

Gerd Czocholl

---

# Theoretische Festkörperphysik

Von den klassischen Modellen  
zu modernen Forschungsthemen

Zweite, aktualisierte Auflage mit 140 Abbildungen

Übungsaufgaben mit vollständigen Lösungen im Internet unter  
[www.springer.de](http://www.springer.de) → Buchkatalog → 3-540-20824-0



Springer

Professor Dr. Gerd Czycholl  
Universität Bremen  
Institut für Theoretische Physik  
Kufsteiner Strasse  
28359 Bremen, Deutschland  
e-mail: czycholl@physik.uni-bremen.de

---

Die erste Auflage erschien bei Friedr. Vieweg & Sohn

---

ISBN 3-540-20824-0 Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek.

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland vom 9. September 1965 in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

Springer-Verlag ist ein Unternehmen von Springer Science+Business Media

[springer.de](http://springer.de)

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2004  
Printed in Germany

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Satz: Druckvorlage vom Autor erstellt  
Einbandgestaltung: *design & production* GmbH, Heidelberg

Gedruckt auf säurefreiem Papier  
SPIN: 10981061 56/3141/jl - 5 4 3 2 1 0

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Periodische Strukturen</b>	<b>3</b>
1.1	Kristallstruktur, Bravais-Gitter, Wigner-Seitz-Zelle . . . . .	3
1.1.1	Kristallisation von Festkörpern . . . . .	3
1.1.2	Kristall-System und Kristall-Gitter . . . . .	4
1.1.3	Symmetriegruppe der Kristall-Systeme . . . . .	6
1.1.4	Bravais-Gitter, primitive Einheitszelle und Wigner-Seitz-Zelle . . . . .	7
1.1.5	Kristall-Strukturen . . . . .	9
1.2	Das reziproke Gitter, Brillouin-Zone . . . . .	12
1.3	Periodische Funktionen . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Separation von Gitter- und Elektronen-Dynamik</b>	<b>17</b>
2.1	Der allgemeine Festkörper-Hamilton-Operator . . . . .	17
2.2	Adiabatische Näherung (Born-Oppenheimer-Näherung) . . . . .	19
2.3	Bindung und effektive Kern-Kern-Wechselwirkung . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Gitterschwingungen (Phononen)</b>	<b>28</b>
3.1	Harmonische Näherung, dynamische Matrix und Normalkoordinaten . . . . .	28
3.2	Klassische Bewegungsgleichungen . . . . .	30
3.3	Periodische oder Born-von-Kármán-Randbedingungen . . . . .	33
3.4	Quantisierte Gitterschwingungen . . . . .	36
3.5	Thermodynamik der Gitterschwingungen . . . . .	39
3.6	Phononen-Spektren und -Zustandsdichten . . . . .	46
3.6.1	Beispiel: Einfach kubisches Gitter . . . . .	46
3.6.2	Phononen-Zustandsdichte . . . . .	49
3.7	Grenzfall großer Wellenlänge . . . . .	55
3.7.1	Akustische Phononen und elastische Wellen . . . . .	55
3.7.2	Langwellige optische Phononen und elektromagnetische Wellen, Polariton . . . . .	59
3.8	(Neutronen-)Streuung an Kristallen (Phononen), Debye-Waller-Faktor . . . . .	62
3.9	Anharmonische Korrekturen . . . . .	68
<b>4</b>	<b>Nicht wechselwirkende Elektronen im Festkörper</b>	<b>69</b>
4.1	Elektron im periodischen Potential, Bloch-Theorem . . . . .	70
4.2	Näherung fast freier Elektronen . . . . .	75
4.3	Effektiver Massentensor, Gruppengeschwindigkeit und $kp$ -Störungsrechnung . . . . .	80
4.4	Modell starker Bindung (Tight-Binding-Modell), Wannier-Zustände . . . . .	83
4.5	Numerischen Methoden zur Berechnung der elektronischen Bandstruktur . . . . .	90
4.5.1	Zellenmethode . . . . .	90
4.5.2	Entwicklung nach ebenen Wellen . . . . .	92
4.5.3	APW-(„Augmented Plane Waves“-)-Methode . . . . .	93

