

1	Festkörpermodelle	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Translationsgitter	3
1.2.1	Zweidimensionaler Fall	4
1.2.2	Dreidimensionaler Fall	7
1.3	Beugung und Streuung: Experimentelle Befunde	9
1.4	Das direkte Gitter	11
1.4.1	Elementarzelle im direkten Gitter	11
1.4.2	Die kubisch dichteste Kugelpackung	17
1.5	Das reziproke Gitter	18
1.5.1	Konstruktion des zum <i>fcc</i> -Gitter reziproken Gitters	20
1.5.2	Einheitszellen im Reziproken Gitter: Brillouin-Zone	21
1.6	Streuung von Röntgenstrahlen im reziproken Gitter	22
1.7	Vergleich der Verfahren	25
1.7.1	Experimenteller Vergleich	25
1.7.2	Theoretischer Vergleich	26
1.7.3	Braggsche Gleichung aus der Laueschen Gleichung	27
1.8	Strukturfaktor einer Basis	28
1.9	Intensität der gestreuten Röntgenstrahlung	29
1.10	Vergleich mit anderen Verfahren	31
1.11	Abschließende Bemerkung	32
1.12	Aufgaben und Lösungen	33
1.12.1	Gitterkonstanten und Packungsdichte	33
1.12.2	Direktes und reziprokes Gitter	37
1.12.3	Brillouin-Zonen	40
1.12.4	Kreisfunktionen	41
2	Der kondensierte Zustand	45
2.1	Einleitung	45
2.2	Molekülkristall	47
2.2.1	Energiebetrachtung	48
2.3	Ionenkristall	50
2.3.1	Energiebetrachtung	50
2.4	Metall	56
2.5	Kovalenter Kristall	56
2.6	Atom- und Ionenradius	57
2.7	Abschließende Bemerkung	57
2.8	Aufgaben und Lösungen	58

3	Dynamik der Gitter	65
3.1	Einleitung	65
3.2	Gitterschwingungen	67
3.2.1	Lineares Gitter mit einem Atom in der Elementarzelle . .	67
3.2.1.1	Langwelliger Grenzfall.	72
3.2.1.2	An der Zonengrenze.	72
3.2.2	Lineares Gitter mit zwei verschiedenen Atomen in der Elementarzelle	73
3.2.2.1	Langwelliger Grenzfall.	74
3.2.2.2	An der Zonengrenze.	75
3.2.2.3	Dispersionsverhalten für ausgezeichnete Massen- verhältnisse.	75
3.2.2.4	Longitudinaler optischer Zweig.	79
3.2.3	Die Dielektrische Funktion in Ionenkristallen	80
3.2.4	Zusammenfassung	84
3.3	Phononen	85
3.3.1	Einleitung	85
3.3.2	Zustandssumme und Verteilungsfunktion	85
3.3.3	Energie der Phononen	89
3.3.4	Der K -Raum	90
3.4	Zustandsdichte	91
3.4.1	Der eindimensionale Fall	92
3.4.1.1	Lineare Kette mit offenen Enden.	92
3.4.1.2	Lineare Kette mit verbundenen Enden.	94
3.4.2	Der höherdimensionale Fall	96
3.5	Die spezifische Wärme bei tiefen Temperaturen	98
3.5.1	Differenz zwischen c_p und c_v	98
3.5.2	Einstein-Modell	99
3.5.3	Debye-Modell	100
3.5.3.1	Grenzfall tiefer Temperaturen.	103
3.5.3.2	Grenzfall hoher Temperaturen.	104
3.5.4	Vergleich	104
3.6	Verteilungsfunktion nach Bose/Einstein	107
3.7	Lichtstreuung an Phononen	108
3.7.1	Impuls des Phonons	108
3.7.2	Methoden	109
3.8	Abschließende Bemerkung	114
3.9	Aufgaben und Lösungen	115
4	Metalle	121
4.1	Einleitung	121
4.2	Elektrische Leitfähigkeit und Drudesche Theorie	121
4.2.1	Ohmsches Gesetz	121
4.3	Bindungstheoretische Annäherung	124
4.4	Das freie Elektronenmodell (FEM)	127
4.5	Zustandsdichte	128

