Ergebnisse in der

Elektronen-theorie der Metalle

Methoden
Ideale und gestörte Kristalle
Meßgrößen

Herausgegeben von
P. Ziesche und G. Lehmann

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo

Ergebnisse in der Elektronentheorie der Metalle

Methoden · Ideale und gestörte Kristalle Meßgrößen

Herausgegeben von P. Ziesche und G. Lehmann

Mit Beiträgen von H. Eschrig, M. Hietschold, W. John, G. Lehmann, I. Mertig, E. Mrosan, G. Paasch, P. Rennert, R. Schöpke, M. Taut und P. Ziesche

Mit 190 Abbildungen und 40 Tabellen

Springer-Verlag
Berlin Heidelberg New York Tokyo 1983

herzlicher Dank. Seit 1974 werden die Ergebnisse dieser Symposien als Proceedings herausgegeben.

Zu Dank verpflichtet sind wir weiterhin Frau L. Wilhelm und Frau I. Schöpf für die Anfertigung der Reinschrift. Beim Korrekturlesen wurden wir von Frau Dr. I. Mertig, bei der Anfertigung des Sachverzeichnisses von den Herren Dr. G. Seifert, Dr. R. Schöpke und G. Gerbeth unterstützt. Besonders möchten wir die Familien der Autoren nennen, die durch ihre Geduld und Rücksichtnahme wesentlich zum Gelingen des Vorhabens beitrugen. Schließlich möchten wir dem Verlag für das erwiesene Entgegenkommen und die gute Zusammenarbeit sehr danken.

Dresden, Dezember 1982

P. Ziesche, G. Lehmann

Hinweise zum formalen Aufbau und zur Benutzung

Das Buch besteht aus Teilen ([0], [1], [2], . . .), diese aus Kapiteln ([1.1], [2.3], . . .), die wiederum (in der Regel) in Abschnitte ([1.1.1], [2.3.2], . . .) untergliedert sind.

Formeln werden innerhalb eines Kapitels (z. B. [4.1]) durchnumeriert ((1), (2), . . .), an anderen Stellen wird auf sie in der Form (4.1-1), (4.1-2), . . . Bezug genommen. Analoges gilt für die Anhänge [A 1], [A 2], . . . mit ihren Formeln (A 3-1), (A 7-2) usw.

Abbildungen und Tabellen werden kapitelweise numeriert und entsprechend Abb. 5.1-2, Abb. 9.3-5, Tab. 10.4-2 usw. zitiert.

Am Ende jedes Teils finden sich Literaturhinweise. Im Text wird auf sie in der Form . . . Brovman und Holas (74) . . . oder . . . Singwi u. a. (70) . . . oder . . . (Wigner u. Huntington (35) . . . verwiesen.

1.6. Lokalfeldkorrekturen 43
1.6.1. Mängel der Hartree-Abschirmung und Ausweg 43
1.6.2. Hubbard-Näherung 44
1.6.3. Der physikalisch-anschauliche Inhalt der Singwi-Näherung 44
1.6.4. Das effektive Feld in der Singwi-Näherung 46
1.6.5. Selbstkonsistente Lösung und Paarkorrelation 48
1.6.6. Plasmondispersion, Korrelationsenergie und Kompressibilität 52

1.7. Das inhomogene Elektronengas. Dichte-Funktional-Formalismus 56
1.7.1. Wechselwirkende Kristallelektronen 56
1.7.2. Die Energie als Funktional der Teilchendichte 58
1.7.3. Der Fall fast konstanter Elektronendichte 60
1.7.4. Thomas-Fermi-Näherung und ihre Erweiterung 60
1.7.5. Gradientenentwicklung 62
1.7.6. Effektive Einteilchengleichungen 66
1.7.7. Erweiterungen des Dichte-Funktional-Formalismus 69

1.8. Literatur 70

2. Kristallpotential (P. Rennert, G. Paasch) 74

2.1. Einteilchenzustände im Vielteilchensystem 74
2.1.1. Coulomb-Wechselwirkung und Vielteilchenproblem 74
2.1.2. Modell unkorrelierter Teilchen (Hartree-Fock-Verfahren) 75
2.1.3. Vielteilchentheorie der Bloch-Elektronen (H. Eschrig) 77

2.2. Austausch- und Korrelationspotential 80
2.2.1. Lokales Austausch- und Korrelationspotential 80
2.2.2. X_α-Methode 82

2.3. Konstruktion von Kristallpotentialen 85
2.3.1. Mattheiss-Konzept 85
2.3.2. Muffin-Tin-Konzept 86
2.3.3. Mattheiss-Potential 87
2.3.4. Renormiertes Atom 89

2.4. Quantitative Charakterisierung von Kristallpotentialen 91
2.4.1. Streuphasen und Charakteristika des Leitungsbandes 91
2.4.2. Einfluß der Potentialkonstruktion auf die Charakteristika des Leitungsbandes 93

2.5. Literatur 96

3. Pseudopotentiale und Bandstruktur einfacher Metalle (M. Taut) 98

3.1. Grundgedanken der Pseudopotentialtheorie 98

3.2. OPW-Pseudopotential und verwandte Arten 100
3.2.1. OPW-Pseudopotential 100
3.2.2. Verallgemeinertes Pseudopotential 102

3.3. Modellpotentiale für Ionen 104
3.3.1. Freie Ionen 104
3.3.2. Ionen im Festkörper 107

此为试读,需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com

3.4. Abschirmung nichtlokaler Potentiale . . . 108
3.4.1. Abgeschirmtes Kristallpotential . . . 108
3.4.2. Abgeschirmtes Potential eines Gitterbausteins . . . 110

3.5. Depletionladung . . . 111
3.5.1. Allgemeine Formel . . . 111
3.5.2. Spezialfälle . . . 112

3.6. Rumpfverschiebung und Fermi-Energie . . . 113
3.6.1. Allgemeine Beziehungen für Modellpotentiale und OPW-Pseudopotentiale . . 113
3.6.2. Störungstheoretische Auswertung für Modellpotentiale . . . 114

3.7. Bandberechnungen mit Modellpotentialen . . . 115
3.7.1. Methode . . . 115
3.7.2. Ergebnisse für reine Metalle . . . 117
3.7.3. Ergebnisse für intermetallische Verbindungen . . . 119

3.8. Pseudoatome (G. Paasch) . . . 120
3.8.1. Lokale Pseudopotentiale . . . 120
3.8.2. Zustands- und energieabhängige Modellpotentiale . . . 121
3.8.3. Muffin-Tin-Potentiale . . . 123

