

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	1
<u>1. Beschreibung der Struktur der kondensierten Materie</u>	4
1.1. Ordnung und Unordnung	4
1.2. Geometrische Beschreibung des dreidimensional-periodischen Kristalls	8
1.2.1. Räumliche Periodizität als Translationssymmetrie	8
1.2.2. Die sieben Kristallsysteme	12
1.2.3. Die 14 Bravais-Gitter	21
1.2.4. Einfache Beispiele zur Beschreibung von Kristallstrukturen mit Hilfe der Bravais-Gitter	24
1.2.5. Die Wigner-Seitz-Zelle	32
1.2.6. Die 32 kristallographischen Punktgruppen	34
1.2.7. Die 230 kristallographischen Raumgruppen	40
1.3. Beschreibung der Struktur eines amorphen Körpers	44
1.3.1. Die Paarkorrelationsfunktion	44
1.3.2. Kleiner mathematischer Exkurs: Autokorrelation und Paarkorrelation	49
<u>2. Strukturbestimmung durch kohärent-elastische Streuung</u>	55
2.1. Der Begriff der kohärent-elastischen Streuung und der Streudichte	55
2.1.1. Kohärente und inkohärente, elastische und inelastische Streuung	55
2.1.2. Thomson-Streuung als Beispiel kohärent-elastischer Streuung	61
2.1.3. Die erste Born'sche Näherung und die Fourierbeziehung	64
2.1.4. Thomson-Streuung an einem Atom	69
2.2. Zur Problematik der Strukturbestimmung mit Hilfe der Fourierbeziehung	72
2.2.1. Das Phasenproblem	72
2.2.2. Das Problem der Auflösung	73
2.2.3. Zur Überwindung des Phasen- und des Auflösungsproblems	75

II

2.3. Die Geometrie der Streuung an periodischen Strukturen	78
2.3.1. Der reziproke Raum und das reziproke Gitter	78
2.3.2. Dreidimensional-periodische Strukturen	82
2.3.3. Reduzierte Dimensionalität der Periodizität	85
2.4. Streuung an beliebigen Anordnungen von Atomen	88
2.4.1. Mathematische Hilfsmittel	88
2.4.2. Die Streuung an einer beliebigen statistisch homogenen Struktur	93
2.4.3. Die Streuung an einer dreidimensional periodischen Anordnung von Atomen	97
<u>3. Die thermische Bewegung im festen Körper</u>	102
3.1. Beispiele zur experimentellen Evidenz für die thermische Bewegung	102
3.1.1. Der Debye-Waller-Faktor	102
3.1.2. Brillouin-Streuung	105
3.1.3. Beobachtungen über die spezifische Wärme von Kristallen	110
3.1.4. Beobachtungen über die spezifische Wärme von Gläsern	113
3.1.5. Beobachtungen über die Molwärme einer einfachen Flüssigkeit	114
3.2. Die ersten quantenmechanischen Theorien der spezifischen Wärme fester Körper	115
3.2.1. Das Modell von Einstein	115
3.2.2. Das Modell von Debye	117
3.3. Gitterschwingungen in der harmonischen Approximation	125
3.3.1. Schwingungen einer eindimensionalen periodischen Struktur	125
3.3.2. Schwingungen von zwei- und dreidimensional periodischen Strukturen	137
3.3.3. Zum Begriff des Phonons und des Kristallimpulses	144
3.4. Kohärente Streuung am thermisch schwingenden Kristall	146
3.5. Extrem anharmonische Systeme: Gläser bei tiefen Temperaturen	153
3.5.1. Die spezifische Wärme	153
3.5.2. Ultraschallabsorption	159
3.6. Die elektrische Funktion eines Ionenkristalls	162