4.5.1	Zustandsdichte im reziproken Raum	129
4.5.2	Eindimensionaler Fall	130
4.5.3	Zweidimensionaler Fall	131
4.5.4	Dreidimensionaler Fall	133
4.5.5	Das Modell freier Elektronen und die Zustandsdichte . . .	134
4.6	Thermodynamik des freien Elektronengases	139
4.6.1	Mittlere Energie der Elektronen	139
4.6.2	Elektronendruck	140
4.6.3	Chemisches Potential	140
4.6.4	Kontaktpotentiale	141
4.6.5	Resümee und Fortentwicklung des Drudeschen Modells . .	142
4.7	Das Freie Fermi-Gas	143
4.7.1	Fermi-Dirac-Verteilung	143
4.7.1.1	Zustandssumme und Zustandsdichte.	146
4.7.1.2	Chemisches Potential und Fermienergie.	147
4.7.2	Spezifische Wärme	150
4.7.3	Elektrische Leitfähigkeit	152
4.7.3.1	Verschiebung der Fermi-Kugel.	152
4.7.3.2	Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit. . . .	154
4.7.4	Wärmeleitung in Metallen	157
4.8	Entartung	159
4.8.1	Translatorische Bewegung	160
4.8.2	Elektronen	162
4.9	Bänder	163
4.10	Dielektrische Funktion nach Thomas und Fermi	165
4.10.1	Abschirmlänge	165
4.10.2	Atomformfaktoren und Dielektrische Funktion	167
4.10.3	Reihenentwicklung des Coulomb-Potentials	168
4.11	Elektronen im AC-Feld	170
4.12	Abschließende Bemerkung	172
4.13	Aufgaben und Lösungen	173
4.13.1	Unschärferelation	173
4.13.2	Freies Elektronenmodell (FEM)	173
4.13.3	Fermi-Energie und Zustandssumme	183
4.13.4	Zustandsdichte	187
4.13.5	Dielektrische Funktion	189

5 Optische Eigenschaften 191

5.1	Kontinuums-Theorie	191
5.1.1	Polarisation	192
5.1.2	Das lokale elektrische Feld und die Verschiebungspolarisation	194
5.1.3	Erweiterte Poisson-Gleichung	195
5.1.4	Bewegte influenzierte Ladungen	195
5.2	Frequenzabhängigkeit der Polarisierbarkeit	198
5.2.1	Elektronische Polarisation	199
5.2.1.1	Verhalten unterhalb der Eigenfrequenz.	199

5.2.1.2	Dispersion im Dielektrikum mit absorbierenden Zentren.	201
5.3	Dispersion im Metall	205
5.3.1	Die Parameter Brechungsindex und Dielektrizitätskonstante	206
5.3.2	Reflektivitäten in den einzelnen Bereichen	210
5.3.2.1	Niederfrequente Region (IR), $\nu < \omega$ (IR).	211
5.3.2.2	Feldstärke und Eindringtiefe.	213
5.3.2.3	Plasmafrequenz wird vergleichbar der Frequenz der Strahlung (IR – UV) und $\nu \leq \omega \leq \omega_P$	216
5.3.2.4	Eindringtiefe und Debye-Länge.	218
5.3.2.5	Plasmafrequenz ist klein gegen die Frequenz der Strahlung (VIS – UV).	219
5.3.3	Reflexionsverhalten der Münzmetalle	220
5.4	Abschließende Bemerkung	220
5.5	Aufgaben und Lösungen	221
6	Effekte im magnetischen Feld	231
6.1	Phänomenologie	231
6.1.1	Das magnetische Feld	231
6.1.2	Materie im Magnetfeld	232
6.1.2.1	Dia- und Paramagnetika.	232
6.1.2.2	Ferromagnetika.	235
6.1.2.3	Antiferromagnetika.	240
6.1.2.4	Kapitelaufteilung.	240
6.2	Diamagnetismus	240
6.2.1	Larmorfrequenz	240
6.2.2	Energieaufnahme im Magnetfeld	243
6.3	Paramagnetismus	245
6.4	Weitere magnetische Größen	247
6.5	Status der klassischen Theorie	248
6.6	Erster quantenmechanischer Ansatz: Das Zweiniveau-System	248
6.7	Eigenwertgleichung	251
6.7.1	Der Hamilton-Operator mit dem kanonischen Impuls	252
6.7.2	Bahnanteil des Paramagnetismus	253
6.7.3	Diamagnetismus	254
6.7.4	Spinanteil des Paramagnetismus	255
6.7.5	Zwischenstatus	256
6.7.6	Störungsrechnung 2. Ordnung	256
6.8	Effekte 1. Ordnung	257
6.8.1	Larmorscher Diamagnetismus	257
6.8.2	Langevinscher Paramagnetismus	257
6.8.2.1	Die Brillouin-Funktion.	259
6.8.2.2	Salze und das Kristallfeld.	261
6.8.3	Paulischer Paramagnetismus der Metalle	269
6.9	Effekte 2. Ordnung	271
6.10	Magnetische Zustandsgleichung	271

