

Theorie der Kondensierten Materie

Hintergrundrechnungen

erstellt von Tizian Römer

basierend auf der Vorlesung „Theorie der Kondensierten Materie I“ von Prof. Dr. Alexander Shnirman aus dem Wintersemester 2018/2019 am Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Dieses Skript ist eine Ergänzung zur zugehörigen *Zusammenfassung/Übersicht* und enthält Rechnungen, die in der *Zusammenfassung/Übersicht* aus Gründen der Übersicht weggelassen wurden. Referenzen der Form „(>3.5)“ beziehen sich auf Abschnitte in diesen *Hintergrundrechnungen*. Referenzen der Form „3.5“ beziehen sich auf Abschnitte in der *Zusammenfassung/Übersicht*.

Ich veröffentliche diese *Hintergrundrechnungen* wie auch die zugehörige separate Dokument *Zusammenfassung/Übersicht* inklusive der Grafiken unter der Creative-Commons-Lizenz [CC BY-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/). Zusammengefasst ist es jedem erlaubt, dieses Dokument (oder Teile daraus) zu beliebigen Zwecken zu verbreiten, solange der Name des Urhebers genannt wird.

Kontakt via E-Mail: tiroemer@yahoo.de

INHALTSVERZEICHNIS

1	Gitter und Bloch-Theorem.....	8
1.1	Laue-Bedingung.....	8
1.2	Bragg-Bedingung.....	8
1.3	Born-von-Kármán-Randbedingungen.....	10
1.4	Summe als Integral schreiben.....	10
1.5	Impulsintegral in Energieintegral umwandeln.....	11
1.6	Standard-Fouriertransformation.....	11
1.7	Fouriertransformation für diskrete Impulse.....	12
1.8	Fouriertransformation für gitterperiodische Funktionen.....	12
1.9	Fouriertransformation für Funktionen von Gittervektoren.....	13
1.10	Zerlegung einer Symmetrieoperation.....	14
1.11	Eigenschaften des Translationsoperators.....	14
1.12	Beweis des Bloch-Theorems.....	14
1.13	Schrödinger-Gleichung für Bloch-Koeffizienten.....	15
1.14	Schrödinger-Gleichung für Bloch-Zustände.....	16
1.15	Normierung der Fourierkoeffizienten von Bloch-Funktionen.....	16
1.16	Vollständigkeit der Fourierkoeffizienten von Bloch-Funktionen.....	16
1.17	Strukturfaktor.....	17
2	Elektronen in Festkörpern.....	18
2.1	Formel für Fourierkoeffizienten der Bloch-Zustände.....	18
2.2	Fast-freie Elektronen – Nicht-Entarteter Fall.....	18
2.3	Fast-freie Elektronen – Entarteter Fall.....	19
2.4	Zusammenhang mit der Laue-Bedingung – Bragg-Ebene.....	19
2.5	Wannier-Funktionen.....	20
2.6	Schrödinger-Gleichung mit Wannier-Funktionen.....	20
2.7	Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO).....	21
2.8	Ein Orbital pro Elementarzelle.....	22
2.9	Alternative Herleitung zum Tight-Binding Model.....	22
2.10	Ein Orbital pro Elementarzelle (Alternative Herleitung).....	24
2.11	Dispersionsrelation im eindimensionalen Gitter.....	24
2.12	Dispersionsrelation im bcc-Gitter.....	24
3	Dynamik unter externen Feldern.....	25
3.1	Vom Wellenpaket zur Gruppengeschwindigkeit.....	25
3.2	Besserer Beweis.....	25
3.3	Bewegungsgleichungen.....	27
3.4	Lorentz-Kraft.....	27
3.5	Bewegungsgleichungen für Bloch-Oszillationen.....	27

3.6	Umrechnung von reziproke in reale Trajektorien	27
3.7	Zyklotron-Frequenz und -Masse.....	27
3.8	Zyklotron-Masse für harmonische Dispersionsrelation.....	29
3.9	Born-Sommerfeld-Bedingung für den magnetischen Fluss.....	29
3.10	Quantisierung der Flächen und der Energien.....	30
3.11	Bei vollen Bändern fließt kein Strom.....	30
3.12	Strom als Funktional der Löcher-Besetzungszahl	31
4	Magnetismus.....	32
4.1	Großes Potential beim Pauli-Paramagnetismus	32
4.2	Landau-Energieniveaus.....	32
4.3	Entartung der Landau-Niveaus.....	33
4.4	Großes Potential für ideales Fermigas mit Landau-Niveau-Energien.....	33
4.5	Vereinfachungen mit Euler-Maclaurin-Formel	35
4.6	De-Haas-van-Alphen-Effekt	35
5	Die Berry-Phase.....	39
5.1	Einfacher Beweis des adiabatischen Theorems.....	39
5.2	Zweiter Beweis des adiabatischen Theorems.....	39
5.3	Die Berry-Phase	40
5.4	Beispiel: Spin im variablen Magnetfeld	41
6	Graphen	44
6.1	Basisvektoren des realen und reziproken Gitters.....	44
6.2	Bandstruktur nach Tight-Binding-Näherung.....	44
6.3	Näherung an den Ecken der ersten Brillouin-Zone	46
6.4	Hamilton-Operator mit Pauli-Matrizen	47
6.5	Landau-Niveaus	47
7	Boltzmann-Gleichung	50
7.1	Satz von Liouville	50
7.2	Hinreichende Bedingung für ein Gleichgewicht	50
7.3	Stoßintegral für elastische Stöße	51
7.4	Fermis Goldener Regel: Vereinfachung des Matrixelements	51
7.5	<i>Bemerkung zur Annahme für die Impuls-Relaxationszeit.....</i>	52
7.6	Impuls-Relaxationszeit	52
7.7	Transport-Relaxationszeit.....	53
7.8	Leitfähigkeitstensor	54
7.9	Leitfähigkeitstensor unter Sommerfeld-Näherung	55
7.10	Elektro-Chemisches Potential.....	56
7.11	Matrixgleichung für elektrischen und Wärmestrom	57
7.12	Wiedemann-Franz-Gesetz	57

7.13	Hall-Effekt – Form der Boltzmann-Gleichung.....	58
7.14	Hall-Effekt – Ansatz.....	59
7.15	Hall-Effekt – Lösen der Boltzmann-Gleichung.....	59
7.16	Hall-Effekt – Leitfähigkeitstensor	60
7.17	Hall-Effekt – Hall-Koeffizient.....	61
8	Zweite Quantisierung.....	62
8.1	Bosonen-Zustände	62
8.2	Matrizelement von bosonischen 1-Teilchen-Operatoren I	62
8.3	Matrizelement von bosonischen 1-Teilchen-Operatoren II.....	63
8.4	Erzeugungsoperator aus Definition des Vernichtungsoperators.....	64
8.5	1-Teilchen-Operator mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.....	65
8.6	Matrizelement von bosonischen 2-Teilchen-Operatoren I	65
8.7	2-Teilchen-Operator mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.....	66
8.8	Kommutatorrelationen für Feldoperatoren	67
8.9	1-Teilchen-Operator mit Feldoperatoren.....	67
8.10	Hamilton-Operator für Streuungen.....	67
8.11	Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bei Fermionen	69
8.12	Antikommutatorrelationen bei Fermionen	69
9	Wechselwirkungen	70
9.1	1-Teilchen-Korrelationsfunktion für freie Fermionen.....	70
9.2	2-Teilchen-Korrelationsfunktion für freie Fermionen.....	70
9.3	Analyse der 2-Teilchen-Korrelationsfunktion.....	72
9.4	Hamilton-Operator des wechselwirkenden Fermi-Gases.....	72
9.5	Erwartungswert der potentiellen Energie	73
9.6	Erwartungswert der kinetischen Energie	73
9.7	Erwartungswert der Wechselwirkungsenergie.....	74
9.8	Berechnung des Fock-Beitrags.....	75
9.9	Analyse der Energie	75
9.10	Energien der Quasiteilchen nahe der Fermi-Oberfläche.....	76
9.11	Mögliche Energieüberträge in Abhängigkeit vom Impulsübertrag.....	76
9.12	Energiebilanz der Streuung der Fermi-Flüssigkeit.....	77
9.13	Minimierung der Entropie.....	77
9.14	Boltzmann-Gleichung für den Nullten Schall	78
9.15	Ansatz für den Nullten Schall	79
10	Phononen	82
10.1	Eigenschaften der Koeffizienten und Bewegungsgleichung.....	82
10.2	Vererbung der Eigenschaften auf die neuen Koeffizienten.....	83
10.3	Bewegungsgleichungen in neuen Koordinaten.....	83

