

Zu jedem Band N erlaubt k -Zustände in 1. B. Z.

Bem: Allgemeine Züge der Bandstruktur durch Symmetrie des Gitters festgelegt.

Grundzustand für N Elektronen

Fall 1: gewisse Zahl von Bändern vollständig gefüllt, andere leer (notwendig: gerade Anzahl von Elektronen pro Einheitszelle)
 elektro. Leitfähigkeit: leere Bänder liefern keinen Beitrag zum Elektronenstrom, volle Bänder: keine energetisch benachbarten freien Zustände für Elektronenstrom.
 \Rightarrow Isolator (bei $T=0$)

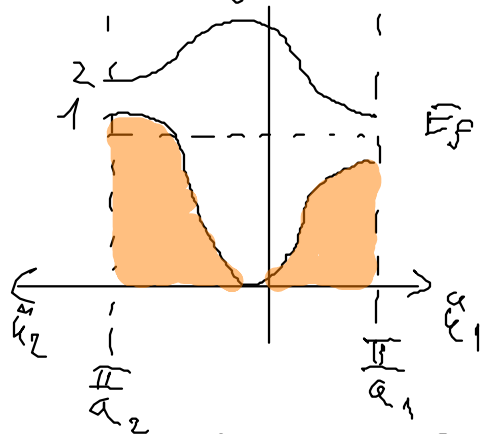
$T > 0$: thermische Anregung von Elektronen aus dem untersten Band (Valenzband) ins unbesetzte Band (Leitungsband) möglich
 „Halbleiter“: Isolatoren mit kleiner Energie lücke (undotiert)

Fall 2: gewisse Anzahl von Bändern teilweise gefüllt:
 nicht volle k -Zustände, dicht bei $k=0$ (bei E_F): Ladungstransport möglich \Rightarrow Metall. 1 Valenzelektron pro primitiver Einheitszelle:
 halbgeladene Band: Na, K . Allgemein: ungerade Zahl von Elektronen:
 Al, Ga, In

Bem: bei starker El-El-WW: Isolator-Zustand bei halber Füllung möglich „Mott-Hubbard-Isolator“.

Kristall mit gerader Zahl von Elektronen pro Zelle? nicht

Notwendig Isolator $E(\vec{k})$ richtungsabhängig, Bandlücke möglich



Bsp: Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Sn, Pb

Fläche im k -Raum, die (bei $T=0$) besetzt von unbesetzten Zuständen kommt:
Fermi-Fläche $E_0(\vec{k}) = E_F$

8.3 Brillouin-Zone und Fermi Flächen

erste Brillouin-Zone: Menge aller Punkte im k -Raum, die man vom Ursprung durch Überschreiten von genau $n-1$ Bragg Ebenen erreichen kann.

Metalle: Fermi-Fläche entscheidend für elektron. Prozesse

Fermi-Fläche kann ganz in 1. B.Z. liegen, oder Teile der Fermi Fl. können in verschiedenen B.Z. liegen.

Alkali-Metalle: 1 El. pro Atom: Fermi Fl. vollst. in 1. B.Z. und atomal kugelförmig

Fermi-Flächen für komplizierte Fälle:

Übergang zur fast freien Elektr. in schwachem periodischem Potential

- Faustregeln:
1. die Energiegrenzen der Energie lücken auf
 2. Fermi-Fläche durchläuft Energiegrenzen senkrecht (fast immer)
 3. Period. Potential runderd. starke Ecken und Kurven ab (folgt aus 1.-2.)
 4. Das von der Fermi-Fläche umschlossene Volumen hängt nur von Elektr. Konzentration ab und ist unabh. von genaue Verlauf des period. Potentials (folgt aus: $\Delta \vec{k} = \frac{8\pi^3}{V}$)

Verhalten von Leitungs elektronen im Magnetfeld zur Ausmessung von Fermi-Fl.