6.10.1	Adiabatische Entmagnetisierung	273
6.10.1.1	Absoluter Nullpunkt.	276
6.11	Resümee: Dia- und Paramagnetismus	277
6.12	Ferromagnetismus	278
6.12.1	Einleitung	278
6.12.2	Wechselwirkung zwischen magnetischen Dipolen	278
6.12.3	Zwischenresümee	282
6.12.4	Quantenmechanischer Ansatz	282
6.12.4.1	Einleitung.	282
6.12.4.2	Austauschwechselwirkung am Beispiel des H ₂ - Moleküls.	282
6.12.4.3	Wechselwirkung von zwei Spins.	285
6.12.4.4	Spinkopplung im Metall.	289
6.12.4.5	Das Austauschintegral in realen Metallen.	291
6.12.4.6	Band-Ferromagnetismus und das Kriterium von Stoner.	293
6.12.4.7	Ausrichtung der Weisschen Bezirke.	298
6.13	Antiferromagnetische Effekte	299
6.13.1	Superaustausch	299
6.13.2	GMR-Effekt	300
6.13.3	Ferrimagnetismus	301
6.14	Spektroskopie im Magnetfeld	303
6.14.1	Einleitung	303
6.14.2	NMR-Spektroskopie	304
6.14.2.1	Einführung.	304
6.14.2.2	Limitationen.	306
6.14.2.3	Qualitative Beschreibung des NMR-Prozesses.	308
6.14.2.4	Quantitative Betrachtung des NMR-Prozesses.	309
6.14.2.5	Übergänge zwischen den Termen.	317
6.14.2.6	Weitere Beispiele.	338
6.14.3	Einsame Elektronen im Magnetfeld	339
6.14.4	Elektronenspin-Resonanz	339
6.14.4.1	Hyperfeinstruktur.	342
6.14.4.2	Übergangsmetallkomplexe.	347
6.15	Abschließende Bemerkung	347
6.16	Aufgaben und Lösungen	348
6.16.1	Magnetismus	348
6.16.2	Drehimpuls und magnetisches Moment	351
6.16.3	Dia- und Paramagnetismus	354
6.16.4	Ferromagnetismus	359
6.16.5	ESR und NMR	361