10.4	Fouriertransformation der Bewegungsgleichung.....	83
10.5	Die Matrix ist hermitesch.....	84
10.6	Eigenschaften der Eigenwerte und -vektoren	85
10.7	Grenzfall kleiner Wellenvektoren – Akustische Moden.....	85
10.8	Schwingungsbild akustischer Moden	86
10.9	Grenzfall kleiner Wellenvektoren – Optische Moden.....	87
10.10	Kinetische Energie	88
10.11	Potentielle Energie	89
10.12	Kanonischer Impuls	89
10.13	Leiteroperatoren.....	90
10.14	Hamilton-Operator mit Leiteroperatoren.....	90
10.15	Quantisierung der physikalischen Auslenkungen.....	90
10.16	Zustandsdichte von Phononen	91
10.17	Zustandsdichte von akustischen Phononen niedriger Impulse	91
10.18	Wärmekapazität bei hohen Temperaturen.....	92
10.19	Wärmekapazität bei niedrigen Temperaturen.....	93
10.20	Die Debye-Frequenz.....	93
10.21	Wärmekapazität im Debye-Modell.....	93
10.22	Wärmekapazität im Einstein-Modell.....	94
10.23	Differentieller Wirkungsquerschnitt bei Neutronenstreuung.....	95
10.24	Neutronen-Ionen-Wechselwirkung mit Fermis Goldener Regel.....	96
10.25	Strukturfaktor als Korrelationsfunktion der Ionendichte.....	97
10.26	Strukturfaktor für ein Atom pro Elementarzelle.....	97
10.27	Exponentialrelation aus Wick-Theorem	97
10.28	Berechnung des Debye-Waller-Faktors.....	98
10.29	Nullte Ordnung des Strukturfaktors	99
10.30	Erste Ordnung des Strukturfaktors.....	99
11	Elektron-Phonon-Wechselwirkungen.....	101
11.1	Dielektrizität als Proportionalitätsfaktor der Potentiale.....	101
11.2	Zusammenhang zwischen Dielektrizität und Suszeptibilität.....	101
11.3	Thomas-Fermi-Abschirmung mit elektrochemischem Potential.....	101
11.4	Berechnung der zusätzlich induzierten Ladungsdichte	102
11.5	Korrektur des Hamilton-Operators.....	102
11.6	Zweite Quantisierung der Korrektur des Hamilton-Operators.....	102
11.7	Fouriertransformation des Potentials.....	103
11.8	Matrixelement – Umklapp-Prozesse.....	104
11.9	Vereinfachende Annahmen.....	105
11.10	Zweite Ordnung Störungstheorie.....	105

11.11	Elektron-Elektron-Wechselwirkungen auf dem Fermi-See.....	106
11.12	Berechnung vom ungestörten Teil des Hamilton-Operators.....	107
11.13	Berechnung des Wechselwirkungsteils des Hamilton-Operators.....	107
11.14	Lösen der Schrödinger-Gleichung.....	109
11.15	Bindungsenergie von Cooper-Paar.....	109
11.16	Spin-Singulett-Zustand.....	109
12	BCS-Theorie.....	111
12.1	Hamilton-Operator in BCS-Theorie.....	111
12.2	Normierung des BCS-Zustands.....	111
12.3	Matrizelement des ungestörten Hamilton-Operators.....	112
12.4	Matrizelement des wechselwirkenden Hamilton-Operators.....	113
12.5	Energie des BCS-Zustands.....	114
12.6	Variationsprinzip.....	115
12.7	Selbstkonsistenz.....	116
12.8	Vergleich mit dem Fermi-Flüssigkeit-Zustand.....	116
12.9	Die neuen Leiteroperatoren erfüllen die Fermionen Kommutator-Algebra.....	117
12.10	Invertieren der neuen Leiteroperatoren.....	118
12.11	Der Norm-Zustand ist ein Vakuum bzgl. der neuen Leiteroperatoren.....	118
12.12	Der BCS-Zustand ist ein Vakuum bzgl. der neuen Leiteroperatoren.....	119
12.13	Produkte von alten durch neue Leiteroperatoren ausdrücken.....	119
12.14	Mean-Field-Hamilton-Operator.....	120
12.15	Diagonalisieren des Mean-Field-Hamilton-Operators.....	120
12.16	Alternative Darstellung des Hamilton-Operators.....	122
12.17	Kritische Temperatur durch Selbstkonsistenz.....	124
12.18	Wärmekapazität.....	124
13	Elektrodynamik von Supraleitern.....	127
13.1	Weg zur London-Gleichung.....	127
13.2	Alternative Formen der London-Gleichung.....	127
13.3	London-Eindringtiefe.....	128
13.4	Nullte Ordnung Störungstheorie – Kinetische Energie freier Elektronen.....	128
13.5	Teilchendichte in zweiter Quantisierung und diamagnetischer Strom.....	128
13.6	Erwartungswerte im korrigierten Zustand.....	129
13.7	Matrizelement mit Störungs-Hamilton-Operator.....	129
13.8	Grenzfall eines konstanten Vektorpotentials.....	131
13.9	Verhalten für fast konstantes Vektorpotential.....	131
13.10	Phase im BCS-Zustand.....	131
14	Supraleiter in Landau-Theorie.....	133
14.1	Minimum des Landau-Funktional – Ortsunabhängig.....	133

14.2	Minimum des Landau-Funktional – Ortsabhängig	133
14.3	Minimum des Landau-Funktional – Ortsabhängig – Strom	134
14.4	Variation der reellen Wellenfunktion.....	134
14.5	Kohärenzlänge des normalen Zustands	135
14.6	Kohärenzlänge des supraleitenden Zustands	135
14.7	Externes Magnetfeld: Änderung des Landau-Funktional	135
14.8	Reduzierte Freie Energie I.....	135
14.9	Reduzierte Euler-Lagrange-Gleichungen.....	136
14.10	Reduzierte Freie Energie II	137
14.11	Keine freie Energiedifferenz beim Kritischen Externen Feld.....	137

1 GITTER UND BLOCH-THEOREM

1.1 Laue-Bedingung

Man betrachte Streuung am Gitter. Exemplarisch sind als Gitterpunkte zwei schwarze Punkte gezeichnet, die um einen Gittervektor \vec{R} gegeneinander verschoben sind. Durch Streuung an den beiden Gitterpunkten ergibt sich für die beiden ausfallenden Welle mit Wellenvektor \vec{k}' der Gangunterschied

$$\delta = \delta_1 + \delta_2 = R \cos \theta + R \cos \theta'.$$

Schreibt man einen Wellenvektor als Produkt aus Einheitsvektor und Betrag, also

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}, \quad \vec{k}' = \frac{2\pi}{\lambda'} \vec{n}',$$

wobei im Folgenden angenommen wird, dass die Streuung elastisch ist, also $\lambda' = \lambda$, so lässt sich der $\cos \theta$ als Skalarprodukt schreiben und es ergibt sich

$$\delta = -\vec{R} \cdot \vec{n} + \vec{R} \cdot \vec{n}' = \frac{\lambda}{2\pi} \vec{R} \cdot (-\vec{k} + \vec{k}') \stackrel{!}{=} m\lambda \quad \Leftrightarrow \quad \vec{R} \cdot (\vec{k}' - \vec{k}) = 2\pi m,$$

wobei für konstruktive Interferenz $\delta = m\lambda$ mit $m \in \mathbb{N}$ gefordert wurde. Da aus der Definition des reziproken Gittervektors \vec{K} ,

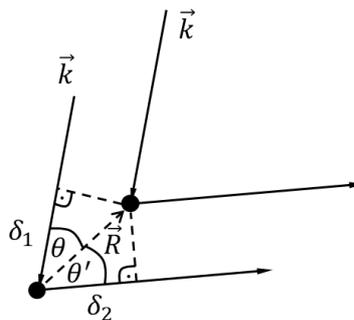
$$e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} = 1$$

folgt, dass

$$\vec{R} \cdot \vec{K} = 2\pi m$$

gilt, muss für konstruktive Interferenz die Differenz aus ausfallendem und einfallendem Wellenvektor einem reziproken Gittervektor entsprechend. Das ist die Laue Bedingung:

