

Gerd Czycholl

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 → 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

© 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

0	Einleitung	1
1	Periodische Strukturen	3
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
2	Separation von Gitter- und Elektronen-Dynamik	17
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
3	Gitterschwingungen (Phononen)	28
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
4	Nicht wechselwirkende Elektronen im Festkörper	69
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
5	Elektron-Elektron-Wechselwirkung	117
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
6	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	173
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
7	Elektronischer Transport in Festkörpern	189
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
8	Optische (bzw. dielektrische) Eigenschaften von Festkörpern	236
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
9	Störung der Gitter-Periodizität	261
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
10	Festkörper im äußeren Magnetfeld	283
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
11	Supraleitung	306
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

12 Kollektiver Magnetismus	349
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

Empfehlenswerte Literatur zur Festkörpertheorie	374
--	------------

Sachwortverzeichnis	375
----------------------------	------------

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