3.9. Literatur . . . 125

4. Streukonzept und Bandstruktur von Übergangsmetallen (G. Lehmann) . 127

4.0. Einleitende Betrachtungen . . . 127

4.1. Ein Streuer im konstanten Potential . . . 129
4.1.1. Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung . . . 129
4.1.2. Eigenschaften der Streuphasen . . . 132
4.1.3. Greensche Funktion . . . 134
4.1.4. T-, S- und K-Matrix . . . 135
4.1.5. Wignersche Verweilzeit . . . 137
4.1.6. Nichtkugelsymmetrische Potentiale . . . 138
4.1.7. Praktische Berechnung der Streueigenschaften . . . 139

4.2. Physikalische Vorstellungen zum Resonanzverhalten der Streuphase . . . 143
4.2.1. Verhalten der Streuphase bei einfachen und Übergangsmetallen . . . 143
4.2.2. Relativistischer Fall . . . 148

4.3. Systeme von Streuern . . . 152
4.3.1. Grundgleichungen . . . 152
4.3.2. T-Matrix des Gesamtsystems . . . 157
4.3.3. Variationsprinzip, Eigenschaften der Streuphasen . . . 159
4.3.4. Gültigkeitsbereich der Grundgleichung . . . 159
4.3.5. Greensche Funktion . . . 162
4.3.6. Zustandsdichte . . . 164

4.4. Regelmäßige Kristalle . . . 169
4.4.1. Verallgemeinerte KKR-Gleichungen . . . 169
4.4.2. Clusterdarstellungen bei Gittern mit Basis . . . 172
4.4.3. Analyse der Strukturkonstanten, KKR-Ziman-Gleichungen . . . 174
4.4.4. H-NFE-TB-Gleichungen . . . 177
4.4.5. Verwandte Methoden . . . 183

8.1.1. Atomare Kraftkonstanten 326
8.1.2. Die harmonische Näherung 329
8.1.3. Dynamische Matrix und Eigenschwingungsmoden des Gitters 330
8.1.4. Statistik der Phononen 332

8.2. Die elastischen Eigenschaften des harmonischen Kristalls 335
8.2.1. Der Grenzfall großer Wellenlängen 335
8.2.2. Elastische Konstanten 338

8.3. Die adiabatische Näherung 340
8.3.1. Formale Durchführung 340
8.3.2. Physikalischer Inhalt 341
8.3.3. Störungsrechnung und Vielteilchentheorie 342

8.4. Die dielektrische Behandlung der Gitterschwingungen 343
8.4.1. Zusammenhang zwischen dynamischer Matrix und linearer Abschirmfunktion 343
8.4.2. Coulomb-Anteil der dynamischen Matrix 346
8.4.3. Akustische Summenregel für ε^{-1} 348
8.4.4. Migdal-Kohn-Anomalie und Peierls-Instabilität 348

8.5. Pseudopotentialtheorie der Gitterschwingungen 352
8.5.1. Dynamische Matrix in niedrigster Störungsordnung 352
8.5.2. Höhere Störungsordnungen, Mehrkörperkräfte 356

8.6. Gitterschwingungen in Übergangsmetallen und deren Verbindungen 361
8.6.1. Inversion der dielektrischen Matrix für Bloch-Elektronen 361
8.6.2. Eine mögliche Alternative 363

8.7. Zur Theorie der Neutronenstreuung am harmonischen Kristall 366
8.7.1. Wechselwirkung des harmonischen Kristalls mit einem Teilchenstrahl 366
8.7.2. Elastische und inelastische Streuung 368
8.7.3. Kohärente und inkohärente Streuung 370

8.8. Literatur 373

9. Elektron-Phonon-Wechselwirkung (W. John) 375

9.0. Einleitende Betrachtungen 375

9.1. Selbstenergie des Gitterelektrons 377
9.1.1. Greensche Einteilchenfunktion 377
9.1.2. Berechnung der Selbstenergie 379

9.2. Pseudopotentialtheorie der Elektron-Phonon-Wechselwirkung 383
9.2.1. Darstellung des Kopplungsparameters 383
9.2.2. Ergebnisse 385

9.3. Streukonzept und Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Übergangsmetallen . . 387
9.3.1. Rigid Muffin-Tin-Modell 387
9.3.2. Gaspari-Gyorffy-Formel 389
9.3.3. Hopfield-Parameter für Übergangsmetalle 394
9.3.4. Relativistische Effekte 398
9.3.5. Druckabhängigkeit des Hopfield-Parameters 399
9.3.6. Ausblick 400

9.4. Literatur 400

10. Oberflächen (G. Paasch, M. Hietschold) 402

10.1. Metalle und Oberflächen 402

10.2. Makroskopische Beschreibung von Oberflächen 404
10.2.1. Thermodynamische Beschreibung 404
10.2.2. Stabilität und Anisotropie 407

10.3. Grundlagen der Elektronentheorie von Metalloberflächen 409
10.3.1. Das Kristallpotential an einer Oberfläche 409
10.3.2. Die Austrittsarbeit 413
10.3.3. Dimensionseffekte und Randbedingungen 416
10.3.4. Oberflächenzustandsdichte, Neutralität und Summenregel 421
10.3.5. Die Oberflächenenergie 426
10.3.6. Die klassische Spaltungsenergie 432
10.3.7. Greensche Funktionen für Systeme mit Oberflächen 435

10.4. Modelle für die reine Oberfläche 440
10.4.1. Das Geleemodell 440
10.4.2. Ionengittermodell 448
10.4.3. Selbstkonsistente Methoden zur Berechnung der elektronischen Struktur von Oberflächen einfacher Metalle 456
10.4.4. Modell renormierter Pseudoatome (M. TAUT) 461

10.5. Literatur 464

11. Eigenschaften lokalisierter Defekte in Metallen (E. Mrosan, G. Lehmann) 467

11.1. Substitutionelle Fremdatome in Metallen 467

11.2. Punktdefekt im homogenen Elektronengas 468
11.2.1. Beschreibung des Modells und Friedelsche Summenregel 468
11.2.2. Ladungsdichteoszillationen 470
11.2.3. Restwiderstand 471
11.2.4. Diamagnetismus der Leitungselektronen in verdünnten Legierungen 476

11.3. De-Haas-van-Alphen-Effekt 479
11.3.1. Quantisierung der Energieniveaus freier Elektronen im Magnetfeld 479
11.3.2. dHvA-Effekt für reine Metalle 482
11.3.3. Einfluß von Fremdatomen auf den dHvA-Effekt 484