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}.$$

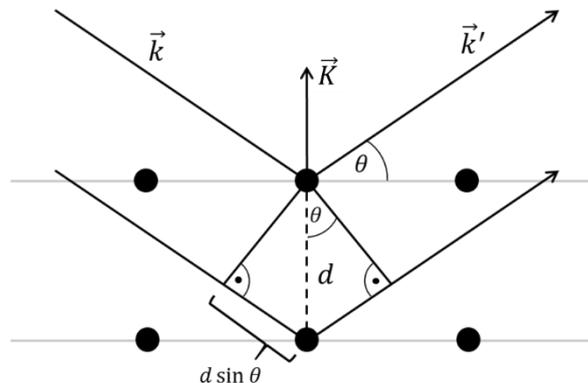


1.2 Bragg-Bedingung

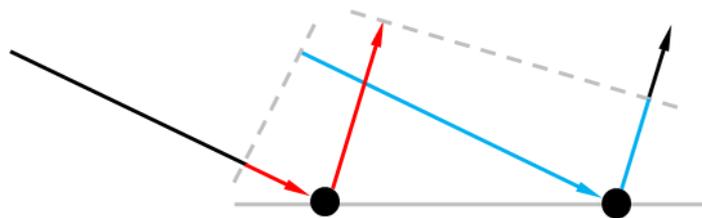
Man betrachte eine konstruktive Interferenz, die der Laue-Bedingung $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$ für einen bestimmten reziproken Gittervektor \vec{K} genügt. Zu diesem \vec{K} findet man immer einen Gittervektor $\vec{R} \neq 0$ mit $\vec{K} \cdot \vec{R} = 0$, denn man wird für jedes feste \vec{K} mit festen $n_i \in \mathbb{Z}$ mehrere Lösungen von \vec{R} -Koeffizienten $n'_i \in \mathbb{Z}$ finden, für die

$$\vec{K} \cdot \vec{R} = (n_i \vec{b}_i) \cdot (n'_j \vec{a}_j) = n_i n'_j \vec{a}_j \cdot \vec{b}_i = 2\pi n_i n'_j \delta_{ij} = 2\pi n_i n'_i = 0$$

gilt. Da das Skalarprodukt verschwindet, liegen alle diese \vec{R} in einer Ebene *senkrecht* zu \vec{K} . Zu jedem reziproken Gittervektor \vec{K} gibt es daher eine Ebenenschar, die senkrecht auf \vec{K} steht. Da $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$ sowie $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ gilt, bedeutet dies, dass die Streuung bzgl. der Ebenenschar senkrecht zu \vec{K} dem Gesetz *Ausfallswinkel gleich Einfallswinkel* genügt.



Die Bragg-Bedingung betrachtet eine solche Ebenenschar senkrecht zu \vec{K} unter der Annahme Ausfallswinkel gleich Einfallswinkel. Diese Annahme lässt sich nicht nur – wie wir es gerade getan haben – aus der Laue-Bedingung ableiten, sondern auch folgendermaßen Begründen: Zwei Lichtstrahlen, die an zwei verschiedenen Atomen *derselben* Ebene streuen, haben einen Gangunterschied, falls *nicht* Ausfallswinkel gleich Einfallswinkel gilt; der Gangunterschied in untenstehender Skizze verschwindet nicht, da die blaue Strecke deutlich länger ist, als die rote.



Bei der Streuung an Atomen *derselben* Ebene kommt es somit nur zu konstruktiver Interferenz, falls Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel gilt. Zwar wäre es denkbar, dass es auch in dem Fall, dass der Ausfallswinkel nicht gleich dem Einfallswinkel ist, zu konstruktiver Interferenz von Lichtstrahlen kommt, die an Atomen *unterschiedlicher* Ebenen streuen. Allerdings wird die destruktive Interferenz von Streuungen an Atomen derselben Ebene immer dafür sorgen, dass am Ende keine Intensität übrigbleibt.

Mit der Annahme Ausfallswinkel gleich Einfallswinkel sieht man anhand obiger Skizze nun direkt, dass der Gangunterschied der beiden Lichtstrahlen $2d \sin \theta$ ist, sodass für konstruktive Interferenz sofort $n\lambda = 2d \sin \theta$ folgt. Im Folgenden wollen wir aber noch sehen, wie wir diese Beziehung auch mathematisch aus der Laue-Bedingung ableiten können.

Aus der Laue-Bedingung folgt wegen $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$, dass

$$\begin{aligned} \vec{k}'^2 &= (\vec{K} + \vec{k})^2 = \vec{K}^2 + \vec{k}^2 + 2\vec{K} \cdot \vec{k} \\ \Leftrightarrow K^2 := \vec{K}^2 &= -2\vec{K} \cdot \vec{k} = 2Kk \cos(\pi - \theta) = 2K \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta \\ \Leftrightarrow K &= \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta. \end{aligned}$$

Für die betrachtete Ebenenschar, ist der dazu senkrechte reziproke Gittervektor \vec{K} nicht eindeutig; für einen kürzesten Vektor \vec{K}_0 ist auch $n\vec{K}_0$ mit $n \in \mathbb{Z} \setminus 0$ ein reziproker Gittervektor, der senkrecht auf

derselben Ebenenschar steht. Nun gilt (ohne Beweis¹) $K_0 = 2\pi/d$, wobei d der Abstand benachbarter Gitterebenen ist. Somit folgt die Bragg-Bedingung

$$n \frac{2\pi}{d} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \quad \Leftrightarrow \quad n\lambda = 2d \sin \theta.$$

1.3 Born-von-Kármán-Randbedingungen

Die Fourierentwicklung

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}, \quad \vec{q} \equiv \vec{q}_{\{m_i\}} = \sum_i \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i.$$

erfüllt die Born-von-Kármán-Randbedingungen automatisch. Dabei wird über alle $\vec{q} \equiv \vec{q}_{\{m_i\}}$ summiert, die sich für verschiedene Dreier-Tupel $\{m_i\} = (m_1, m_2, m_3)$ erzeugen lassen. Die Erfüllung der Born-von-Kármán-Randbedingungen lässt sich leicht zeigen:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) &= \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + N_i \vec{a}_i)} = \sum_{\{m_i\}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q}_{\{m_i\}} \cdot \vec{r}} e^{i \sum_j \frac{m_j}{N_j} \vec{b}_j \cdot N_i \vec{a}_i} = \sum_{\{m_i\}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q}_{\{m_i\}} \cdot \vec{r}} e^{i2\pi \sum_j \frac{m_j}{N_j} N_i \delta_{ij}} \\ &= \sum_{\{m_i\}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q}_{\{m_i\}} \cdot \vec{r}} e^{i2\pi \frac{m_i}{N_i} N_i} = \sum_{\{m_i\}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q}_{\{m_i\}} \cdot \vec{r}} e^{i2\pi m_i} = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = \psi(\vec{r}). \end{aligned}$$

1.4 Summe als Integral schreiben

Aus der Definition

$$\vec{q}_{\{m_i\}} = \sum_i \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$$

folgt sofort, dass es in jeder Elementarzelle im reziproken Raum genau N verschiedene Vektoren $\vec{q} = \vec{q}_{\{m_i\}}$ liegen. Das Volumen einer solchen Einheitszelle ist²

$$\Omega_{\text{rez}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}.$$

In Ω_{rez} liegen also N Punkte \vec{q} , somit steht jedem \vec{q} das reziproke Raumelement

$$\Delta^3 q = \frac{\Omega_{\text{rez}}}{N} = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

zur Verfügung. Somit folgt für irgendeiner Summe über \vec{q}

¹ Die Formel ist im Prinzip analog zur Formel für den Abstand benachbarter paralleler Ebenen einer Schar mit Millerschen Indizes (hkl)

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3|}.$$

Der reziproke Gittervektor $h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ steht dabei immer senkrecht auf dieser Ebenenschar.

² Sei $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ das Volumen einer Elementarzelle im realen Raum, dann ist

$$\begin{aligned} \Omega_{\text{rez}} &= \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)_i ((\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2))_i \\ &= \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)_i \epsilon_{ijk} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)_j (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)_k = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)_i \underbrace{\epsilon_{ijk} \epsilon_{klm}}_{=\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)_j a_{1l} a_{2m} \\ &= \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)_i \left((\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)_j a_{1i} a_{2j} - \underbrace{(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)_j a_{1j} a_{2i}}_{=0} \right) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)_i \Omega a_{1i} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}. \end{aligned}$$

$$\sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) = \sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \frac{\Delta^3 q}{(2\pi)^3/V} \xrightarrow{\Delta^3 q \rightarrow 0} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3/V} f(\vec{q}) =: \int d^3 \bar{q} f(\vec{q}),$$

wobei wir $d^3 \bar{q}$ als Abkürzung eingeführt haben.

1.5 Impulsintegral in Energieintegral umwandeln

Die Zustandsdichte im reziproken Raum oder Impulsraum ist für ein Kastenpotential (wie wir es bei Metallen stets annehmen) konstant¹ $g(\vec{q}) = V/(2\pi)^3$. Per Definition ergibt sich daraus die Zustandsdichte im Energieraum, falls die Energie nur vom Betrag von \vec{q} abhängt, durch²

$$g(\vec{q}) d^3 q = g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq = g(\mathcal{E}) d\mathcal{E}.$$

Falls nun zwar die Energie nur vom Betrag von \vec{q} abhängt, der *Integrand* jedoch nicht, ist dies dadurch zu berücksichtigen, dass $d^3 q = d\Omega_{\vec{q}} q^2 dq$ anstelle von $4\pi q^2 dq$ ist. Gleichwohl können wir unsere obige Formel für die Energie-Zustandsdichte im letzten Schritt einsetzen:

$$d^3 \bar{q} = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 q = \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega_{\vec{q}} q^2 dq = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq \frac{d\Omega_{\vec{q}}}{4\pi} = g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \frac{d\Omega_{\vec{q}}}{4\pi}.$$

1.6 Standard-Fouriertransformation

Die übliche Konvention der Fouriertransformation ist

$$f(\vec{q}) = \int d^3 r f(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad f(\vec{r}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}.$$

Man kann jedoch ohne weiteres ein V aus $f(\vec{q})$ herausziehen, also $f(\vec{q}) \rightarrow Vf(\vec{q})$ ersetzen, und man erhält

$$f(\vec{q}) = \frac{1}{V} \int d^3 r f(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad f(\vec{r}) = \int \underbrace{\frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V}_{=d^3 \bar{q}} f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}.$$

Wir werden diese Konvention benutzen, da sie den Vorteil hat, dass $f(\vec{r})$ and $f(\vec{q})$ von der gleichen Dimension sind.

