

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Periodische Strukturen	5
2.1	Kristall-Struktur, Bravais-Gitter, Wigner-Seitz-Zelle	5
2.1.1	Kristallisation von Festkörpern	5
2.1.2	Kristall-System und Kristall-Gitter	6
2.1.3	Symmetrie-Gruppe der Kristall-Systeme	10
2.1.4	Bravais-Gitter, primitive Einheitszelle und Wigner-Seitz-Zelle	11
2.1.5	Kristall-Strukturen	15
2.2	Das reziproke Gitter, Brillouin-Zone	17
2.3	Periodische Funktionen	20
2.4	Aufgaben zu Kapitel 2	23
3	Separation von Gitter- und Elektronen-Dynamik	25
3.1	Der allgemeine Festkörper-Hamilton-Operator	25
3.2	Adiabatische Näherung (Born-Oppenheimer-Näherung)	27
3.3	Bindung und effektive Kern-Kern-Wechselwirkung	32
3.4	Aufgaben zu Kapitel 2	38
4	Gitterschwingungen (Phononen)	41
4.1	Harmonische Näherung, dynamische Matrix und Normalkoordinaten	41
4.2	Klassische Bewegungsgleichungen	44
4.3	Periodische oder Born-von-Kármán-Randbedingungen	47
4.4	Quantisierte Gitterschwingungen und Phononen-Dispersionsrelationen	51
4.5	Thermodynamik der Gitterschwingungen (Phononen), Debye- und Einstein-Modell	54

4.6	Phononen-Spektren und -Zustandsdichten	62
4.6.1	Beispiel: Einfach kubisches Gitter	63
4.6.2	Phononen-Zustandsdichte	66
4.7	Grenzfall großer Wellenlänge	73
4.7.1	Akustische Phononen und elastische Wellen	73
4.7.2	Langwellige optische Phononen und elektromagnetische Wellen, Polariton	78
4.8	(Neutronen-)Streuung an Kristallen (Phononen), Debye-Waller-Faktor	82
4.9	Anharmonische Korrekturen	88
4.10	Aufgaben zu Kapitel 4	90
5	Nicht wechselwirkende Elektronen im Festkörper	101
5.1	Elektron im periodischen Potential, Bloch-Theorem	102
5.2	Näherung fast freier Elektronen	108
5.3	Effektiver Massentensor, Gruppengeschwindigkeit und $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Störungsrechnung	114
5.4	Modell starker Bindung (Tight-binding-Modell), Wannier-Zustände	118
5.5	Grundideen von numerischen Methoden zur Berechnung der elektronischen Bandstruktur	126
5.5.1	Zellenmethode	126
5.5.2	Entwicklung nach ebenen Wellen	129
5.5.3	APW-(„Augmented Plane Waves“-)Methode	129
5.5.4	Green-Funktions-Methode von Korringa, Kohn und Rostoker, KKR-Methode	131
5.5.5	OPW-(„orthogonalized plane waves“-)Methode	133
5.5.6	Pseudopotential-Methode	134
5.6	Elektronische Klassifikation von Festkörpern	136
5.7	Elektronische Zustandsdichte und Fermi-Fläche	141
5.8	Quantenstatistik und Thermodynamik der Festkörper-Elektronen .	148
5.9	Statistik der Elektronen und Löcher in Halbleitern	155
5.10	Aufgaben zu Kapitel 5	160
6	Elektron-Elektron-Wechselwirkung	169
6.1	Besetzungszahldarstellung („2. Quantisierung“) für Fermionen . .	170
6.2	Modelle wechselwirkender Elektronensysteme in der Festkörperphysik	178
6.3	Hartree-Fock-Näherung	185
6.3.1	Herleitung aus dem Ritzschen Variationsverfahren	185
6.3.2	Herleitung aus einem Minimal-Prinzip für das großkanonische Potential	193
6.4	Homogenes Elektronengas in Hartree-Fock-Näherung	198
6.5	Grundideen der Dichte-Funktional-Theorie	205

6.6	Elementare Theorie der statischen Abschirmung	214
6.6.1	Thomas-Fermi-Theorie der Abschirmung	215
6.6.2	Lindhard-Theorie der Abschirmung	218
6.6.3	Statische Abschirmung in Halbleitern	221
6.7	Anregungen im homogenen Elektronengas, Plasmonen	223
6.8	Exzitonen in Halbleitern	230
6.9	Quasi-Teilchen und Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeit	238
6.10	Aufgaben zu Kapitel 6	241
7	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	253
7.1	Hamilton-Operator der Elektron-Phonon-Wechselwirkung	253
7.2	Renormierung der effektiven Elektronen-Masse	259
7.3	Abschirmeffekte auf Phononen-Dispersion und Elektron-Phonon-Wechselwirkung	261
7.4	Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Ionen-Kristallen	266
7.5	Das Polaron	269
7.6	Aufgaben zu Kapitel 7	272
8	Lösungen zu den Übungsaufgaben	275
8.1	Lösung der Aufgaben zu Kapitel 2	275
8.2	Lösung der Aufgaben zu Kapitel 3	281
8.3	Lösung der Aufgaben zu Kapitel 4	287
8.4	Lösung der Aufgaben zu Kapitel 5	319
8.5	Lösung der Aufgaben zu Kapitel 6	362
8.6	Lösung der Aufgaben zu Kapitel 7	396
	Literaturhinweise	405
	Sachverzeichnis	407