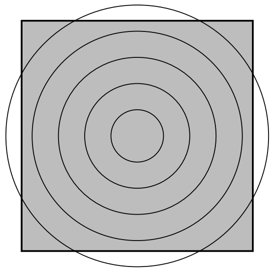
6.11 Fermiflächen

Im bisher betrachteten eindimensionalen Fall wird der Grundzustand von der Fermienergie und dem Fermi-Niveau bestimmt. Das Fermi-Niveau stellt den Zustand mit der höchsten Energie dar, wobei diese Energie als Fermienergie bezeichnet wird. Die Fermifläche ist nichts anderes als eine dreidimensionale Darstellung der Fermienergie im k-Raum. Das von der Fermifläche umschlossene Volumen beinhaltet sämtliche besetzten Zustände sofern sich das Material im Grundzustand befindet. Im einfachsten Fall, dem der freien Elektronen, ist die Fermifläche eine Kugel, da die Fermienergie eine Funktion der Quadrate der k-Vektoren in jede Richtung ist.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

In anderen Fällen insbesondere in Metallen ist die Fermifläche nicht exakt kreisförmig im k-Raum. Für solche Metalle, die quasi freie höher gelegene Elektronen besitzen, ist die Fermifläche jedoch nahezu kreisförmig. Nahezu, weil aufgrund von Bragg-Reflexionen an den Grenzen der Brillouin-Zonen Hälse entstehen. Solche Fermiflächen werden zum Beispiel für Kupfer, Silber und Gold beobachtet.



Zur Vereinfachung wird im Folgenden die Betrachtung der Fermifläche auf zwei Dimensionen reduziert. Damit reduziert sich die Fermifläche freier Elektronen, die im Dreidimensionalen die Gestalt einer Kugel hatte, auf einen Kreis. Ist das Gitter leer - also nicht vorhanden - so kommt es auch nicht zu Bragg-Reflexionen. Sofern die Fermienergie innerhalb der ersten Brillouin-Zone liegt, ist auch im reduzierten Zonenschema die Fermienergie ein Kreis. Hat ein Metall jedoch mehrere Elektronen, so können diese nicht mehr alle in der ersten Brillouin-Zone untergebracht werden, dann liegt die Fermienergie außerhalb der ersten Brillouin-Zone. Im erweiterten Zonenschema ist die Fermienergie nach wie vor kreisförmig. Jedoch wird die Fermifläche im reduzierten Zonenschema zunächst merkwürdige Formen annehmen. Für diese Betrachtungen wird das erweiterte Zonenschema in die Brillouin-Zonen zerlegt und diese dann auf die erste Brillouin-Zone abgebildet, um das reduzierte Zonenschema zu erhalten.

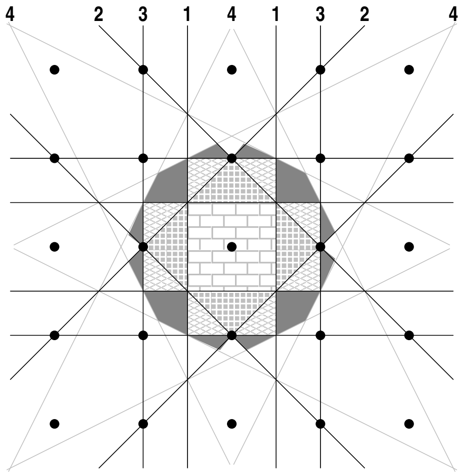


Abbildung 6.18: Konstruktion der ersten vier Brillouin-Zonen. Die schwarzen Linien sind die Mittelsenkrechten zu den jeweils nächsten Nachbarn, beziehungsweise denen höherer Ordnung, wie es die Zahlen angeben. Die Grauen Linien betreffen die Konstruktion der vierten Brillouin-Zone

Ausgehend von dem Mittelpunkt bildet man Vektoren zu benachbarten reziproken Gitterpunkten. Diese werden nach größer werdender Länge sortiert. Aufgrund der Symmetrie erhält man für jede Länge mehrere Vektoren. Danach erstellt man, ausgehend von den kürzesten Vektoren, Mittelsenkrechte bzw. im dreidimensionalen auf den Mittelpunkten eine Ebene, die den Vektor als Normalenvektor besitzt. Die

Ebenen, die von diesen Gebieten eingeschlossen werden, sind die 1., 2., ... Brillouin-Zonen. Das einfachste Beispiel ist der eindimensionale Fall:

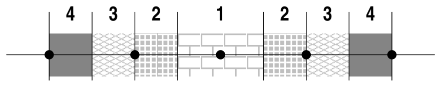


Abbildung 6.19: Konstruktion der ersten vier Brillouin-Zonen im eindimensionalen Fall.