4. Elektronenzustände im Kristall	169
4.1. Die Einelektron-Näherung: Einteilung	169
4.1.1. Die Einelektron-Näherung beim Atom	169
4.1.2. Die Einelektron-Näherung beim Kristall	173
4.2. Das Gas unabhängiger, freier Elektronen: Das Fermi-Gas	175
4.2.1. Die Einelektron-Zustände	175
4.2.2. Der Grundzustand des Fermi-Gases	177
4.2.3. Die Fermi-Dirac-Verteilung	179
4.2.4. Diskussion der Fermi-Dirac-Verteilung	184
4.2.5. Thermodynamische Eigenschaften des entarteten Fermi-Gases	189
4.2.6. Thermodynamische Betrachtungen über das chemische Potential	194
4.3. Einelektron-Zustände für ein schwaches periodisches Potential	200
4.3.1. Kleiner Exkurs über zeitunabhängige Störungen	200
4.3.2. Fast-freie Elektronen: Das periodische Potential als schwache Störung	206
4.3.3. Brillouin-Zonen	212
4.4. Einelektron-Zustände für ein beliebiges periodisches Potential	215
4.4.1. Das Theorem von Bloch	215
4.4.2. Diskussion der Bloch-Zustände	217
4.4.3. Überlappende Energiebänder	222
4.4.4. Die Eigenwertdichte $\rho(E)$	223
4.5. Von Atomniveaux zu Energiebändern	226
4.5.1. Die nullte Näherung	226
4.5.2. Die erste Näherung für die Energie $E_n(\vec{k})$	231
4.5.3. Beispiele zur Berechnung von Energiebändern in erster Näherung	236
4.6. Die Besetzung der Einelektronenzustände	243
4.6.1. Zur Anwendung des Pauli-Prinzips	243
4.6.2. Die Besetzung der Einelektronenzustände bei $T=0$	246
4.6.3. Die Besetzung der Einelektronenzustände bei endlicher Temperatur	250
4.6.4. Die Fermi-Fläche	254

<u>5. Das halbklassische Modell des elektronischen Ladungstransportes</u>	265
5.1. Die halbklassische Bewegungsgleichung der Elektronen	266
5.1.1. Wellenpakete	266
5.1.2. Die Änderung der Geschwindigkeit und des Impulses	269
5.1.3. Die effektive Masse der Ladungsträger	273
5.2. Ladungstransport und Leitfähigkeit	277
5.2.1. Die Relaxationszeit	277
5.2.2. Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit mit der Boltzmann-Gleichung	280
5.2.3. Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit von reinen Metallen	290
5.3. Elektronen und Löcher	295
5.3.1. Zum Zusammenhang zwischen Elektron und Loch	296
5.3.2. Elektronen und Löcher in Metallen	299
<u>6. Halbleiter</u>	303
6.1. Der Eigenhalbleiter	303
6.1.1. Elektronen und Löcher im Eigenhalbleiter	303
6.1.2. Die Leitfähigkeit des Eigenhalbleiters	309
6.2. Der dotierte Halbleiter	314
6.2.1. Donatoren und Akzeptoren	314
6.2.2. Die Besetzung der Niveaux beim dotierten Halbleiter	322
6.2.3. Halbleiter-Typen	328
6.2.4. Diskussion einfacher Extremfälle	330
6.3. Inhomogene Halbleiter	334
6.3.1. Der p_n -Übergang im thermischen Gleichgewicht	334
6.3.2. Der p_n -Gleichrichter	341
<u>7. Die Bindungsenergie der kondensierten Materie</u>	344
7.1. Zum Begriff der Bindungsenergie	344

7.2. Edelgaskristalle und van der Waals'sche Bindung	346
7.2.1. Der Ursprung der van der Waals'schen Anziehung	347
7.2.2. Abstossung und Lennard-Jones - Potential	352
7.2.3. Die Bindungsenergie des Edelgaskristalls	354
7.3. Ionenkristalle	359
7.3.1. Die potentielle Energie für ein einfaches Modell	359
7.3.2. Die Berechnung der Coulomb-Energie	362
7.3.3. Kompressibilität und Born'sche Abstossung	366
7.3.4. Experimentelle Bestimmung der Bindungsenergie	369
7.4. Kovalente Bindung	372
7.5. Metallische Bindung	376
<u>8. Kooperative Phänomene</u>	381
8.1. Thermodynamisches Gleichgewicht und Nicht-Gleichgewicht	381
8.2. Beispiele zur Phänomenologie der Phasenumwandlungen	386
8.2.1. Gas, Flüssigkeit und Kristall im thermodynamischen Gleichgewicht	386
8.2.2. Bedingung für die Koexistenz zweier Phasen im thermodynamischen Gleichgewicht	394
8.2.3. Kondensation am kritischen Punkt C	396
8.2.4. Die binäre Flüssigkeit: Mischung und Entmischung	400
8.2.5. Ordnung und Unordnung im β -Messing	406
8.2.6. Ferroelektrizität	410
8.3. Universelle Aspekte	414
8.4. Die einfachste Theorie der kooperativen Phänomene	418
8.4.1. Das Modell von van der Waals	418
8.4.2. Die Approximation des mittleren Feldes bei einem Ferroelektrikum	423
8.4.3. Theorie des einachsigen Ordnung-Unordnung Ferroelektrikums in der Approximation des mittleren Feldes	426

VI

8.4.4. Ein einfaches Modell der binären Mischung	438
8.4.5. Zur Unzulänglichkeit der Approximation des mittleren Feldes	443
8.5. Zustände ausserhalb des thermodynamischen Gleichgewichts	445
Nachwort	450