Kommen wir nun zu den δ -Funktionen. Wir wissen, dass

$$\frac{1}{V} \int d^3 r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sim \delta(\vec{q}),$$

denn für $\vec{q} = 0$ ist das Integral unendlich und für $\vec{q} \neq 0$ addiert das Integral alle Punkte auf einem Einheitskreis in der komplexen Ebene auf, was null ergibt. Die Fouriertransformation von $f(\vec{r}) = 1$ ist also proportional zur δ -Funktion, $f(\vec{q}) = c\delta(\vec{q})$. Den Proportionalitätsfaktor c , finden wir, indem wir Konsistenz mit der Rücktransformation fordern:

$$f(\vec{r}) = 1 \stackrel{!}{=} \int d^3 \bar{q} \underbrace{c\delta(\vec{q})}_{=f(\vec{q})} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = c \frac{1}{(2\pi)^3/V} \int d^3 q \delta(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{c}{(2\pi)^3/V} \quad \Leftrightarrow \quad c = \frac{(2\pi)^3}{V}.$$

¹ Im Skript von Prof. Shnirman wird die Zustandsdichte stets pro Volumen definiert, sodass $g(\vec{q}) = 1/(2\pi)^3$. Das Fehlen von V pflanzt sich auch auf die Zustandsdichte der Energie fort. Es gilt also stets $g(\mathcal{E}) = V g_{\text{Shnirman}}(\mathcal{E})$.

² Oftmals ist die Zustandsdichte auch exklusive des Volumens V definiert; so auch im Shnirman-Skript. In diesem Fall wird das V nicht in das $g(\mathcal{E})$ absorbiert, sondern verbleibt als zusätzlicher Faktor im Endergebnis.

Also gilt

$$\frac{1}{V} \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\vec{q}) \quad \Leftrightarrow \quad \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{q}).$$

Offensichtlich folgt daraus sofort

$$\int d^3\vec{q} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{V}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta(\vec{r}) = V\delta(\vec{r}).$$

1.7 Fouriertransformation für diskrete Impulse

Wie wir in Abschnitt 1.4 gesehen haben, können wir für diskrete \vec{q} , wie sie unter Born-van-Kármán-Randbedingungen auftreten, das Integral der Rücktransformation unserer Standard-Fouriertransformation in eine Summe umschreiben:

$$f(\vec{r}) = \int d^3\vec{q} f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}.$$

An der Hintransformation ändert sich dadurch nichts. Allerdings wollen wir nun $f(\vec{q})$ für $f(\vec{r}) = 1$ nicht mehr als δ -Funktion, sondern als Kronecker-Delta schreiben, schließlich haben wir nunmehr eine Summe über \vec{q} und kein Integral mehr. Wenn wir

$$f(\vec{q}) = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{q}0}$$

schreiben, bekommen wir die konsistente Rücktransformation

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}0} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = 1.$$

Umgekehrte, wenn wir für $f(\vec{q}) = 1$

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = V\delta(\vec{r})$$

schreiben, bekommen wir die konsistente Hintransformation

$$f(\vec{q}) = \frac{1}{V} \int d^3r V\delta(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = 1.$$

1.8 Fouriertransformation für gitterperiodische Funktionen

Für eine in \vec{R} periodische Funktion, d. h. mit $f(\vec{r} + \vec{R}) = f(\vec{r})$ folgt

$$f(\vec{q}) = \frac{1}{V} \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} f(\vec{q}).$$

Dabei haben wir beim zweiten Gleichheitszeichen die Integrationsvariable $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{R}$ geschiftet und die Periodizität von $f(\vec{r})$ ausgenutzt. Alle \vec{q} mit $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} = 1$ sind per Definition reziproke Gittervektoren \vec{Q} . Für $\vec{q} \neq \vec{Q}$ gilt daher immer $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \neq 1$ und die einzige Möglichkeit, obige Gleichung zu erfüllen, ist $f(\vec{q}) = 0$. Für gitterperiodische Funktionen bleiben also nur die Fourierkomponenten der reziproken Gittervektoren erhalten. Aus den Formeln der Fouriertransformation für diskrete \vec{q} 's folgt somit sofort¹

¹ Das Integral über das gesamte Volumen V können wir als Summe über Integrale über alle Elementarzellen Ω schreiben:

$$f(\vec{Q}) = \frac{1}{V} \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}, \quad f(\vec{r}) = \sum_{\vec{Q}} f(\vec{Q}) e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}}.$$

Dass die Vorfaktoren V in $\int d^3r e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = V\delta_{\vec{Q}0}$ und $\sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = V\delta(\vec{r})$ so stimmen, lässt sich wieder einfach über Selbstkonsistenz zeigen:

$$f(\vec{r}) = 1 \quad \Rightarrow \quad f(\vec{Q}) = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{Q}0} \quad \Rightarrow \quad f(\vec{r}) = \sum_{\vec{Q}} \delta_{\vec{Q}0} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = 1,$$

$$f(\vec{Q}) = 1 \quad \Rightarrow \quad f(\vec{r}) = \sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = V\delta(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad f(\vec{Q}) = \frac{1}{V} \int d^3r V\delta(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = 1.$$

1.9 Fouriertransformation für Funktionen von Gittervektoren

Hängt eine Funktion nur von Gittervektoren \vec{R} ab (und nicht von beliebigen Orten \vec{r}), so ist sie periodisch in \vec{Q} . Dies ist der umgekehrte Fall zu in \vec{R} periodischen Funktionen; dort hingen die Fourierkoeffizienten nur von \vec{Q} (und nicht beliebigen reziproken Vektoren \vec{q}) ab. Die Hintransformation im jetzigen Fall entspricht daher der Rücktransformation im Fall \vec{R} -periodischer Funktionen:

$$f(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}} f(\vec{R}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}}.$$

Für $f(\vec{R}) = 1$ folgt

$$f(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} = N\delta_{\vec{q}0},$$

denn für $\vec{q} \neq 0$ heben sich alle Summanden, die Punkten auf dem komplexen Einheitskreis entsprechen, gerade auf und für $\vec{q} = 0$ entspricht die Summe der Anzahl der Summanden, also der Anzahl an Gittervektoren, also N .

Wegen $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} = 1$ gilt offensichtlich $f(\vec{q}) = f(\vec{q} + \vec{Q})$. Daher genügt es, nur über \vec{q} 's aus der ersten Brillouin-Zone zu summieren (analog zur Fußnote auf Seite 12).

Wegen dem N vor dem obigen Kronecker-Delta, brauchen wir, um Konsistenz zu erzielen, bei der Rücktransformation einen Faktor $1/N$:

$$1 = f(\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in 1.BZ} f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in 1.BZ} N\delta_{\vec{q}0} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}}.$$

Genauso gilt natürlich für $f(\vec{q}) = 1$

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in 1.BZ} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} = \frac{1}{N} N\delta_{\vec{R}0},$$

$$\begin{aligned} f(\vec{Q}) &= \frac{1}{V} \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{R}} \int_{\Omega} d^3r f(\vec{r} + \vec{R}) e^{-i\vec{Q}\cdot(\vec{r} + \vec{R})} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{R}} \int_{\Omega} d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \\ &= \frac{1}{V} \int_{\Omega} d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}. \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Periodizität von f sowie $e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R}} = 1$ ausgenutzt, sodass das Integral von \vec{R} unabhängig wurde. Anschließend haben wir $\sum_{\vec{R}} 1 = N$ und $V/N = \Omega$ verwendet.

denn es gibt N Vektoren \vec{q} in der ersten Brillouin-Zone (unter Born-van-Kármán-Randbedingungen).