Der zweidimensionale Fall ist ebenfalls anhand eines quadratischen Gitters im reziproken Raum dargestellt. Wird die Oberfläche der Fermikugel freier Elektronen in die erste Brillouin-Zone zurück transferiert, so verkompliziert sich die Gestalt der Fermifläche. Die Anteile der Elektronen in der 1., 2., 3., und vierten Brillouin-Zone haben in der ersten Brillouin-Zone die folgende Gestalt:

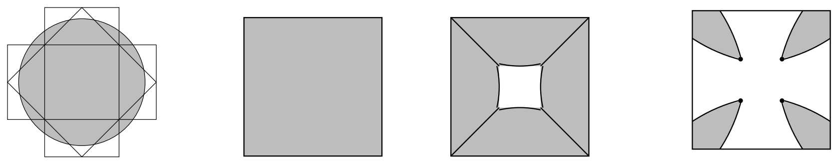
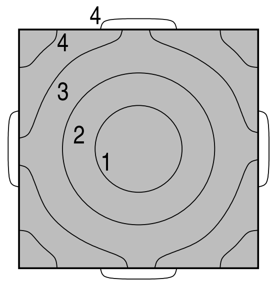


Abbildung 6.20: Elektronen innerhalb der Fermikugel. Darstellung anhand der ersten Brillouin-Zone.

In einem periodischen Potential verändert sich das Aussehen der Fermifläche aufgrund der Bragg-Reflexionen. Im vorausgegangenen zweidimensionalen Beispiel werden sich die Potentiallinien konstanter Energie so verändern, wie es nebenstehend angedeutet ist. An den Zonenrändern kommt es zur Bildung von Hälsen, wenn die Energie dicht genug am Zonenrand liegt. Die Stärke der Abweichung vom kreisförmigen Aussehen und das Ausmaß der Bildung der Hälse hängt maßgeblich davon ab, wie stark die Bragg Reflexion ist. Im Kupfer hat die Fermifläche nahezu ein kugelförmiges Aussehen, das nur durch Hälse an den Zonenrändern gestört wird. Diese Hälse sind Auswirkungen der Bragg-Reflexionen an den Zonengrenzen.



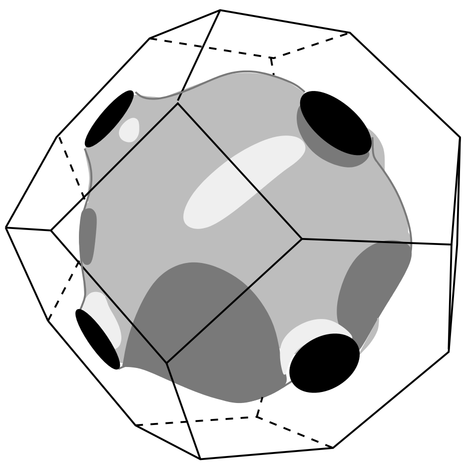


Abbildung 6.21: Fermifläche von Kupfer.

Nachdem nun erklärt wurde wie Fermiflächen aussehen, könnte man sich die Frage stellen, warum diese Flächen von so großer Bedeutung sind. Das **Drude-Modell** für Elektronen im Festkörper versagt z.B. bei der Beschreibung der spezifischen Wärme. Dies liegt darin begründet, daß nicht einmal die freien Elektronen im Leitungsband eines Metalls thermische Energie absorbieren können, wenn diese nicht innerhalb eines Energiebereiches von $k_B T$ in der Nähe der Fermifläche sind. Dies bedeutet, daß die meisten elektronischen Eigenschaften der Metalle von Elektronen bestimmt werden, die sich auf oder knapp unterhalb der Fermifläche befinden. Demzufolge sind die Elektronen nahe der Fermifläche, die relevanten Elektronen, wenn es um die Beschreibung der Eigenschaften von Metallen geht. Es gibt eine Reihe von Messungen, mit deren Hilfe Informationen über die Fermifläche gewonnen werden können. Detaillierte Beschreibungen dieser Experimente finden sich in einschlägigen Festkörperphysikbänden :-) An dieser Stelle sei nur eine Liste der Experimente gegeben und welche Eigenschaften durch sie bestimmt werden können.

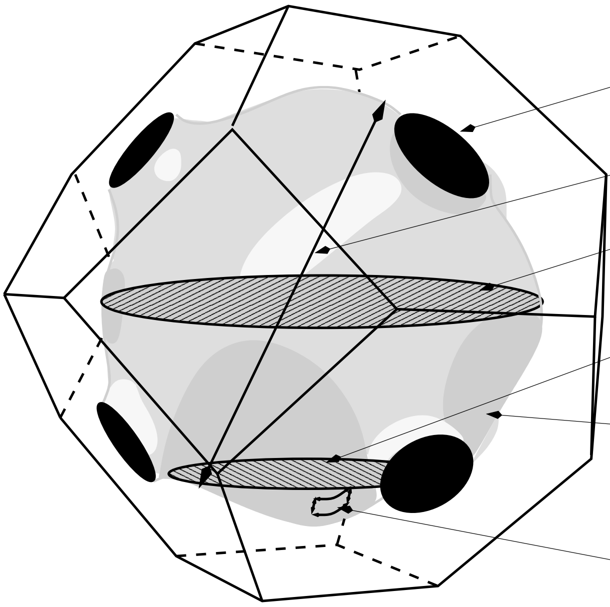


Abbildung 6.22: Eigenschaften der Fermifläche und mit welchen physikalischen Methoden diese untersucht werden können.