11.4. Lokalisierte Defekte im Modell starker Bindung (Tight-Binding-Modell) . . . 486
11.4.1. Koster-Slater-Modell 486
11.4.2. Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit 489

11.5. Theorie der Vielfachstreuung für lokalisierte Defekte 490
11.5.1. *T*-Matrix 490
11.5.2. Dingle-Temperatur 492
11.5.3. Restwiderstand 493

11.6. Konstruktion des Potentials eines Punktdefekts 494
11.6.1. Verwendung der Friedelschen Summenregel 494
11.6.2. Selbstkonsistente Potentialkonstruktion 495

0 Einleitung

P. Ziesche, G. Lehmann, H. Eschrig

Als vor 80 Jahren mit der Idee des Elektronengases von Paul Drude die Elektronentheorie der Metalle begründet wurde, ging es um die Erklärung der optischen Eigenschaften von Metallen im Ultraroten und des Wiedemann-Franz-(Lorenz-)schen Zusammenhangs zwischen elektrischer und thermischer Leitfähigkeit. 1928 konnte Arnold Sommerfeld durch Anwendung der Fermi-Dirac-Statistik auf das Elektronengas erklären, warum die Valenzelektronen (fast) nicht zur Wärmekapazität von Metallen beitragen. Wolfgang Pauli und Werner Heisenberg zeigten, daß die Quantentheorie auch den Schlüssel für ein weiteres Problem, nämlich die Erklärung der magnetischen Eigenschaften metallischer Systeme, lieferte. Zur gleichen Zeit hat Felix Bloch die (Einteilchen-) Schrödinger-Gleichung

$$h\varphi_{\boldsymbol{k},\nu}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{\boldsymbol{k},\nu}\varphi_{\boldsymbol{k},\nu}(\boldsymbol{r}) \,,$$
$$h = h(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + v(\boldsymbol{r}) \,, \qquad \boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \,, \tag{1}$$

für Elektronen (Masse m) im gitterperiodischen Potential $v(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = v(\boldsymbol{r})$ untersucht ($\boldsymbol{R}$ = Gittervektor, $\boldsymbol{k}$ = Bloch-Vektor, ν = Bandindex) und eine fundierte Theorie des elektrischen Widerstandes der Metalle aufgestellt. Dabei wurde eine teilweise Erklärung für die zunächst zu stark vereinfacht erscheinende Annahme gegeben, daß die Leitungselektronen in Metallen als fast frei angesehen werden können. Die Bloch-Wellenfunktionen $\varphi_{\boldsymbol{k},\nu}(\boldsymbol{r})$ genügen wegen der Gitterperiodizität dem Bloch-Theorem

$$\varphi_{\boldsymbol{k},\nu}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}\,\varphi_{\boldsymbol{k},\nu}(\boldsymbol{r}) \,. \tag{2}$$

(1) entsteht durch Vernachlässigung der Kernbewegung aus einer allgemeineren Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung, die über (i = Ion, e = Elektron)

$$H = T_\mathrm{i} + T_\mathrm{e} + V_\mathrm{ii} + V_\mathrm{ie} + V_\mathrm{ee} \tag{3}$$

mit T_i als kinetischer Energie der Ionen (oder Atomkerne) auch deren Bewegung enthält. Die Berücksichtigung des Einflusses der Kernbewegung auf die Elektronenzustände kann wegen der kleinen Amplituden und Geschwindigkeiten störungstheoretisch erfolgen. Auf Gleichung (1) und ihrer (genäherten numerischen) Lösung beruhen weite Teile der Elektronentheorie der Metalle; ihre vielteilchentheoretische Begründung wird durch das von Lew Davidowitsch Landau eingeführte Konzept der Quasiteilchen gegeben.

Inzwischen ist die Elektronentheorie der Metalle zu einem breiten Gebiet geworden mit dem Ziel, immer umfassender und detaillierter immer diffizilere Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtseigenschaften immer komplizierterer metallischer Systeme

auf deren elektronische Struktur oder Bandstruktur zurückzuführen. Charakteristisch ist dabei ein enges wechselseitiges Zusammenspiel von Theorie und Experiment. Wichtig ist, daß im Laufe der Jahre sowohl die experimentellen Möglichkeiten wesentlich verbessert und verfeinert wurden (Züchtung reinster Einkristalle, Herstellung von Ultrahochvakua, Erzeugung tiefer Temperaturen, starker Magnetfelder und hoher Drücke, Mikrowellentechnik, energie- und winkelauflösende, spin- und polarisationsabhängige Elektronen- und Photonenspektroskopie, Verwendung von Neutronen, Positronen und Müonen als Sonden) als auch für die Theorie durch die elektronischen Großrechner (seit den 50er Jahren) neue Möglichkeiten entstanden, die zusammen mit neuen theoretischen Verfahren, Modellen, Konzeptionen (Pseudopotentiale, Streukonzept, Modelle für Korrelation, Modelle für Unordnung) zum Tragen kamen.

Zwei unabhängig voneinander verfolgte, sich aber gegenseitig ergänzende Richtungen können festgestellt werden, um die Bandstruktur kristalliner Metalle teilweise oder vollständig zu ermitteln:

1. Konstruktion eines (lokalen) Kristallpotentials $v(\boldsymbol{r})$, das quantenmechanische Vielteilchenkorrelationen mehr oder weniger einschließt (s. S. 5), Lösung der daraus entstehenden (Einteilchen-) Schrödinger-Gleichung (1) und Vergleich von so berechneten Fermi-Flächen, Zustandsdichten usw. mit experimentellen Daten (s. S. 6). Dabei kommen algebraisch-analytische Untersuchungen, numerische Berechnungen und physikalische Intuition (Auswahl geeigneter Modelle, Anpassung weniger zunächst offener Parameter) zu ihrem Recht. An Methoden zur numerischen Berechnung von Valenzbändern (kurz Bandberechnungen) wurden entwickelt:

Zellenmethode = (genäherte) Lösung der Schrödinger-Gleichung (1) innerhalb einer Elementarzelle mit den aus dem Bloch-Theorem (2) folgenden Randbedingungen (Wigner u. Seitz, 1933);

OPW = Orthogonalized Plane Wave Method, Variationsverfahren mit Darstellung der Bloch-Wellen durch (zu den Rumpfzuständen) orthogonalisierte ebene Wellen (Herring, 1940);