1.10 Zerlegung einer Symmetrieoperation

Man betrachte eine beliebige Symmetrieoperation S . Angewendet auf den Gitterpunkt im Ursprung ergibt sich wieder ein neuer Gitterpunkt $\vec{R} = S\vec{0}$, da S eine Symmetrieoperation für das betrachtete Gitter ist. Sei $T_{\vec{R}}$ eine Translationsoperation um \vec{R} , dann gilt $\vec{0} = T_{\vec{R}}^{-1}S\vec{0}$. Also ist $T_{\vec{R}}^{-1}S$ eine Punktsymmetrieoperation (d. h. eine Operation, die mindestens einen Gitterpunkt unverändert lässt). Da man S schreiben kann als

$$S = T_{\vec{R}}(T_{\vec{R}}^{-1}S)$$

lässt sich S in eine Translation und eine Punktsymmetrieoperation aufteilen.

1.11 Eigenschaften des Translationsoperators

Der Translationsoperator ist unitär, das heißt $T_{\vec{R}}^{-1} = T_{\vec{R}}^\dagger$, da

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | T_{\vec{R}} \psi_2 \rangle &= \int d^3r \psi_1^*(\vec{r}) T_{\vec{R}} \psi_2(\vec{r}) = \int d^3r \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r} + \vec{R}) = \int d^3r \psi_1^*(\vec{r} - \vec{R}) \psi_2(\vec{r}) \\ &= \int d^3r (T_{\vec{R}}^{-1} \psi_1(\vec{r}))^* \psi_2(\vec{r}) = \langle T_{\vec{R}}^{-1} \psi_1 | \psi_2 \rangle. \end{aligned}$$

Dabei wurde verwendet, dass offensichtlich $T_{\vec{R}}^{-1} = T_{-\vec{R}}$ gilt. Der Translationsoperator kommutiert ferner mit dem Hamilton-Operator, da

$$T_{\vec{R}} H(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = H(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r}) T_{\vec{R}} \psi(\vec{r}),$$

wobei verwendet wurde, dass der Hamilton-Operator $H = p^2/2m + U(\vec{r})$ periodisch in den Gittervektoren ist, was der Fall ist, wenn $U(\vec{r})$ diese Periodizität besitzt.

Zudem bildet der Translationsoperator $T_{\vec{R}}$ für alle \vec{R} aus einem Bravais-Gitter eine abelsche Gruppe, denn die entsprechende Menge $\{T_{\vec{R}}\}$

$$\begin{aligned} \text{ist abgeschlossen,} & & T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} &= T_{\vec{R} + \vec{R}'} \in \{T_{\vec{R}}\}, \\ \text{besitzt ein neutrales Element,} & & T_{\vec{0}} &\in \{T_{\vec{R}}\}, \\ \text{sowie ein inverses Element,} & & T_{\vec{R}}^{-1} &= T_{-\vec{R}} \in \{T_{\vec{R}}\}. \end{aligned}$$

1.12 Beweis des Bloch-Theorems

Da $[T_{\vec{R}}, H] = 0$, existiert eine gemeinsame Basis ψ aller Translationsoperatoren und dem Hamilton-Operator mit

$$H\psi = E\psi, \quad T_{\vec{R}}\psi = c_{\vec{R}}\psi.$$

Aus $T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} = T_{\vec{R} + \vec{R}'}$ und $T_{\vec{R}}^{-1} = T_{\vec{R}}^\dagger$ folgt für die $c_{\vec{R}}$ 's¹

$$T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} \psi = \begin{cases} c_{\vec{R}'} c_{\vec{R}} \psi \\ T_{\vec{R} + \vec{R}'} \psi = c_{\vec{R} + \vec{R}'} \psi \end{cases} \iff c_{\vec{R}'} c_{\vec{R}} = c_{\vec{R} + \vec{R}'},$$

¹ Wir benutzen hier $T_{\vec{R}}^\dagger \psi = c_{\vec{R}}^* \psi$. Dies können wir mit $\int dV \psi^* \psi$ folgern aus

$$c_{\vec{R}} = \int dV \psi^* T_{\vec{R}} \psi = \int dV (T_{\vec{R}}^\dagger \psi)^* \psi.$$

Denn der letzte Ausdruck gibt genau dann wie gefordert $c_{\vec{R}}$, falls $T_{\vec{R}}^\dagger \psi = c_{\vec{R}}^* \psi$.

$$\psi = T_{\vec{R}} T_{\vec{R}}^\dagger \psi = c_{\vec{R}}^* c_{\vec{R}} \psi \quad \Leftrightarrow \quad |c_{\vec{R}}| = 1.$$

Somit können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $c_{\vec{a}_i} = e^{2\pi i x_i}$ für irgendein x_i schreiben. Wir beginnen nun bei $c_{\vec{R}}$ und nutzen zweimal $c_{\vec{R}'} c_{\vec{R}} = c_{\vec{R}+\vec{R}'}$, um daraus $\Pi_i c_{\vec{a}_i}^{n_i}$ zu machen:¹

$$c_{\vec{R}} = c_{n_i \vec{a}_i} = \Pi_i c_{n_i \vec{a}_i} = \Pi_i c_{\vec{a}_i}^{n_i} = e^{2\pi i n_i x_i} = e^{i x_i \vec{b}_i \cdot n_j \vec{a}_j} = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}},$$

wobei $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ verwendet und $\vec{k} := x_i \vec{b}_i$ definiert wurde. \vec{k} spielt hier die Rolle der Quantenzahl des Translationsoperators. Es gibt also für jedes \vec{k} ein Eigenwert-Eigenfunktion-Pärchen:

$$T_{\vec{R}} \psi_{\vec{k}} = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}.$$

Im allgemeinsten Fall wird diese Gleichung gelöst durch

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

mit irgendeiner Funktion $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$, die periodisch im Gitter ist, wie sich leicht zeigen lässt:

$$T_{\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i \vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} \underbrace{u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})}_{=u_{\vec{k}}(\vec{r})} = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}.$$

Und wegen $[T_{\vec{R}}, H] = 0$ sind diese Wellenfunktionen auch Eigenfunktionen des Hamilton-Operators.

1.13 Schrödinger-Gleichung für Bloch-Koeffizienten

Wie in (>1.3) gezeigt, erfüllt die Fourierentwicklung

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}, \quad \vec{q} = \sum_i \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$$

automatisch die Born-von-Kármán-Randbedingungen. Das in \vec{R} periodische Potential $U(\vec{r})$ lässt sich ebenfalls fourierentwickeln, wobei nur über reziproke Gittervektoren summiert werden muss (>1.8):

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{Q}} U_{\vec{Q}} e^{i \vec{Q} \cdot \vec{r}}, \quad U_{\vec{Q}} = \frac{1}{\Omega} \int_{\text{Elementarzelle}} d^3 r U(\vec{r}) e^{-i \vec{Q} \cdot \vec{r}}.$$

Die Formel für $U_{\vec{Q}}$ entspricht der inversen Fouriertransformation, geschrieben als Integral, wobei nur über eine Elementarzelle integriert werden muss, da der Integrand periodisch in den Elementarzellen ist. Da $U(\vec{r})$ reell ist, gilt auch $U_{\vec{Q}}^* = U_{-\vec{Q}}$. Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$\begin{aligned} E \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} &= \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\vec{q}^2}{2m} c_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} + \sum_{\vec{Q}} U_{\vec{Q}} c_{\vec{q}} e^{i(\vec{Q}+\vec{q}) \cdot \vec{r}} \right) \\ &= \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\vec{q}^2}{2m} c_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} + \sum_{\vec{Q}} U_{\vec{Q}} c_{\vec{q}-\vec{Q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} \right), \end{aligned}$$

wobei in der \vec{q} -Summe des letzten Terms $\vec{q} \rightarrow \vec{q} - \vec{Q}$ ersetzt wurde. Da die Exponentialfunktionen vollständig sind, gilt nun auch

¹ Bei doppelten Indizes wird hier wie üblich die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, es sei denn, über den Index wird explizit (gekennzeichnet durch Π_i) multipliziert.

$$\left(E - \frac{\vec{q}^2}{2m}\right) c_{\vec{q}} = \sum_{\vec{Q}} U_{\vec{Q}} c_{\vec{q}-\vec{Q}}.$$

1.14 Schrödinger-Gleichung für Bloch-Zustände

Die angegebene Schrödinger-Gleichung für die Bloch-Zustände $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ ist äquivalent zu jener für die Koeffizienten $c_{\vec{k}+\vec{Q}}$. Wir zeigen dies rückwärts, indem wir die Fourierentwicklung der Bloch-Zustände