7 Elektronen im realen Festkörper	365
7.1 Grenzen des Modells Freier Elektronen	365
7.2 Zonenschemata I	369
7.2.1 Zahl der Zustände	371
7.3 Das Modell fast freier Elektronen (NFE-Modell)	372
7.3.1 Elektronengas im Gitter positiver Ionen	372
7.3.2 Wellenfunktion im Gitter: 1. Approximation	374
7.3.2.1 Eindimensionales Metall: Das Kroghmannsche Salz.	375
7.4 Elektronenenergie im periodischen Feld eines realen Gitters . . .	376
7.4.1 Wechselwirkung der Elektronenwelle mit dem Gitterpotential	376
7.4.2 Modellpotentiale	379
7.5 Bloch-Theorem	382
7.5.1 Periodizität im direkten und im reziproken Gitter	385
7.6 Hauptgleichung von Bethe	386
7.7 Cosinus-Potential	390
7.7.1 Verknüpfung mit der Bragg-Gleichung	390
7.7.2 Bandlücke (Gap)	391
7.7.2.1 Auf der Grenze.	391
7.7.2.2 In der Nähe der Zonengrenze.	393
7.8 Zonenschemata II	393
7.8.1 Bandbreiten und Gapenergien	394
7.9 Rechteck-Potential	397
7.9.1 Direktes Gitter	398
7.9.1.1 Dispersionsrelation.	398
7.9.1.2 Grenzfälle.	401
7.9.1.3 Bandstruktur.	403
7.9.1.4 Dirac-Kamm.	403
7.9.1.5 Breite der verbotenen Bänder.	405
7.9.2 Reziprokes Gitter	407
7.10 Vergleich der beiden Modelle	409
7.11 Gitterstruktur und kinetische Energie	410
7.11.1 Effektive Masse	410
7.11.2 Fermikugel und Fermioberfläche	415
7.11.3 Konstruktion der Fermifläche	419
7.12 Zustandsdichte an den Band- und Zonengrenzen	420
7.13 Messungen der Fermi-Oberfläche	422
7.13.1 Röntgenstrahlen	423
7.13.2 Elektronen-Cyclotronresonanz	424
7.13.3 Halleffekt	427
7.14 Metall und Halbleiter	429
7.15 Legierungen	432
7.15.1 Elektronische Legierungen	432
7.16 Flüssige Metalle	433
7.17 Abschließende Bemerkung	434
7.18 Aufgaben und Lösungen	435

7.18.1	Brillouin-Zonen	435
7.18.2	Free Electron Model (FEM)	436
7.18.3	Nearly Free Electron-Modell (NFE-Modell)	439
7.18.4	Kronig-Penney-Potential	447
7.18.5	Hume-Rothery-Regeln	449
7.18.6	Das reziproke Gitter — da capo	451
8	Elektronenzustände und Pseudopotentiale	455
8.1	Einführung	455
8.2	Motivation des nicht-lokalen Pseudopotentials	456
8.3	Zellenmethode: Methode von Wigner und Seitz	458
8.4	tight-binding-Methode	461
8.4.1	Wellenfunktion	461
8.4.2	Eigenwerte der Energie	462
8.4.3	Eindimensionales Gitter	462
8.4.4	Zusammenfassung	463
8.5	OPWs	464
8.5.1	Einführung	464
8.5.2	Wellenfunktion	466
8.5.3	Eigenwerte der Energie	470
8.6	Pseudopotentiale	472
8.6.1	Cancellation Theorem von Cohen und Heine	472
8.6.2	Modellpotentiale	476
8.6.2.1	Potential von Ashcroft.	476
8.6.2.2	Potential von Heine und Abarenkow.	478
8.6.2.3	Resümee.	480
8.7	Abschließende Bemerkung	480
8.8	Aufgaben und Lösungen	481
9	Halbleiter	485
9.1	Elektrisches Verhalten	485
9.2	Ladungsträgerdichte und die Fermi-Energie	488
9.2.1	Der intrinsische Halbleiter	489
9.2.1.1	Effektive Zustandsdichte.	491
9.2.1.2	Effektive Masse.	494
9.2.1.3	Inversionsdichte.	496
9.2.2	Massenwirkungsgesetz der Halbleiter	498
9.2.2.1	Temperaturabhängigkeit des Bandgaps.	500
9.2.3	Extrinsische Halbleiter	500
9.2.3.1	Ladungsträgerdichte und Fermienergie.	506
9.2.3.2	Temperaturabhängigkeit der Fermienergie.	508
9.2.4	Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte	512
9.2.4.1	Extrinsische Region.	516
9.2.4.2	Kompensierte Halbleiter.	517
9.3	Elektrische Leitfähigkeit und Beweglichkeit	518
9.3.1	Intrinsische Halbleiter	518