Pseudopotentialmethode = Transformation der Bloch-Wellenfunktionen in Pseudowellenfunktionen, die in einfachen Metallen durch ein schwaches Pseudopotential bestimmt werden und bei denen die charakteristischen Oszillationen in Kernnähe fehlen; weitgehende Kompensation des Kristallpotentials in Kernnähe durch das Repulsionspotential für die s-p-Elektronen des Valenzbandes (Phillips u. Kleinman, 1959, Harrison, 1959—64, Cohen u. Heine, 1961, Heine u. Abarenkow, 1964 (hier ist auch die Quantendefektmethode von Kuhn und van Vleck, 1950, eingeflossen), Ashcroft, 1968, Shaw, 1968, Anderson, 1969, u. a., aufbauend auf Heine, 1957, Gold, 1958, Vorläufer waren Hellmann, 1935, Gombás, 1949, Antoncik, 1954);

LCAO = Linear Combination of Atomic Orbitals, Variationsverfahren mit Darstellung der Bloch-Wellen durch Linearkombinationen von atomaren oder atomähnlichen Wellenfunktionen (Bloch, 1928, Fletcher, 1952, Slater u. Koster, 1954 (u. a. Verwendung der LCAO-Darstellung zur Interpolation), Callaway, 1955);

$\boldsymbol{kp}$-Methode = Variationsverfahren, Darstellung der Schrödinger-Gleichung durch ein beschränktes Basissystem, das für $\boldsymbol{k} = 0$ eine strenge Lösung darstellt; Bestimmung der effektiven Masse und Kristallwellenfunktion in der Nähe von Punkten hoher Symmetrien im $\boldsymbol{k}$-Raum (Bardeen, 1937, Seitz, 1940);

APW = Augmented Plane Wave Method, Variationsverfahren mit Darstellung der Bloch-Wellen durch modifizierte ebene Wellen, die stetig an Lösungen der Schrödinger-Gleichung im Rumpfpotential anschließen (Slater, 1937, Chodorow, 1939, Loucks, 1967);

KKR = Berechnung der Bloch-Zustände nach Korringa, 1947, Kohn und Rostocker, 1954, durch wiederholte Streuung des Elektrons (Vielfachstreuung) an den atomaren Potentialen im Kristall. Dabei wird das Kristallpotential in nichtüberlappenden Kugeln kugelsymmetrisch und im Zwischenbereich konstant angenommen (Muffin-Tin-Potential). Die elektronische Struktur wird dann durch die Streuzustände der einzelnen Potentialtöpfe und deren geometrische Anordnung bestimmt.

Zwischen diesen Verfahren wurde ein Netz von Zusammenhängen erkannt. Überblicksmäßige Darstellungen findet man in Ziman (71), Fletcher (71), Jastrebow und Kaznelson (81)[1]). Ausgehend von KKR und APW wurden weitere Verfahren entwickelt, die entweder unter Berücksichtigung der konkreten physikalischen Situation (der Besonderheiten der jeweiligen Bandstruktur) oder durch rechnergerechte Näherungen vereinfachte und schnellere Bandberechnungen ermöglichen. Dazu zählen:

H-NFE-TB = Hybridized-Nearly Free Electron-Tight Binding Method, Transformation der KKR-Gleichungen in eine gemischte Darstellung von ebenen Wellen (durch eine Transformation nach Ziman, 1965) und Resonanzzuständen entsprechend den fast freien *s-p-* und den stärker gebundenen *d*-Elektronen von Übergangsmetallen (Heine, 1967, Hubbard, 1967, Jacobs, 1968, Hubbard u. Dalton, 1968, Pettifor, 1969—72, von Hodges, Ehrenreich u. Lang 1966 und Mueller 1967 empirisch eingeführt, von Ziman 1965 mit dem Streukonzept (*d*-Resonanz) verknüpft), ist eine der linearen KKR-Methoden.

LMTO = Linear Combination of Muffin-Tin Orbitals, Variationsverfahren mit Darstellung der Bloch-Wellen durch Linearkombinationen von Muffin-Tin-Wellenfunktionen. Auswertung in der Näherung sphärischer Elementarzellen (ASA = Atomic Sphere Approximation) liefert für Übergangsmetalle kanonische Bänder (O. K. Andersen, 1972), s. Skriver (83). Ein direkter Abkömmling ist die ASW-(Augmented Spherical Wave) Methode von Williams u. a. (79).

Darüber hinaus haben sich weitere linearisierte Versionen bewährt, die meist auf der APW- oder KKR-Methode beruhen (s. z. B. Faulkner, 79). Zu den Standardmethoden wurden auch ausgehend von der Pauli- bzw. Dirac-Gleichung halb- und vollrelativistische Versionen entwickelt. Zur Beschleunigung von selbstkonsistenten Rechnungen wurden anspruchsvollen und damit aufwendigen Methoden gröbere und damit schnellere Verfahren vorgeschaltet. Im Ergebnis dieser Entwicklung bereitet es heute keine prinzipiellen Schwierigkeiten, bei gegebenem Kristallpotential (bzw. gegebener Vorschrift zur Konstruktion des Kristallpotentials) die Bandstruktur mit jeder vernünftigen Genauigkeit zu berechnen.

2. Ein anderer Weg besteht in der Annahme geeigneter analytischer Bandstrukturen $\varepsilon_{k,\nu}$ (oder Fermi-Flächen), Diskussion ihres Einflusses auf Meßgrößen (s. S. 6) und

[1]) Im Unterschied zu den Angaben Bloch, 1929, Korringa, 1947, usw., die sich auf die geschichtliche Entwicklung beziehen, sind mit Ziman (71), Williams u. a. (79) usw. Literaturhinweise gemeint, die sich am Ende dieses Teils befinden.

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

Anpassung offener Parameter an experimentelle Daten (Kohler, 1949, Lifschitz, Asbel, Kaganow, 1955, s. Lifschitz u. a., 75, Kaganow u. Lifschitz, 79).

Während in der ersten Richtung der quantitative Aspekt (numerische Bandberechnung) dominiert, liegt in der zweiten Richtung die Betonung auf qualitativen Aspekten (Topologie und Geometrie von Fermi-Flächen, qualitativ unterschiedliches Verhalten offener und geschlossener Bahnen, Klassifizierung der Singularitäten der Zustandsdichte wie van-Hove-Singularitäten u. ä.). Beide Wege sind (für reine Metalle) erfolgreich beschritten worden. Ein Ergebnis ist, daß die Fermi-Flächen zahlreicher Metalle und (auf dieser Grundlage) andere Meßgrößen zuverlässig bestimmt werden konnten (s. z. B. Lifschitz u. a., 75, Moruzzi u. a., 78). Auch Verbindungen, insbesondere intermetallische Verbindungen, wurden erfolgreich untersucht.