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{Q}} c_{\vec{k}+\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$$

in die Schrödinger-Gleichung einsetzen:

$$\begin{aligned} & \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m}(\vec{k} - i\nabla)^2\right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = U(\vec{r}) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \\ \Leftrightarrow & \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m}(\vec{k} - i\nabla)^2\right) \sum_{\vec{Q}} c_{\vec{k}+\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{Q}'} U_{\vec{Q}'} e^{i\vec{Q}'\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{Q}} c_{\vec{k}+\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \\ \Leftrightarrow & \sum_{\vec{Q}} \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m}(\vec{k} + \vec{Q})^2\right) c_{\vec{k}+\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{Q}'\vec{Q}} U_{\vec{Q}'} c_{\vec{k}+\vec{Q}} e^{i(\vec{Q}'+\vec{Q})\cdot\vec{r}} \\ \Leftrightarrow & \sum_{\vec{Q}} \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m}(\vec{k} + \vec{Q})^2\right) c_{\vec{k}+\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{Q}'\vec{Q}} U_{\vec{Q}'} c_{\vec{k}+\vec{Q}-\vec{Q}'} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \\ \Leftrightarrow & \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m}(\vec{k} + \vec{Q})^2\right) c_{\vec{k}+\vec{Q}} = \sum_{\vec{Q}'} U_{\vec{Q}'} c_{\vec{k}+\vec{Q}-\vec{Q}'} \end{aligned}$$

1.15 Normierung der Fourierkoeffizienten von Bloch-Funktionen

Aus der Normierungsbedingung für die Bloch-Zustände folgt

$$\begin{aligned} \delta_{nn'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} & \stackrel{!}{=} \frac{1}{V} \langle \psi_{n,\vec{k}} | \psi_{n',\vec{k}'} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r \psi_{n,\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n',\vec{k}'}(\vec{r}) \\ & = \frac{1}{V} \sum_{\vec{Q}\vec{Q}'} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}'+\vec{Q}'} e^{-i(\vec{k}+\vec{Q})\cdot\vec{r}} e^{i(\vec{k}'+\vec{Q}')\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{Q}\vec{Q}'} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}'+\vec{Q}'} e^{-i(\vec{k}+\vec{Q}-\vec{k}'+\vec{Q}')\cdot\vec{r}} \\ & = \sum_{\vec{Q}\vec{Q}'} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}'+\vec{Q}'} \delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'+\vec{Q}'} \end{aligned}$$

Da $\vec{k}, \vec{k}' \in 1. \text{ BZ}$, folgt $\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'+\vec{Q}'} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\vec{Q}\vec{Q}'}$ und somit

$$\delta_{nn'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \stackrel{!}{=} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{\vec{Q}\vec{Q}'} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}'+\vec{Q}'} \delta_{\vec{Q}\vec{Q}'} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{\vec{Q}} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}+\vec{Q}}$$

Dabei haben wir einmal $\vec{k}' \rightarrow \vec{k}$ ersetzt, da für den Fall $\vec{k}' \neq \vec{k}$ der komplette Ausdruck wegen dem Kronecker-Delta $\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$ ohnehin verschwindet. Somit folgt

$$\sum_{\vec{Q}} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}+\vec{Q}} = \delta_{nn'}$$

1.16 Vollständigkeit der Fourierkoeffizienten von Bloch-Funktionen

Wir fordern zunächst, dass die Bloch-Zustände vollständig sind und setzen die Fourierzerlegung ein:

$$\delta(\vec{r}' - \vec{r}) \stackrel{!}{=} \frac{1}{V} \sum_{n, \vec{k} \in 1. \text{ BZ}} \psi_{n, \vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{n, \vec{k} \in 1. \text{ BZ}} \sum_{\vec{Q}, \vec{Q}' } c_{n, \vec{k} + \vec{Q}}^* c_{n, \vec{k} + \vec{Q}'} e^{-i(\vec{k} + \vec{Q}) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{k} + \vec{Q}') \cdot \vec{r}'}$$

Wenn wir nun die Relation

$$\sum_n c_{n, \vec{k} + \vec{Q}}^* c_{n, \vec{k} + \vec{Q}'} = \delta_{\vec{Q}, \vec{Q}'}$$

hätten, würden wir daraus Folgendes erhalten:

$$\delta(\vec{r}' - \vec{r}) \stackrel{!}{=} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \in 1. \text{ BZ}} \sum_{\vec{Q}, \vec{Q}' } \delta_{\vec{Q}, \vec{Q}'} e^{-i(\vec{k} + \vec{Q}) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{k} + \vec{Q}') \cdot \vec{r}'} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \in 1. \text{ BZ}} \sum_{\vec{Q}} e^{i(\vec{k} + \vec{Q}) \cdot (\vec{r}' - \vec{r})}$$

Während der Summen über \vec{Q} und $\vec{k} \in 1. \text{ BZ}$ wird der gesamte reziproke Raum abgedeckt. Wir können somit die beiden Summen in ein Integral über den kompletten reziproken Raum überführen, wie in Abschnitt 1.4:

$$\delta(\vec{r}' - \vec{r}) \stackrel{!}{=} \frac{1}{V} \int d^3 \vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} = \frac{1}{V} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 / V} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} = \delta(\vec{r}' - \vec{r}).$$

Somit brauchen wir obige Relation der Fourierkoeffizienten, um die gewünschte Vollständigkeit der Bloch-Zustände zu erhalten.

1.17 Strukturfaktor

Mit der Fouriertransformation aus Abschnitt 1.5 für in \vec{R} periodische Funktionen folgt für den Fourierkoeffizienten des Potentials $U(\vec{r})$

$$\begin{aligned} U_{\vec{Q}} &= \frac{1}{V} \int d^3 r U(\vec{r}) e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3 r U(\vec{r}) e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3 r e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \sum_{\vec{R}, i} \varphi(\vec{r} - \vec{R} - \vec{a}_i) \\ &= \frac{1}{\Omega} \int d^3 r e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \sum_i \varphi(\vec{r} - \vec{a}_i) = \frac{1}{\Omega} \int d^3 r \sum_i e^{-i\vec{Q} \cdot (\vec{r} + \vec{a}_i)} \varphi(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_i e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{a}_i} \int d^3 r e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} S_{\vec{Q}} \varphi_{\vec{Q}}. \end{aligned}$$

Man beachte, dass Integrale ohne „Index“ über das gesamte Volumen V gehen und solche mit Index Ω nur über eine Elementarzelle. Die Umformung des zweiten Gleichheitszeichens ist gültig, da der Integral periodisch in den Elementarzellen ist.

2 ELEKTRONEN IN FESTKÖRPERN

2.1 Formel für Fourierkoeffizienten der Bloch-Zustände

Wenn wir die reziproken Gittervektoren durchnummerieren, sodass $\vec{Q} \equiv \vec{Q}_n$, gilt für die Energieniveaus im leeren Gitter

$$E_{n,\vec{k}} = \frac{1}{2m} (\vec{k} + \vec{Q}_n)^2$$

und für die Schrödinger-Gleichung

$$\left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m} (\vec{k} + \vec{Q}_m)^2 \right) c_{n,\vec{k}+\vec{Q}_m} = 0.$$

Für $n = m$ verschwindet die Klammer, für $n \neq m$ jedoch nicht; in diesem Fall muss also der Koeffizient verschwinden, also ist

$$c_{n,\vec{k}+\vec{Q}_m} \sim \delta_{nm}.$$

Nehmen wir einen allgemeinen Proportionalitätsfaktor A an, der von n und $\vec{k} + \vec{Q}_m$ abhängen kann und setzen dies in die Normierungsrelation aus Abschnitt 1.9 ein:

$$\begin{aligned} \delta_{nn'} &\stackrel{!}{=} \sum_{\vec{Q}} c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}^* c_{n',\vec{k}+\vec{Q}} = \sum_m c_{n,\vec{k}+\vec{Q}_m}^* c_{n',\vec{k}+\vec{Q}_m} = \sum_m A^*(n, \vec{k} + \vec{Q}_m) A(n', \vec{k} + \vec{Q}_m) \delta_{nm} \delta_{n'm} \\ &= A^*(n, \vec{k} + \vec{Q}_{n'}) A(n', \vec{k} + \vec{Q}_{n'}) \delta_{nn'} = A^*(n, \vec{k} + \vec{Q}_n) A(n, \vec{k} + \vec{Q}_n) \delta_{nn'} \\ \Leftrightarrow & \quad |A(n, \vec{k} + \vec{Q}_n)| = 1. \end{aligned}$$

Somit kann der Proportionalitätsfaktor A maximal eine Phase sein. Eine solche Phase wird sich bei unseren noch folgenden Rechnungen jedoch nie auswirken. Daher wählen wir der Einfachheit halber $A = 1$.