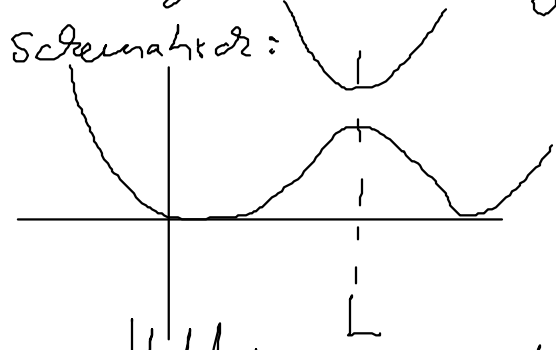
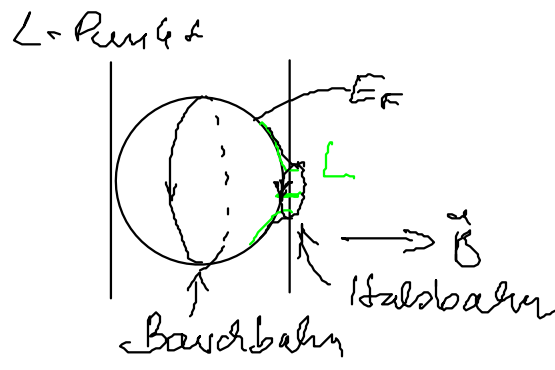
z. B. de Haas-von-Alphen-Effekt ~ 1930

Oszillationen in der magnetischen Suszeptibilität als Fkt. des angelegten

Magnetfeldes \vec{B} . Periodizität in $\frac{1}{B}$ mit $\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi^2}{k} \frac{1}{A_c}$

A_c : Extremal-Querschnittsfläche der Fermi-Fläche $\perp \vec{B}$

Edelmetalle: freie Elektronen: Fermi-Kugel wie vollständig im 1. BZ



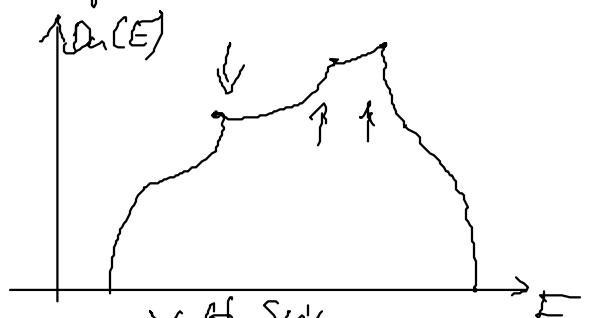
Klemm Halbkugel Bandstruktur

Zustandsdichte von Bloch-Zuständen

$D_n(E) dE = 2 \frac{1}{V} \int_{\text{Zarleraubtes } \vec{k}\text{-Zustand im } n\text{-ten Band zw. } E \text{ und } E+dE}$

$D_n(E) dE = \int_{\text{Schale}} \frac{d\vec{k}}{8\pi^3} \frac{1}{v_g(E(\vec{k}))} \Rightarrow D_n(E) = \int \frac{ds}{4\pi^3} \frac{1}{|v_g(E(\vec{k}))|}$

$S_n(E)$: Fläche konst. Energie $E_n(\vec{k}) = E$ in primitiver Zelle des \vec{k} -Raums, z.B. 1. BZ



Bänder flach: hohes $D_n(E)$
 Bänder steil: niedriges $D_n(E)$
 um Horz-Singularitäten: $v_g(E(\vec{k})) = 0$

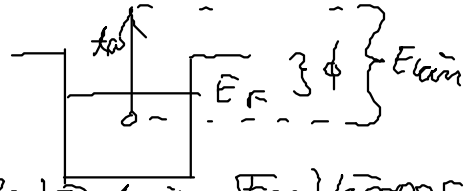
stark gebundene Elektronen (z.B. 3d-Elektronen in Übergangsmetallen) =

flache Bänder (siehe 8.4) Bsp: 3d-Schale von Cu (vollst. gefüllt d, s unterhalb E_F)

Photoemissionspektroskopie zur Bestimmung der Bandstruktur

Photoeffekt: Auslösen eines Elektronen mit UV Licht, das Elektron hat kein Energie

$E_{kin} = \hbar \omega - \phi - E_B$



Messung des Spektrums $D(E_{kin})$:

Abbild der Verteilung der besetzten Zustände im Festkörper

$D(E_{kin}) = D(E + const.)$

Untergrund durch inelastische Prozesse, Ultra hoch vakuum

ARUPS: angeregtes resolved Ultraviolet Photoemission