Eine andere, eng mit den eben diskutierten Fragen verknüpfte Entwicklungslinie betrifft die Frage, inwiefern ein solches Vielteilchensystem wie das Gas der über Coulomb-Kräfte wechselwirkenden Bloch-Elektronen mit solchen Einteilchengrößen wie der Bandstruktur überhaupt beschrieben werden kann oder, konkreter, wie man die auf S. 2 erwähnten quantenmechanischen Vielteilchenkorrelationen in das die Bandstruktur bestimmende Kristallpotential $v(\boldsymbol{r})$ einzuschließen hat. Der entscheidende Schritt hierzu geht auf das von Lew Davidowitsch Landau 1956—58 entwickelte Konzept der Quasiteilchen in Fermi-Flüssigkeiten zurück. Danach hat jedes ausgedehnte normale Fermi-System ein niederenergetisches Anregungsspektrum, ähnlich dem eines idealen, d. h. wechselwirkungsfreien Fermi-Gases. Später wurde dieses Konzept auch auf geladene Fermi-Systeme übertragen (Silin, 1957—59). Über die Einteilchenausbreitungs- (oder Greensche) Funktion und den daraus folgenden Selbstenergieoperator Σ und dessen Eigenschaften (s. [1.2], [2.1]) wird das phänomenologische Quasiteilchenkonzept mit der mikroskopischen Theorie verknüpft (Pitajewski, 1959, Bytschkow u. Gorkow, 1961, Luttinger, 1961, Luttinger u. Nozières, 1962, Abrikossow, Gorkow u. Dsjaloschinski, 1962).

Das Spektrum der Elementaranregungen vom Einteilchentyp (kurz Quasiteilchen) wird durch eine Gleichung bestimmt, die die Form einer Einteilchen-Schrödinger-Gleichung hat mit dem Selbstenergieoperator Σ als nichtlokalem, energieabhängigem, dichteabhängigem und komplexem (nicht-hermiteschem) Potential, das die Vielteilchenwechselwirkung enthält (s. [2.1.3]). Letzteres setzt also die Kenntnis der Grundzustandsteilchendichte $n(\boldsymbol{r})$ voraus. Bestimmt man diese selbstkonsistent in der Näherung unabhängiger Teilchen (Hartree, 1928, Fock, 1930, Slater, 1930), so wird zwar der durch das Pauli-Prinzip bedingte Austausch erfaßt, Korrelationen infolge der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen bleiben aber unberücksichtigt (s. [2.1.2]). Im Rahmen des sogenannten Dichte-Funktional-Formalismus für das inhomogene Elektronengas kann man jedoch auch unter Einschluß von Austausch *und* Korrelation die Grundzustandsteilchendichte (wie beim Hartree- oder Hartree-Fock-Verfahren aus formalen Einteilchenwellenfunktionen aufgebaut) selbstkonsistent aus einer Gleichung bestimmen (Kohn u. Sham, 1965), die einer Einteilchen-Schrödinger-Gleichung ähnelt und als Euler-Gleichung beim Variieren der Gesamtenergie als Funktional der Teilchendichte entsteht (s. [1.7.6]). Grundlage dafür ist, daß ein vom äußeren Potential $v(\boldsymbol{r})$ und von der Teilchendichte $n(\boldsymbol{r})$ abhängiges Funktional $E[v, n]$ existiert, das bei festgehaltenem $v(\boldsymbol{r})$ und festgehaltener Teilchenzahl $N = \int \mathrm{d}^3r\, n(\boldsymbol{r})$ bezüglich Variationen von $n(\boldsymbol{r})$ ein Minimum besitzt. Dieses stimmt mit der Grundzustandsenergie E überein, die zugehörige Teilchendichte $n(\boldsymbol{r})$ ist die

des Grundzustandes (Hohenberg u. Kohn, 1964, s. [1.7.2]). Für das in der Kohn-Sham-Gleichung enthaltene effektive Austausch- und Korrelationspotential v_{xc} (lokal, energieunabhängig, reell) hat sich die sogenannte lokale-Dichte-Näherung bewährt. Dabei wird das inhomogene Elektronengas ähnlich wie beim Thomas-Fermi-Verfahren lokal durch ein homogenes Elektronengas mit ortsabhängiger Teilchendichte ersetzt (s. [1.7.4]). Im Ergebnis dessen kann v_{xc} als ein (ursprünglich aus dem Hartree-Fock-Verfahren entstandenes) X_α-Potential (Slater, 1951, Gáspár, 1954, Slater u. a., 1969 bis 72, Schwarz, 1972) geschrieben werden (s. [2.2.2]). Die so (aus der Kohn-Sham-Gleichung) zu bestimmende Grundzustandsteilchendichte $n(\boldsymbol{r})$ geht — wie erwähnt — in den Selbstenergieoperator der Quasiteilchengleichung ein, aus der schließlich die Bandstruktur als Quasiteilchenspektrum dieses Vielteilchensystems folgt (s. [2.1.3]).

Dieses vielteilchentheoretische Verständnis der Bandstruktur hat sich erst in den letzten 10 bis 20 Jahren herausgeschält (Bytschkow u. Gorkow, 1961, Luttinger, 1961). Durch eine lokale-Dichte-Näherung für den Selbstenergieoperator Σ konnte von Hedin und S. Lundqvist, 69, und Hedin und B. I. Lundqvist, 71, dieses vielteilchentheoretische Konzept der Bandstruktur zur Grundlage einer praktikablen Prozedur für Bandberechnungen gemacht werden. Zusammen mit dem Dichte-Funktional-Formalismus bildet es eine vielteilchentheoretische Basis für selbstkonsistente Bandberechnungen. Die Entwicklung auf diesem Gebiet ist nicht abgeschlossen. Erweiterungen und Verbesserungen der in v_{xc} und Σ verwendeten Näherungen sind unter anderem in folgenden Richtungen notwendig:

1. Übertragung auf den spinpolarisierten Fall (für v_{xc} s. von Barth u. Hedin, 72),
2. Berücksichtigung relativistischer Effekte,
3. Versuche, über die lokale-Dichte-Näherung hinauszugehen (s. z. B. Gunnarson u. a., 79).