2.2 Fast-freie Elektronen – Nicht-Entarteter Fall

Die ungestörte Energie für $U(\vec{r}) = 0$ betrug

$$\epsilon_{n,\vec{k}}^{(0)} = \frac{1}{2m} (\vec{k} + \vec{Q}_n)^2$$

und die Zustände nahmen aufgrund von $c_{n,\vec{k}+\vec{Q}_m} = \delta_{nm}$ die Form

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_m c_{n,\vec{k}+\vec{Q}_m} e^{i\vec{Q}_m\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_m \delta_{nm} e^{i\vec{Q}_m\cdot\vec{r}} = e^{i(\vec{k}+\vec{Q}_n)\cdot\vec{r}}$$

an. Die nicht-entartete Störungstheorie liefert für die erste Ordnung einen unwichtigen konstanten Energie-Shift um den Mittelwert des Potentials \bar{U} :¹

$$\epsilon_{n,\vec{k}}^{(1)} = \frac{1}{V} \langle \psi_{n,\vec{k}} | U | \psi_{n,\vec{k}} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i(\vec{k}+\vec{Q}_n)\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) e^{i(\vec{k}+\vec{Q}_n)\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \int d^3r U(\vec{r}) = \bar{U}.$$

Diese Ordnung wird im Folgenden nicht berücksichtigt. In zweiter Ordnung folgt

¹ Da wir die Bloch-Zustände auf V normiert haben, brauchen wir hier auch einen Faktor V^{-1} ; anderenfalls stimmen auch die Dimensionen nicht.

$$\epsilon_{n,\vec{k}}^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V^{-1} \langle \psi_{n,\vec{k}} | U | \psi_{m,\vec{k}} \rangle|^2}{\epsilon_{n,\vec{k}}^{(0)} - \epsilon_{m,\vec{k}}^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{|U_{\vec{Q}_n - \vec{Q}_m}|^2}{\epsilon_{n,\vec{k}}^{(0)} - \epsilon_{m,\vec{k}}^{(0)}}$$

wobei verwendet wurde, dass

$$\frac{1}{V} \langle \psi_{n,\vec{k}} | U | \psi_{m,\vec{k}} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i(\vec{k} + \vec{Q}_n) \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) e^{i(\vec{k} + \vec{Q}_m) \cdot \vec{r}} = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i(\vec{Q}_n - \vec{Q}_m) \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) = U_{\vec{Q}_n - \vec{Q}_m}.$$

$U_{\vec{Q}}$ ist der Fourierkoeffizient von $U(\vec{r})$.

2.3 Fast-freie Elektronen – Entarteter Fall

Die beiden Energieniveaus

$$\epsilon_{0,\vec{k}}^{(0)} = \frac{1}{2m} \vec{k}^2, \quad \epsilon_{1,\vec{k}}^{(0)} = \frac{1}{2m} (\vec{k} - \vec{Q}_1)^2$$

stimmen im eindimensionalen Fall, für den $\vec{Q}_1 = 2\pi/a$ gilt, für $\vec{k} \approx \pi/a$ etwa überein. In diesem entarteten Fall entsprechen die Energiekorrekturen den Eigenwerten der Matrix

$$\frac{1}{V} \begin{pmatrix} \langle \psi_{0,\vec{k}} | U | \psi_{0,\vec{k}} \rangle & \langle \psi_{0,\vec{k}} | U | \psi_{1,\vec{k}} \rangle \\ \langle \psi_{1,\vec{k}} | U | \psi_{0,\vec{k}} \rangle & \langle \psi_{1,\vec{k}} | U | \psi_{1,\vec{k}} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{U} & U_{\vec{Q}_0 - \vec{Q}_1} \\ U_{\vec{Q}_1 - \vec{Q}_0} & \bar{U} \end{pmatrix},$$

wobei die benötigten Matrixelemente bereits in (>2.2) berechnet wurden. Die Eigenwerte ergeben sich zu

$$\epsilon_{\vec{k}}^{(1)} = \bar{U} \pm |U_{\vec{Q}_0 - \vec{Q}_1}|.$$

Ignoriert man wieder den unbedeutenden Energie-Shift \bar{U} , erhält man

$$E_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}}^{(0)} \pm |U_{\vec{Q}_0 - \vec{Q}_1}|.$$

2.4 Zusammenhang mit der Laue-Bedingung – Bragg-Ebene

Eine Entartung ist für genau solche \vec{k} möglich, für es Gittervektoren \vec{Q}_n, \vec{Q}_m gibt mit

$$(\vec{k} + \vec{Q}_n)^2 = (\vec{k} + \vec{Q}_m)^2.$$

Dabei ist $\vec{k} \in 1. \text{ BZ.}$ Wir definieren $\vec{q}_n := \vec{k} + \vec{Q}_n$ und $\vec{Q}_{nm} = \vec{Q}_n - \vec{Q}_m$ und schreiben

$$\begin{aligned} \vec{q}_n^2 = \vec{q}_m^2 &= (\vec{k} + \vec{Q}_n + \vec{Q}_m - \vec{Q}_n)^2 = (\vec{q}_n + \vec{Q}_{mn})^2 = \vec{q}_n^2 + 2\vec{q}_n \cdot \vec{Q}_{mn} + \vec{Q}_{mn}^2 \\ \Leftrightarrow \vec{Q}_{mn}^2 &= -2\vec{q}_n \cdot \vec{Q}_{mn}. \end{aligned}$$

Aus der Laue-Bedingung bekommen wir analog (siehe (>1.2))

$$\vec{K}^2 = -2\vec{K} \cdot \vec{k},$$

wobei \vec{k} der einfallende Wellenvektor und \vec{K} irgendein reziproker Gittervektor ist.

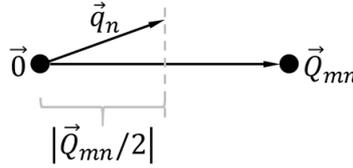
Wir multiplizieren beide Seite mit 1/4 und schreiben die Gleichung als

$$\left(\frac{1}{2} \vec{Q}_{mn}\right)^2 = \frac{1}{2} \vec{Q}_{mn} \cdot \vec{q}_n.$$

Für ein Skalarprodukt gilt $\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| \cdot b_{\vec{a}}$, wobei $b_{\vec{a}}$ der Anteil des Vektors \vec{b} in \vec{a} -Richtung ist. Wir können die linke Seite also folgendermaßen schreiben:

$$\left(\frac{1}{2}\vec{Q}_{mn}\right)^2 = \left|\frac{1}{2}\vec{Q}_{mn}\right| \cdot q_{n,\vec{Q}_{mn}}.$$

Diese Gleichung ist erfüllt, wenn der Anteil von \vec{q}_n in \vec{Q}_{mn} -Richtung, den wir hier als $q_{n,\vec{Q}_{mn}}$ notiert haben, gerade gleich $|\vec{Q}_{mn}/2|$ ist. Dies ist genau dann der Fall, wenn \vec{q}_n auf der mittelsenkrechten Fläche von \vec{Q}_{mn} liegt.



Diese Mittelsenkrechten sind immer genau die Brillouin-Zonengrenzen.

Beispielsweise folgt für den Spezialfall $n = 0$ und $m = 1$ mit der Konvention $\vec{Q}_0 = 0$ sowie $\vec{Q}_1 = \vec{K}_0$, wobei \vec{K}_0 der kürzeste reziproke Gittervektor (ungleich null) sei, dass $\vec{q}_{n=0} = \vec{k}$ und $\vec{Q}_{10} = \vec{K}_0$. Die mittelsenkrechte des kürzesten reziproken Gittervektors \vec{K}_0 ist gerade die erste Brillouin-Zonengrenze. Falls \vec{k} also auf der ersten Brillouin-Zonengrenze liegt, sind die Energien entartet.

2.5 Wannier-Funktionen

Für die Wellenfunktion ist aus Abschnitt 1.7 bekannt, dass

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}),$$

wobei $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ periodisch in \vec{R} ist. Daraus folgt

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} - \vec{R}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}).$$

Setzt man nun rückwärts die Definition der Wannier-Funktion in den Ausdruck für die Wellenfunktion ein, erhält man

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{k}' \in 1. \text{ BZ}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{k}' \in 1. \text{ BZ}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}) \\ &= \sum_{\vec{k}' \in 1. \text{ BZ}} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned}$$

Dies war zu zeigen.

