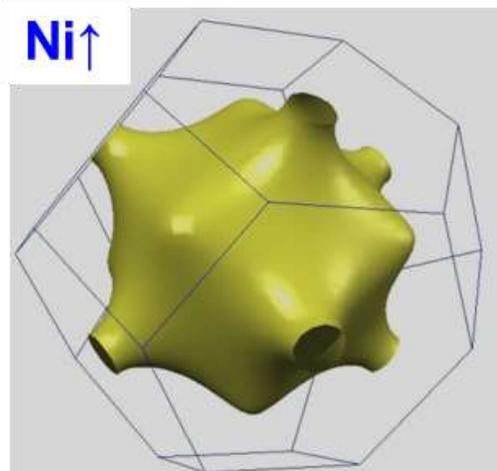
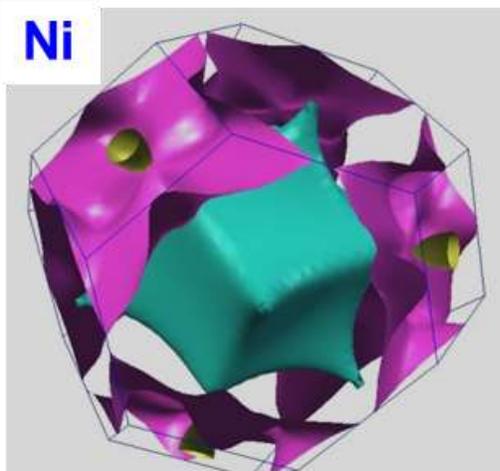


- Fermi-Flächen von Nickel: Ni ($[\text{Ar}] 3d^8, 4s^2$)

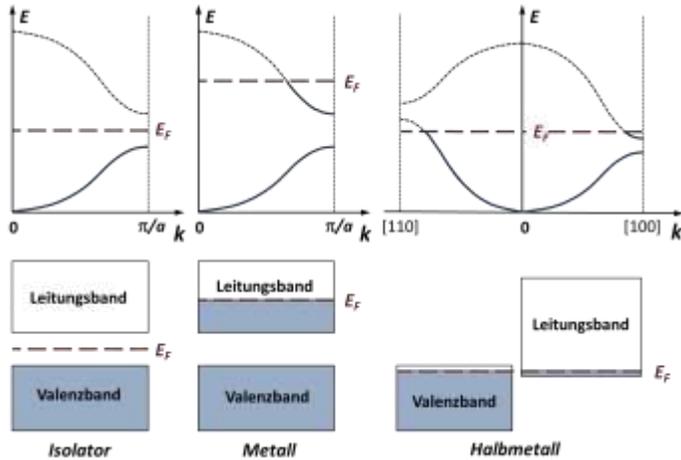
teilweise gefüllte $3d$ -Bänder

→ ferromagnetisch

→ unterschiedliche Fermi-Fläche für beide Spinrichtungen



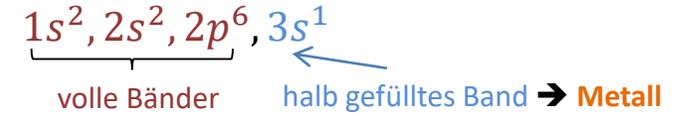
• Metalle, Halbmetalle, Halbleiter, Isolatoren



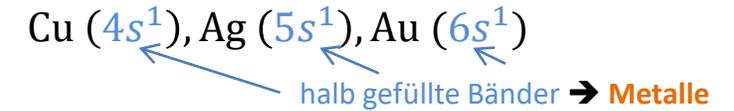
**2N
Zustände
pro
Band**

Faustregel:
gerade Elektronenzahl: **Isolator**
ungerade Elektronenzahl: **Metall**

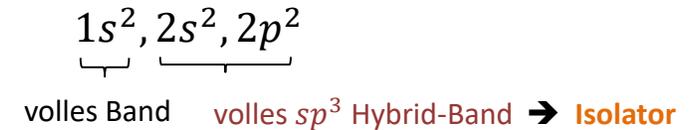
- Beispiel Natrium:



- Beispiel einfache Metalle:



- Beispiel Kohlenstoff (Diamant):