Prinzipiell noch unklar ist die Beschreibung von Übergängen mit Beteiligung hochangeregter Zustände (z. B. Röntgen-Spektren) in diesem Formalismus. Bei allen noch nicht zu Ende geklärten Fragen besteht doch der Wandel in der Auffassung von der Bandstruktur darin, daß diese früher oft im Sinne des Hartree-Fock-Schemas als Startpunkt einer Vielteilchentheorie des jeweils betrachteten metallischen Systems angesehen wurde und daß dagegen heute klar ist: Die Bandstruktur steht als Quasiteilchenspektrum am Ende einer Vielteilchentheorie. In der Vergangenheit wurden Vielteilchensysteme gewöhnlich im Hartree-Fock-Schema als quantenmechanisches Modell unabhängiger Teilchen (ein Teilchen im mittleren Potential aller übrigen)[1]) diskutiert und behandelt. Dieses Schema liefert über Einteilchenzustände sowohl die Teilchendichte und Gesamtenergie als auch in Verbindung mit dem Koopman-Theorem Einteilchenanregungen. Die Berücksichtigung der Vielteilchenkorrelation zwingt zu einer Verfeinerung: Teilchendichte und Gesamtenergie sind im Dichte-Funktional-Formalismus nach Hohenberg, Kohn und Sham zu bestimmen, die Bandstruktur zur Beschreibung der Elementaranregungen vom Einteilchentyp ergibt sich aus der Quasiteilchengleichung.

Diese so verstandene Bandstruktur bestimmt nun direkt als Schlüsselgröße eine große Gruppe von Eigenschaften eines Metalls, nämlich die elektronischen Eigen-

[1]) Vielleicht sollte man besser das Modell unabhängiger Teilchen (Hartree) vom Modell unkorrelierter Teilchen (Hartree-Fock) unterscheiden, da sich ja in der Hartree-Fock- im Unterschied zur Hartree-Näherung die Teilchen gleichen Spins ausweichen (Austauschloch, statistische Abstoßung), also nicht unabhängig voneinander bewegen.

schaften. Dazu gehören Fermi-Flächen, Fermi-Geschwindigkeiten, Bandmassen, Magnetwiderstand, de-Haas-van-Alphen-Effekt, Zyklotronresonanz, anomaler Skineffekt, Ultraschallabsorption, Zustandsdichten, elektronische Wärmekapazität, Röntgen-Spektren, optische Spektren, Photoelektronenspektren, Energieverlustspektren bei inelastischer Elektronenstreuung, Sekundärelektronenemission, Röntgen-Beugung und Teilchendichte, Positronannihilation und Impulsverteilung; ebenso Phononenspektren (manche Systeme zeigen elektronisch bedingte Anomalien, weiche Moden), Phononenzustandsdichten, Spektren der inelastischen Neutronenstreuung, elastische Eigenschaften, Bindungsenergie, Gitterstruktur (Strukturtyp wie auch Gitterparameter, u. a. das Achsenverhältnis c/a bei hexagonal dicht gepackten Metallen), Elektron-Phonon-Kopplung und deren Druckabhängigkeit, Tunnelspektren. Auch die verschiedensten Transportgrößen wie elektrische und thermische Leitfähigkeit, Hall-Koeffizient, deren Temperatur- und Druckabhängigkeit sowie elektronische, strukturelle und andere Phasenumwandlungen, Schmelztemperaturen und Phasendiagramme sind hier zu nennen. In Verbindungen kommen Umladungen und Bindungsverhältnisse hinzu. — Die Bandstruktur bildet zunehmend auch die Basis für das quantitative Verständnis solcher kooperativen Erscheinungen wie Supraleitung und Magnetismus. Hierbei ist es nötig, die spezifischen Probleme der Vielteilchentheorie zu behandeln. Näherungen im System der Mehrteilchen-Ausbreitungsfunktionen führen zu vereinfachten Modell-Hamilton-Operatoren (Fröhlich, BCS (= Bardeen-Cooper-Schrieffer) u. a.), die die jeweils entscheidenden Wechselwirkungen jedoch mit noch offenen Parametern enthalten. Diese (zunächst empirischen) Parameter können zunehmend aus der Bandstruktur bestimmt werden. Auch die Supraleitungssprungtemperaturen, Curie- und Neel-Temperaturen, deren Abhängigkeit vom Druck, von Verunreinigungskonzentrationen, der Zusammenhang zwischen hoher Supraleitungssprungtemperatur, Gitterinstabilität und weichen Phononenmoden sind hier zu erwähnen. Zu den Modell-Hamilton-Operatoren zählen auch das Hubbard-Modell und seine Modifikationen, mit denen die Elektronenkorrelation in schmalbandigen Systemen (Verbindungen mit d-Elektronen, wie z. B. Übergangsmetallchalkogenide) häufig in Verbindung mit magnetischen und Metall-Isolator-Phasenumwandlungen untersucht wird. — Schließlich seien die verschiedensten Störungen der idealen Kristallstruktur wie Leerstellen, Leerstellencluster (Poren), Zwischengitteratome, substitutionelle Punktdefekte, Versetzungen, Stapelfehler, Grenzflächen, reine und bedeckte Oberflächen (Korrosion, Katalyse) erwähnt mit solchen elektronischen Eigenschaften wie Relaxation des Elektronengases und des Gitters, Bildungsenergie bzw. -enthalpie, Aktivierungsenergie, Peierls-Kraft, Stapelfehlerenergie, Oberflächenenergie, Oberflächenphasenumwandlungen, Dipolbarriere, Austrittsarbeit, Wechselwirkung zwischen Adatomen (indirekt über das Substrat) u. v. a. m.

Für die Berechnung der aufgeführten Größen werden neben den Bandstrukturenergien $\varepsilon_{\boldsymbol{k},\nu}$ auch die zugehörigen Bloch-Wellenfunktionen $\varphi_{\boldsymbol{k},\nu}(\boldsymbol{r})$ zur Bildung von Greenschen Funktionen (für Dichten im Orts-, Impuls- oder Energieraum) und von Matrixelementen für Übergangswahrscheinlichkeiten, Wirkungsquerschnitte, Spektren, Responsefunktionen (die das Reagieren, das Verhalten, die Antwort von Systemen auf im allgemeinen orts- und zeitabhängige äußere Störungen beschreiben) u. ä. benötigt. Häufig kommen noch mehr oder weniger komplizierte Integrationen in der Brillouin-Zone hinzu. Darüber hinaus müssen bei thermodynamischen Problemen Zustandssummen berechnet werden.