9.3.1.1	Feldstärkeabhängigkeit der Beweglichkeit.	519
9.3.1.2	Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit. . .	521
9.3.2	Extrinsische Halbleiter	522
9.4	Ausgleichsprozesse in inhomogenen Systemen	523
9.4.1	Stationärer Fall	524
9.4.2	Zeitlich variable Dichte	525
9.4.3	Einstein-Relation	527
9.5	Hetero-Übergang I: Halbleiteroberflächen	530
9.6	Hetero-Übergang II: Metall-Halbleiter	533
9.6.1	n -Halbleiter: Gleichgewichtszustand	533
9.6.2	n -Halbleiter: Nichtgleichgewichtszustand	538
9.6.2.1	$W_m > W_{sc}$	538
9.6.2.2	$W_m < W_{sc}$	539
9.6.3	p -Halbleiter	540
9.7	Hetero-Übergang III: p - n -Übergänge	543
9.7.1	Thermisches Gleichgewicht: Qualitative Betrachtung . . .	543
9.7.1.1	Sicht der Elektronen.	543
9.7.1.2	Störstellennäherung.	544
9.7.2	Thermisches Gleichgewicht: Quantitative Betrachtung . .	547
9.7.2.1	Ladungsträgerdichte und Diffusionspotential. . .	547
9.7.2.2	Elektrisches Feld in der RLZ.	549
9.7.2.3	Elektrische Potentiale in der RLZ.	550
9.7.2.4	Diffusionspotential und Weite der RLZ.	551
9.7.2.5	Diffusions- und Driftströme.	552
9.7.3	Diode und äußeres Feld	553
9.7.3.1	Phänomenologische Beschreibung der Diode. . .	553
9.7.3.2	Diodencharakteristik im Bändermodell.	555
9.7.3.3	Weite der Raumladungszone.	556
9.7.3.4	Bänderschema der Flusspolung.	557
9.7.3.5	Bändermodell der Sperrpolung.	558
9.7.3.6	Shockley-Gleichung in der Näherung von Schottky. 559	
9.7.3.7	Shockley-Gleichung in der Herleitung von Shockley. 562	
9.7.3.8	Temperaturabhängigkeit des Sättigungsstroms. 565	
9.7.3.9	Temperaturabhängigkeit des Durchlass-Stroms. . 566	
9.7.3.10	Kapazität der RLZ.	567
9.8	Bandstrukturen	568
9.8.1	Krümmung der Bänder	568
9.8.2	Elementare Betrachtungen zur Bandstruktur	569
9.8.3	Bandstruktur eines direkten Halbleiters	572
9.8.4	Bandstruktur eines indirekten Halbleiters	574
9.8.5	Effektive Masse	575
9.8.6	Übergänge im direkten Halbleiter	577
9.8.6.1	Feldstärkeabhängigkeit der Beweglichkeit in GaAs. 577	
9.8.7	Übergänge im indirekten Halbleiter	579
9.8.8	Rekombination und Lebensdauer	582

9.8.8.1	Direkter Halbleiter.	582
9.8.8.2	Indirekter Halbleiter.	582
9.8.9	Exzitonen	582
9.9	Transparente leitfähige Oxide am Beispiel des Indiumoxids	584
9.9.1	Kristallstruktur	584
9.9.2	Bandstruktur	585
9.9.3	Elektrische Eigenschaften	586
9.9.4	Dotierung mit Sn^{4+}	586
9.9.5	Ausblick	588
9.10	Messungen	588
9.10.1	Widerstandsmessung	588
9.10.2	Kapazitätsspektroskopie	589
9.10.3	Photolumineszenz (PL)	590
9.10.4	FIR-Absorptionsspektroskopie	590
9.10.5	Brechungsindex	591
9.11	Metalle und Halbleiter	593
9.12	Abschließende Bemerkung	595
9.13	Aufgaben und Lösungen	595
10	Ausblick	615
11	Verwendete Symbole und Akronyme	617
	Literaturverzeichnis	623
	Namen- und Sachverzeichnis	631