6.12 Leitfähigkeit von Elementen und Legierungen

Der Impuls eines freien Elektrons hängt mit seinem Wellenvektor über $\vec{p} = m\vec{v} = \hbar\vec{k}$ zusammen. Hierin wird das Elektron sowohl als Teilchen $(m \cdot \vec{v})$ als auch als Welle $(\hbar \cdot \vec{k})$ beschrieben, die den Kristall in alle Richtungen durchlaufen kann. In einem elektrischen Feld $\vec{E}$ und einem Magnetfeld $\vec{B}$ ist die Kraft $\vec{F}$ auf ein Elektron der Ladung $-e$ gleich

$$\vec{F} = -e\left[\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}\right]$$

mit dem Newtonschen Gesetz gilt

$$\vec{F} = m\frac{d\vec{v}}{dt} = \hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e\left[\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}\right]$$

Treten keine Stoßprozesse auf, so wird die Fermikugel im k-Raum durch ein äußeres elektrisches Feld gleichförmig verschoben. Eine Integration über k liefert mit $B = 0$:

$$k(t) - k(0) = -e\vec{E}\frac{t}{\hbar}$$

Wird das Feld zur Zeit $t = 0$ an ein Elektronengas angelegt, das die Fermikugel mit dem Mittelpunkt um Ursprung des k-Raumes ausfüllt, so verschiebt sich die Kugel. Diese Bewegung führt nach einer Zeit t zu einem neuen Mittelpunkt am Ort:

$$\delta k = -e\vec{E}\frac{t}{\hbar}$$

Die Fermikugel wird hierbei als Ganzes verschoben! Dies führt zu einem elektrischen Strom. δk kann jedoch nicht beliebig groß werden, da es Wechselwirkungen zwischen den Elektronen und den Rumpfatomen bzw. Störungen des periodischen Gitterpotentials gibt. Dies führt unter anderem zur Streuung der Elektronenwellen oder zur Umbesetzung von Quantenzuständen. Infolge der Stöße zwischen den Elektronen und den Verunreinigungen, Gitterfehler, Phononen, etc., kann die Verschiebung der Fermikugel in einem elektrischen Feld als stationärer Zustand aufrecht erhalten werden. Bei einer mittleren Stoßzeit zwischen zwei Streuprozessen τ ist die Verschiebung der Fermikugel im stationären Zustand durch $\delta k = -e \cdot E \cdot \tau/\hbar$ gegeben. Der Gleichgewichtszustand ist $\vec{v} = -e \cdot \vec{E} \cdot \tau/m$.

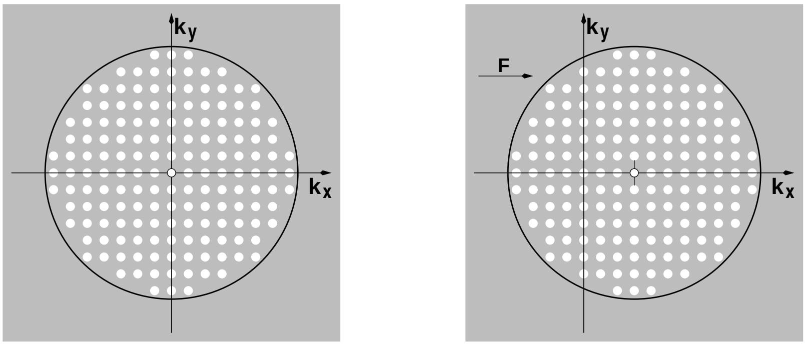


Abbildung 6.23: Die Fermikugel schließt im k-Raum die besetzten Zustände des Elektronengases ein. Unter einer äußeren Kraft (rechtes Teilbild) verschiebt sich die Fermikugel, da der k-Vektor aller Zustände zunimmt ($\delta k = F \cdot \tau/\hbar$).

Bei n Elektronen der Ladung $q = -e$ pro Volumeneinheit beträgt die elektrische Stromdichte in einem konstanten Feld $\vec{E}$

$$\vec{j} = nq\vec{v} = ne^2\tau\frac{\vec{E}}{m}$$

Diese Gleichung hat die Form des Ohmschen Gesetzes. Die elektrische Leitfähigkeit σ ist durch $\vec{j} = \sigma\vec{E}$ gegeben, also gilt

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

Der elektrische Widerstand ρ ist per Definition der Kehrwert der Leitfähigkeit

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2\tau}$$

Zum Nachdenken:

- Welche Bedeutung hat die Brillouin-Zone?
- Welche Informationen erhält man aus Untersuchungen der Brillouin-Zone?
- Welche Größen beeinflußen die elektrische Leitfähigkeit?
- Wie kann die Bewegung der besetzten Zustände innerhalb der Fermikugel bei angelegter Spannung beschrieben werden?