• Zustandsdichte

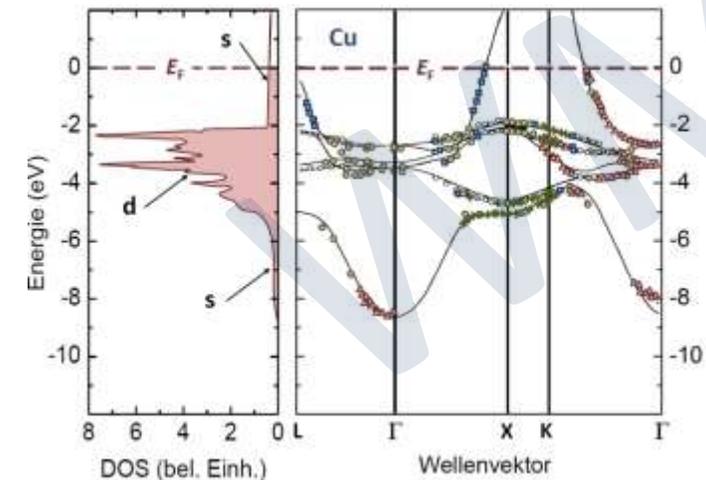
$$D(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=const} \frac{dS_E}{|dE/dk_{\perp}|}$$

- Singularitäten an Stellen mit waagrechttem Bandverlauf → **van Hove Singularität**
- flacher Bandverlauf ($\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ ist klein) → hohe Zustandsdichte

• Beispiele für Bandstrukturen und Zustandsdichten

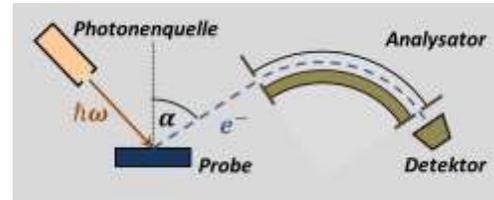
z.B. Cu → 3d Übergangsmetall:
 im Vergleich zu den 4s-Elektronen ist der Überlapp der 3d-Elektronen klein

- breites 4s-Band, geringe Zustandsdichte
- schmale 3d-Bänder, hohe Zustandsdichte



• Methoden zur Bestimmung der Bandstruktur $E(\mathbf{k})$

- ARPES: Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy



$$\hbar\omega = \Phi_A + E_{\text{kin}} + E_b$$

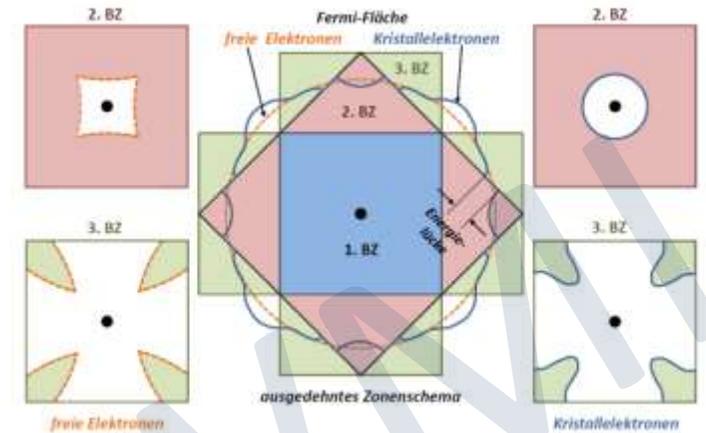
Photonenergie (bekannt) Austrittsarbeit (bekannt) gemessen Bindungsenergie der El. im Festkörper

- Energielücke von Halbleitern (→ Kapitel 10)
 - T -Abhängigkeit von R_H und σ bzw. ρ
 - optische Absorption
- effektive Zustandsdichtemasse
 - T -Abhängigkeit von c_V

- Zustandsdichte bei E_F
 - T -Abhängigkeit von c_V des Elektronensystems
- Fermi-Fläche (→ Kapitel 9)
 - de Haas – van Alphen – Effekt, Magnetotransport

• qualitative Änderungen beim Übergang von freien zu fast freien Elektronen:

- Energielücken an Rändern der BZ
- $E(\mathbf{k})$ -Kurven schneiden Ränder der BZ senkrecht
- scharfe Strukturen am Rand der BZ werden abgerundet
- von Fermi-Fläche eingeschlossenes Volumen bleibt gleich
↔ Zahl der Elektronen



• Fermi-Flächen von Metallen

- Fermi-Fläche $E(\mathbf{k}) = E_F$ trennt bei $T = 0$ die besetzten von den unbesetzten Zuständen
- Form der Fermi-Fläche besitzt für die Eigenschaften von Metallen große Bedeutung
- für Bandelektronen: Fermi-Flächen \neq Kugeloberflächen