Die gute Reproduktion zahlreicher experimenteller Daten aus (weitgehend) ersten Prinzipien bestätigt das geschilderte Konzept der (Einteilchen-) Bandstruktur im Vielteilchensystem der Bloch-Elektronen. Besondere Hervorhebung verdient, daß es in letzter Zeit gelungen ist, die Bandstruktur nicht nur nahe, sondern auch weitab von der Fermi-Energie aus winkelabhängigen Photoelektronenspektren direkt experimentell zu bestimmen. Dies deutet an, daß das Konzept der Quasiteilchen, die eigentlich nur nahe der Fermi-Energie genügend definiert (weil nur dort genügend schwach gedämpft und damit genügend langlebig) sind, offenbar weiter reicht, als ursprünglich angenommen wurde. An dieser Stelle sei auch erwähnt, daß es in letzter Zeit gelang, Fermi-Flächen mittels Positronvernichtung auch für konzentrierte Legierungen zu bestimmen, obwohl natürlich die Legierungsunordnung prinzipiell eine zusätzliche Verschmierung (oder Dämpfung) der Bandstrukturenergien, also eine gewisse Unschärfe der Fermi-Fläche, zur Folge hat.

Das empirische Material wächst sehr schnell, womit auch eine entsprechende Erweiterung des theoretischen Apparates einhergeht. Die verschiedensten Störungen der idealen Kristallstruktur sind schon genannt worden. Viel Material hat sich zu ungeordneten Legierungen angesammelt; in der Theorie hat sich hier die Näherung des kohärenten Potentials (CPA = Coherent Potential Approximation) sowohl im Konzept der festen Bindung (TB = Tight-Binding) als auch im Konzept der Vielfachstreuung (KKR-CPA) bewährt. Stark bearbeitet werden amorphe sowie flüssige Metalle. Der kombinierte Einfluß von Unordnung und Elektronenkorrelation wird zunehmend untersucht. Zusammenfassende Darstellungen zu ungeordneten Systemen finden sich in Ziman (79), Mott und Davis (79) und Lifschitz u. a. (81). Neues Material gibt es zur Elektronenlokalisierung in ungeordneten ein- und zweidimensionalen Systemen sowie in dünnen Drähten bei tiefen Temperaturen (Bernasconi u. Schneider, 81, Nagaoka u. Fukuyama, 82). Zunehmendes Interesse finden gegenwärtig Verbindungen mit gemischten Valenzen (MVC = Mixed Valence Compounds, s. Chomski, 79). Hier treten viele Erscheinungen der Metallphysik gleichzeitig auf, wie Hybridisierung breiter *s-p-d*-Bänder mit sehr schmalen *f*-Bändern (mit Bandbreiten in der Größenordnung von Phononenenergien, wobei die in [8] beschriebene adiabatische Näherung nicht möglich ist), Elektronenkorrelation in schmalen Bändern, dynamischer Jahn-Teller-Effekt, strukturelle, magnetische und Metall-Isolator-Phasenumwandlungen. Als weitere exotische Systeme sollen hier genannt werden: Quasiein- und -zweidimensionale Leiter (wie z. B. KCP, TTF-TCNQ) mit ihren Kohn-Anomalien, Peierls-Übergängen, beweglichen Ladungsdichtewellen (wie in $NbSe_3$), Spindichtewellen, inkommensurablen Phasen sowie aus Nichtmetallen bestehende metallische, z. T. sogar supraleitende Systeme (leitende Polymere wie $(SN)_x$ und $(CH)_x$), Graphit-Einlagerungs- (Interkalat-) Verbindungen (z. T. als künstliche Metalle), Carbin als metastabile Modifikation von Kohlenstoff (neben Graphit und Diamant). $(TMTSF)_2\,ClO_4$ ist der erste organische Leiter, der (nicht erst unter Druck) unterhalb 1,3 K supraleitend wird. Neues Material gibt es zur Koexistenz von Ferromagnetismus und Supraleitung sowie zur Nichtgleichgewichtssupraleitung (Buckel u. Weber, 82). Neuerdings werden bei Messungen der Tieftemperaturwärmekapazität Spinfluktuationen durch äußere Magnetfelder untersucht. Es steht die Aufgabe, die mit diesen Aufzählungen angedeutete ungeheure und ständig wachsende Vielfalt empirischer Fakten und Regeln über das makroskopische Verhalten fester Körper tiefer, d. h. aus mikroskopischen Eigenschaften, aus ersten Prinzipien einschließlich ihrer Gültigkeitsgrenzen zu ver-

stehen. In dem Maße, wie die Untersuchung der elektronischen Struktur immer zuverlässiger und detaillierter Kenntnisse über das Verhalten fester und flüssiger Metalle (und natürlich auch von Halbleitern und Isolatoren) vermittelt, ergibt sich auch die Möglichkeit, deren Eigenschaften gezielt zu beeinflussen (und — um einige hochgespannte Wünsche zu nennen — nach dem Hochtemperatursupraleiter, nach „isolierendem Eisen", nach Stoffen, die fest, aber nicht spröde sind, nach Stoffen, die Wasserstoff leicht aufnehmen und abgeben können, zu suchen). Auf diese Weise kann in zunehmendem Maße einem dringenden Bedürfnis der sich in den letzten 30 Jahren als Disziplin formierenden Werkstoffwissenschaft entsprochen werden, deren Wurzeln in der Festkörperphysik, der Festkörperchemie, der Werkstoffkunde und anderen Disziplinen entstanden. Natürlich bestimmen die elektronischen Größen letzten Endes auch alle anderen Eigenschaften; jedoch ist völlig klar, daß sich viele Fragen der Metall- und Festkörperphysik einem elektronentheoretischen Zugang verschließen. Stoffe oder Zustände mit komplizierter Realstruktur (Versetzungsensemble, heterogene Werkstoffe wie Keramiken, Verbunde) erfordern einen theoretischen und experimentellen Zugang mit anderen Mitteln. Für ihre Beschreibung, für ihr Verständnis ist eine andere, eine komplexe Strukturebene wesentlich, deren Elemente (z. B. Versetzungen) vom Standpunkt der Elektronentheorie bereits sehr komplizierte Gebilde darstellen. Trotzdem stellt die elektronische Struktur für viele Fragen — zunehmend auch solche von unmittelbarem technischen Interesse — eine entscheidende Schlüsselgröße dar.

