

1. Einleitung: Übersicht, Ziele Gliederung, Literatur

Inhaltsverzeichnis (vorläufig)

| | |
|---|---|
| 1 | Einleitung: Übersicht, Ziel, Gliederung, Literatur |
| I. Elektronische Strukturen kristalliner Festkörper bei 0 K (Bandstrukturen) | |
| 2 | LCAO-Ansatz: Der Festkörper als 'Riesenmolekül' |
| 2.1. | 0-dimensionaler Fall: Atome und Moleküle (Wdh.) |
| 2.1.1. | Atomorbitale |
| 2.1.2. | Molekülorbitale |
| 2.2. | 1-dimensionaler Fall: Unendliche Ketten |
| 2.2.1. | Unendliche Ketten I (Realraumdarstellungen) |
| 2.2.2. | Unendliche Ketten II (k-Raum, Bandstruktur, DOS, COOP) |
| 2.2.3. | Beispiele (KCP, Polyene) |
| 2.2.4. | Gitterinstabilitäten, Peierls-Verzerrung |
| 2.3. | 2-dimensionaler Fall: ebene Netze |
| 2.3.1. | Quadratische Netze |
| 2.3.2. | Beispiele (Graphit) |
| 2.4. | 3-dimensionaler Fall |
| 2.4.1. | primitives kubisches Gitter |
| 2.4.2. | Beispiele: Ausgewählte kovalente Festkörper |
| 3. | NFE-Ansatz |
| 3.1. | 1-dimensionaler Fall |
| 3.1.1. | Potentialfreier Kristall |
| 3.1.2. | Periodisches Kernpotential |
| 3.2. | 2-dimensionaler Fall |
| 3.3. | 3-dimensionaler Fall |
| 3.3.1. | Kubisch primitives Gitter |
| 3.3.2. | FCC- und BCC-Metalle |
| 3.3.2. | HCP-Metalle |
| 3.4. | Beispiele: Elementare Metalle, Hume-Rothery-Phasen |
| 4. | Bandstruktur und strukturelle Stabilität |
| 4.1. | Übersicht: Bandstrukturen unterschiedlicher Festkörper |
| 4.2. | Strukturstabilisierung durch Verzerrung |
| 4.3. | Strukturänderungen mit Änderung der Zahl der e ⁻ |
| 4.4. | Strukturkarten und Bandstruktur |
| 5. | Bandstruktur und Eigenschaften |
| 5.1. | Eigenschaften von Metallen mit freien Elektronen |
| 5.2. | Halbleiter |
| 5.3. | Bandstruktur und Farbe |
| 5.4. | Magnetismus |
| 5.5. | Supraleitung |
| 6. | Grundprinzipien der Berechnung von Bandstrukturen |
| 6.1. | Problemstellung |
| 6.2. | EH-Methode |
| 6.3. | DFT-Methoden |
| 6.4. | HF-Methoden |
| 6.5. | Vergleich der Ergebnisse an ausgewählten Beispielen |
| 7. | Experimentelle Bestimmung von Bandstrukturen, Zustandsdichten, Fermiflächen |
| II. Jenseits der Bandstrukturbeschreibung | |
| 8. | Metall-Isolator-Übergänge |
| 9. | 'Exotische' Ladungsträger (Polaronen, Fermionen usw.) |
| 10. | Nichtkristalline Festkörper |