4.5.4	Greenfunktions-Methode von Korringa, Kohn und Rostoker, KKR-Methode . . . . .	94
4.5.5	OPW-(„orthogonalized plane waves“-)Methode . . . . .	96
4.5.6	Pseudopotential-Methode . . . . .	97
4.6	Elektronische Klassifikation von Festkörpern . . . . .	99
4.7	Elektronische Zustandsdichte und Fermi-Fläche . . . . .	102
4.8	Quantenstatistik und Thermodynamik der Festkörper-Elektronen . . . . .	106
4.9	Statistik der Elektronen und Löcher in Halbleitern . . . . .	113
<b>5</b>	<b>Elektron-Elektron-Wechselwirkung</b>	<b>117</b>
5.1	Besetzungszahldarstellung („2.Quantisierung“) für Fermionen . . . . .	117
5.2	Modelle wechselwirkender Elektronensysteme . . . . .	124
5.3	Hartree-Fock-Näherung . . . . .	129
5.3.1	Herleitung aus dem Ritzschen Variationsverfahren . . . . .	130
5.3.2	Herleitung aus einem Minimal-Prinzip für das großkanonische Potential . . . . .	134
5.4	Homogenes Elektronengas in Hartree-Fock-Näherung . . . . .	139
5.5	Elementare Theorie der statischen Abschirmung . . . . .	144
5.5.1	Thomas-Fermi-Theorie der Abschirmung . . . . .	144
5.5.2	Lindhard-Theorie der Abschirmung . . . . .	146
5.5.3	Statische Abschirmung in Halbleitern . . . . .	149
5.6	Anregungen im homogenen Elektronengas, Plasmonen . . . . .	151
5.7	Exzitonen in Halbleitern . . . . .	156
5.8	Grundideen der Dichtefunktional-Theorie . . . . .	163
5.9	Quasi-Teilchen und Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeit . . . . .	170
<b>6</b>	<b>Elektron-Phonon-Wechselwirkung</b>	<b>173</b>
6.1	Hamilton-Operator der Elektron-Phonon-Wechselwirkung . . . . .	173
6.2	Renormierung der effektiven Elektronen-Masse . . . . .	177
6.3	Abschirmeffekte auf Phononen-Dispersion und Elektron-Phonon-Wechselwirkung . . . . .	179
6.4	Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Ionen-Kristallen . . . . .	184
6.5	Das Polaron . . . . .	186
<b>7</b>	<b>Elektronischer Transport in Festkörpern</b>	<b>189</b>
7.1	Einfache phänomenologische Vorstellungen . . . . .	189
7.1.1	Das Drude-Modell für die statische Leitfähigkeit von Metallen . . . . .	189
7.1.2	Drude-Modell für metallischen Transport im Magnetfeld . . . . .	190
7.1.3	Zwei Ladungsträgersorten, Magnetowiderstand . . . . .	193
7.1.4	Phänomenologische Theorie der Wärmeleitfähigkeit . . . . .	194
7.2	Relationen zwischen den Transportkoeffizienten . . . . .	196
7.3	Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit-Näherung . . . . .	200
7.4	Widerstand von Metallen durch Streuung . . . . .	206
7.4.1	Streuung an Störstellen . . . . .	206
7.4.2	Streuung an Phononen . . . . .	209
7.5	Temperaturabhängigkeit des Widerstands von Halbleitern . . . . .	213
7.6	Lineare Response Theorie . . . . .	217
7.7	Elektrische Leitfähigkeit in linearer Response-Theorie, Kubo-Formel . . . . .	221
7.8	Störstellenstreuung im Kubo-Formalismus . . . . .	228