Nach diesen allgemeineren Betrachtungen zur Entwicklung der Elektronentheorie von Beginn an und zum Verhältnis von Einteilchen- und Vielteilchenbeschreibung, zum Konzept der Bandstruktur, zur Rolle der Elektronentheorie in Festkörperphysik und Werkstofforschung sollen im folgenden Entwicklungen der letzten 10 bis 15 Jahre zur Behandlung von sogenannten einfachen Metallen und Übergangsmetallen etwas näher betrachtet werden. Bei den einfachen Metallen (die in Wahrheit natürlich gar nicht einfach sind, daher — um dies zu betonen — auch als Nichtübergangsmetalle bezeichnet werden) werden die für die metallischen Eigenschaften entscheidenden Valenz- oder Leitungselektronen nur aus den atomaren s- und p-Niveaus gebildet. (Letzteres trifft auch auf die Halbleiter zu.) Für diese einfachen Metalle hat sich das Konzept der schwachen Pseudopotentiale bewährt; man spricht auch von Metallen mit fast freien Elektronen (NFE-Metalle). Bei den Übergangsmetallen, die in fast allen technisch bedeutsamen Werkstoffen enthalten sind, spielen die gegenüber den s- und p-Elektronen wesentlich stärker lokalisierten d-Zustände eine entscheidende Rolle. Dies verhindert eine Übertragung des Pseudopotentialkonzepts, dafür hat sich hier das Streukonzept bewährt.

Bei den einfachen Metallen hat sich herausgestellt, daß das (besonders in der Nähe der Atomkerne starke) Kristallpotential effektiv durch ein schwaches Pseudopotential ersetzt werden kann, dessen Einfluß auf das Gas der wechselwirkenden Valenzelektronen mit einer Störungsrechnung erfaßbar ist (s. [3], [7]). Es gelingt so, die rein elektronischen Eigenschaften (s. [6], [9], [10]) einschließlich des Transportverhaltens, aber auch die mit der Gesamtenergie (wie z. B. die elastischen Konstanten, die Phononenspektren oder die stabile Gitterstruktur, s. [7], [8]) zusammenhängenden Größen zu beherrschen. Wesentlich ist dabei die Abtrennung der Eigenschaften des Gases der wechselwirkenden Elektronen (beschrieben durch eine wellenzahl- und frequenzabhängige dielektrische Funktion) von denen der einzelnen Atome (beschrieben durch

„nackte", weil unabgeschirmte Pseudopotentiale) und deren geometrischer Anordnung (beschrieben durch einen Strukturfaktor). Maßgeblich für den Erfolg dieses Pseudopotentialkonzeptes waren Fortschritte in der Theorie des homogenen Elektronengases, wo es durch Lokalfeldkorrekturen (s. [1.6]) gelang, für metallische Dichten verbesserte Ausdrücke für die dielektrische Funktion (s. [1.3]) bereitzustellen.

Bei den Übergangsmetallen äußern sich die d-Zustände im Streuverhalten der Valenzelektronen als Resonanz. Das in diesem Zusammenhang in den letzten Jahren weiterentwickelte Konzept der Vielfachstreuung (s. [4]) ermöglicht die konsistente Berücksichtigung dieses Sachverhalts. Es gelingt dabei eine Abtrennung der Eigenschaften des Potentialverlaufs um die einzelnen Atome, d. h. ihrer Streueigenschaften (beschrieben durch quantenmechanische Streuphasen), von denen ihrer geometrischen Anordnung (beschrieben durch eine Strukturmatrix). Das mit dieser Methode behandelbare Spektrum physikalischer Probleme ist außerordentlich vielseitig. Es reicht von der Beschreibung der elektronischen Struktur ideal geordneter metallischer Systeme in einem einfachen physikalischen Bild über die Abweichungen von der Struktur des Idealkristalls, wie Punktdefekte, Oberflächen, Phononen und deren Wechselwirkung mit den Elektronen, bis zu ungeordneten kristallinen und amorphen Systemen. Dabei können sowohl fast freie als auch stark gebundene Elektronen in gleicher Weise konsistent behandelt werden. In diesem Bild findet das schwache Pseudopotential einfacher Metalle seinen Ausdruck in kleinen s- und p-Streuphasen.

Die physikalischen Vorstellungen und Ansätze gehen bei den bisher erwähnten Methoden von der Darstellung im Impulsraum aus. In zunehmendem Maße werden jedoch zur Behandlung komplizierter neuer Systeme mit Strukturbesonderheiten sowie lokaler Eigenschaften wie z. B. atomarer magnetischer Momente Darstellungen im Ortsraum benötigt, die den chemischen Aspekt der Wechselwirkung benachbarter Atome stärker berücksichtigen. Auf der Grundlage einer fundierten Kritik der aus der Quantenchemie entlehnten LCAO-Methode ist es in den letzten Jahren gelungen, praktisch alle für die Behandlung fester Körper mit dieser Methode verbundenen Mängel zu beseitigen und ihre Vorzüge hinsichtlich ihrer analytischen Verwertbarkeit voll zur Geltung zu bringen. Das trifft auch auf die Erfassung komplizierter Nachbarschaftsverhältnisse zu. Es können dabei mit relativ geringem Aufwand die Eigenschaften sowohl von schwach als auch von stark gebundenen Systemen berechnet werden (s. [5]).

Gegenwärtig steht in der deutschsprachigen Literatur eine Reihe von hervorragenden Lehrbüchern zur Theorie fester Körper wie auch zur Elektronentheorie der Metalle (Brauer, 72, Kittel, 73, Ziman, 74, Abrikossow, 76, Lifschitz u. a., 75) zur Verfügung,[1]) in denen der Zusammenhang der elektronischen Struktur mit den physikali-

[1]) Es sei auch auf Kittel (70), Madelung (72), Nemoschkalenko u. Aleschin (74), Dawydow (76), Ashcroft u. Mermin (76), Valenta u. Jäger (77), Unger u. Schneider (79), Weißmantel u. Hamann (79), Herrmann u. Prepernau (79), Harrison (80) verwiesen. — Zusätzlich zu der in [1] und [A8] genannten Literatur zum Vielelektronenproblem (in [1] Abrikossow u. a., 62, Nozières, 64, Pines u. Nozières, 66, Jones u. March, 73, Stolz, 74, Doniach u. Sondheimer, 74, Elk u. Gasser, 79, Landau u. Lifschitz, 79, Economou, 79, in [A8] Schrieffer, 64, March u. a., 67, Fetter u. Walecka, 71) seien noch genannt: Kadanoff u. Baym (62), Kirschnitz (63), Brout u. Carruthers (63), Pines (63), Schultz (64), Mattuck (67), Thouless (72), Platzman u. Wolf (73), Haken (73), Parry (73), Subarew (76), Mahan (81). — Zu der in [A1] behandelten Gruppentheorie sei auf Knox u. Gold (64), Streitwolf (67), Landau u. Lifschitz (79) verwiesen.

此为试读,需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com