7.9	Weiteres zum Transport in Festkörpern . . . . .	233
<b>8</b>	<b>Optische (bzw. dielektrische) Eigenschaften von Festkörpern</b>	<b>236</b>
8.1	Makroskopische Beschreibung . . . . .	236
8.2	Einfache mikroskopische Modelle . . . . .	240
8.2.1	Reflexionskoeffizient von Metallen im Drude-Modell . . . . .	240
8.2.2	Boltzmann-Gleichung in Relaxationszeit-Näherung, anomaler Skin-Effekt . . . . .	242
8.3	Mikroskopische Theorie der frequenzabhängigen Dielektrizitätskonstanten . . . . .	246
8.4	Optische Eigenschaften von Halbleitern . . . . .	250
8.5	Polaritonen . . . . .	252
8.5.1	Quantisierung des elektromagnetischen Feldes . . . . .	254
8.5.2	Elektronen in Wechselwirkung mit dem quantisierten Strahlungsfeld . . . . .	257
8.5.3	Das Exziton-Polariton . . . . .	258
<b>9</b>	<b>Störung der Gitter-Periodizität</b>	<b>261</b>
9.1	Oberflächen . . . . .	262
9.2	Störstellen . . . . .	267
9.3	Ungeordnete Systeme . . . . .	270
9.3.1	Die Coherent-Potential-Approximation (CPA) . . . . .	273
9.3.2	Lokalisierung . . . . .	276
9.4	Inhomogene Halbleitersysteme . . . . .	279
<b>10</b>	<b>Festkörper im äußeren Magnetfeld</b>	<b>283</b>
10.1	Ankopplung von Magnetfeldern, Dia- und Paramagnetismus . . . . .	283
10.2	Paramagnetismus lokalisierter magnetischer Momente . . . . .	288
10.3	Pauli-Paramagnetismus von Leitungselektronen . . . . .	290
10.4	Landau - Diamagnetismus freier Elektronen . . . . .	291
10.5	Der De-Haas-van-Alphen-Effekt . . . . .	295
10.6	Der Quanten-Hall-Effekt . . . . .	299
10.7	Überblick über weitere im starken Magnetfeld beobachtbare Effekte . . . . .	304
<b>11</b>	<b>Supraleitung</b>	<b>306</b>
11.1	Zusammenstellung der wichtigsten experimentellen Befunde . . . . .	306
11.2	Attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung . . . . .	310
11.3	Cooper-Paare . . . . .	314
11.4	BCS - Theorie . . . . .	317
11.5	Stromtragender Zustand in der BCS-Theorie . . . . .	326
11.6	Elektrodynamik der Supraleiter, London-Gleichungen . . . . .	329
11.7	Ginzburg-Landau-Theorie . . . . .	332
11.8	Tunneleffekte mit Supraleitern . . . . .	339
11.8.1	Ein-Elektronen-Tunneln . . . . .	339
11.8.2	Tunneln von Cooper-Paaren, Josephson-Effekt . . . . .	341
11.9	Überblick über weitergehende Aspekte der Supraleitungs-Theorie . . . . .	343

<b>12 Kollektiver Magnetismus</b>	<b>349</b>
12.1 Die Austausch-Wechselwirkung . . . . .	349
12.2 Das Heisenberg-Modell und verwandte Gitter-Modelle . . . . .	353
12.3 Molekularfeld - Näherung für das Heisenberg-Modell . . . . .	356
12.4 Spinwellen (Magnonen), Holstein-Primakoff-Transformation . . . . .	360
12.5 Band-Magnetismus . . . . .	366
12.6 Hubbard-Modell und antiferromagnetisches Heisenberg-Modell . . . . .	369

<b>Empfehlenswerte Literatur zur Festkörpertheorie</b>	<b>374</b>
--	------------

<b>Sachwortverzeichnis</b>	<b>375</b>
----------------------------	------------

Übungsaufgaben mit Lösungen, eine ergänzte Literaturliste sowie Korrekturen zur 1. Auflage finden Sie unter [www.springer.de/3-540-20824-0](http://www.springer.de/3-540-20824-0).