2.6 Schrödinger-Gleichung mit Wannier-Funktionen

Man betrachte einfachheitshalber einen Kristall, der nur ein Atom pro Elementarzelle besitzt. In diesem Fall hat das Potential die Form

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \varphi(\vec{r} - \vec{R}),$$

wobei φ das Potential eines einzelnen Atoms ist. Drückt man außerdem die Wellenfunktionen durch die Wannier-Funktionen aus, folgt aus der Schrödinger-Gleichung

$$E_{n,\vec{k}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + \sum_{\vec{R}'} \varphi(\vec{r} - \vec{R}') \right) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow E_{n,\vec{k}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + \sum_{\vec{R}'} \varphi(\vec{r} - \vec{R}') \right) \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R})$$

Die Summe über \vec{R}' geht nun ebenso über alle Gittervektoren wie die Summe über \vec{R} . Speziell sind jene Summanden, für die diese beiden Gittervektoren identisch sind. Man betrachte diese Summanden daher getrennt von denen, bei denen diese beiden Gittervektoren unterschiedlich sind:

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow E_{n,\vec{k}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) \\ = \sum_{\vec{R}} \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + \varphi(\vec{r} - \vec{R}) \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) + \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}' \neq \vec{R}} \varphi(\vec{r} - \vec{R}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}). \end{aligned}$$

Sei nun

$$H_0(\vec{R}) = -\frac{1}{2m} \nabla^2 + \varphi(\vec{r} - \vec{R})$$

der Hamilton-Operator eines einzelnen Atoms am Ort \vec{R} sowie

$$\Delta U(\vec{r}, \vec{R}) := U(\vec{r}) - \varphi(\vec{r} - \vec{R}) = \sum_{\vec{R}' \neq \vec{R}} \varphi(\vec{r} - \vec{R}'),$$

so gilt für die Schrödinger-Gleichung

$$E_{n,\vec{k}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \sum_{\vec{R}} H_0(\vec{R}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) + \sum_{\vec{R}} \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}).$$

2.7 Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO)

Im Rahmen des Tight-Binding Modells ist es anschaulich klar, dass sich die Wellenfunktion nicht allzu sehr von den atomaren Wellenfunktionen unterscheiden kann – und das auch nur für ausreichend hohe Energien. Die einzigen Elektronen, die nicht fest an das Atom gebunden sind, sind – so die Annahme – die Valenzelektronen. Die Elektronen in den inneren Schalen befinden sich näherungsweise in rein atomaren Zuständen. Zustände mit sehr hohen Energien werden ohnehin nie besetzt. Interessant sind nur jene Zustände dazwischen, die manchmal besetzt und manchmal frei sind. Wie viele Zustände man als „interessant“ betrachten möchte, hängt von der geforderten Genauigkeit der Näherung ab.

Man wähle M „interessante“ Zustände (pro Elementarzelle) aus, die die (als bekannt vorausgesetzten) atomaren Wellenfunktionen $\phi_m(\vec{r})$ mit $m = 1, \dots, M$ besitzen. Diese sind Eigenfunktionen des atomaren Hamilton-Operators

$$H_0(\vec{R}) \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) = E_{0,m} \phi_m(\vec{r} - \vec{R}).$$

Man mache nun für die Wannier-Funktion den Ansatz

$$w_n(\vec{r}) = \sum_{m=1}^M b_{nm} \phi_m(\vec{r}),$$

woraus für die Schrödinger-Gleichung folgt

$$\begin{aligned}
& E_{n,\vec{k}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{m=1}^M b_{nm} \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) \\
&= \sum_{\vec{R}} \underbrace{H_0(\vec{R})}_{\rightarrow E_{0,m}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \sum_{m=1}^M b_{nm} \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) + \sum_{\vec{R}} \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \sum_{m=1}^M b_{nm} \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) \\
&\Leftrightarrow \sum_{m=1}^M (E_{n,\vec{k}} - E_{0,m}) b_{nm} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) = \sum_{m=1}^M b_{nm} \sum_{\vec{R}} \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \phi_m(\vec{r} - \vec{R}).
\end{aligned}$$

Man multipliziere nun mit $\phi_l(\vec{r})$ und integriere anschließend bzw. projiziere auf $\langle \phi_l(\vec{r}) |$. Von den vielen Summanden auf der linken Seite ist nun einer besonders, nämlich jener mit $\vec{R} = 0$. In diesem Summanden erhält man $\langle \phi_l(\vec{r}) | \phi_m(\vec{r}) \rangle = \delta_{ml}$. Wenn man diesen speziellen Term herauszieht, bleibt eine Summe über alle $\vec{R} \neq 0$ übrig:

$$\begin{aligned}
&\Leftrightarrow (E_{n,\vec{k}} - E_{0,l}) b_{nl} + \sum_{m=1}^M (E_{n,\vec{k}} - E_{0,m}) b_{nm} \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \underbrace{\langle \phi_l(\vec{r}) | \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) \rangle}_{=: I_{lm}(\vec{R})} \\
&= \sum_{m=1}^M b_{nm} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \underbrace{\langle \phi_l(\vec{r}) | \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) | \phi_m(\vec{r} - \vec{R}) \rangle}_{=: h_{lm}(\vec{R})} \\
&\Leftrightarrow (E_{n,\vec{k}} - E_{0,l}) b_{nl} + \sum_{m=1}^M (E_{n,\vec{k}} - E_{0,m}) b_{nm} \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} I_{lm}(\vec{R}) = \sum_{m=1}^M b_{nm} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} h_{lm}(\vec{R}).
\end{aligned}$$

Dies entspricht einer Matrix-Gleichung

$$A \vec{b}_n = 0, \quad A \in \mathbb{C}^{M \times M}, \quad \vec{b}_n = (b_{n,1}, \dots, b_{n,M}),$$

die nur gelöst werden kann, falls $\det A = 0$. Da A eine $M \times M$ -Matrix ist, gibt es M verschiedene Vektoren \vec{b}_n mit $n = 1, \dots, M$, die Schrödinger-Gleichung lösen. Man bekommt also M Bänder.

2.8 Ein Orbital pro Elementarzelle

M ist die Anzahl an ausgewählten, „interessanten“ Zuständen *pro Elementarzelle*. Bei einer zweiatomigen Basis, bei der für jedes Atom *ein* Zustand im „interessanten“ Energiebereich liegt, ist also $M = 2$.

Im einfachsten Fall, in dem pro Elementarzelle nur ein Orbital betrachtet wird, also $M = 1$, braucht man keine m - bzw. l -Indizes zur Unterscheidung. In diesem Fall gibt es auch nur eine $M = 1$ Lösung der „Matrixgleichung“, das heißt auch der Index n ist überflüssig. Die Gleichung aus (>2.7) vereinfacht sich damit zu

$$\begin{aligned}
&(E_{\vec{k}} - E_0) b + (E_{\vec{k}} - E_0) b \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} I(\vec{R}) = b \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} h(\vec{R}) \\
&\Leftrightarrow E_{\vec{k}} = E_0 + \frac{\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} h(\vec{R})}{1 + \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} I(\vec{R})} \stackrel{I \ll 1}{\approx} E_0 + \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} h(\vec{R}).
\end{aligned}$$

2.9 Alternative Herleitung zum Tight-Binding Model

Man wähle erneut pro Elementarzelle M atomare Zustände und indiziere sie mit einer Quantenzahl $m = 1, \dots, M$. Alle ausgewählten Zustände aller Elementarzellen kann man nun als $|\vec{R}, m\rangle$ notieren.

Im letzten Schritt von (>2.8) wurde das Integral I vernachlässigt. Für $M \geq 1$ entspricht es dem Matrixelement

$$I_{lm}(\vec{R}) = \langle 0, l | \vec{R}, m \rangle \quad \text{bzw.} \quad I_{m'm}(\vec{R} - \vec{R}') = \langle \vec{R}', m' | \vec{R}, m \rangle.$$

Für diese alternative Herleitung wollen wir derartige Matrixelemente für $\vec{R} - \vec{R}' \neq 0$ gleich von Beginn an Vernachlässigen mit der Begründung, dass der Überlapp von Wellenfunktionen gering ist, wenn sich deren Zentren mindestens einen Gittervektor voneinander entfernt befinden. Wir nehmen also an, dass es nur dann einen hinreichenden Überlapp gibt, wenn man zwei Zustände am selben Gitterpunkt $\vec{R} = \vec{R}'$ betrachtet - und dort sind die atomaren Wellenfunktion orthogonal. In Formeln bedeutet dies

$$\langle \vec{R}', m' | \vec{R}, m \rangle = \delta_{\vec{R}'\vec{R}} \delta_{mm'}.$$

Wir wollen nun den Energieunterschied von einem Kristall zu einem atomaren Zustand durch einen Hopping-Hamilton-Operator beschreiben, der wiederum den Übergang eines Elektrons von einem Zustand $|\vec{R}_1, m_1\rangle$ in einen Zustand $|\vec{R}_2, m_2\rangle$ beschreibt:¹

$$H_H = \sum_{\substack{\vec{R}_1, \vec{R}_2 \\ m_1, m_2}} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) c_{\vec{R}_2, m_2}^\dagger c_{\vec{R}_1, m_1}.$$

Die Koeffizienten $t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$ enthalten die Energien und Wahrscheinlichkeiten für all die Übergänge und werden in aller Regel experimentell bestimmt (obwohl die Formel am Ende der Herleitung in (>2.10) nahelegt, dass diese Koeffizienten eine ähnliche Rolle wie das \hbar aus (>2.8) spielen).

Wir wählen erneut einen LCAO-Ansatz für die Wannier-Funktionen:

$$\psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_{m=1}^M b_{nm} |\vec{R}, m\rangle.$$

Setzt man diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung des Hopping-Hamilton-Operators ein, erhält man

$$\begin{aligned} E_{n, \vec{k}} \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) &= H_H \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \\ \Leftrightarrow E_{n, \vec{k}} \sum_{\vec{R}, m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_{nm} |\vec{R}, m\rangle &= \sum_{\substack{\vec{R}_1, \vec{R}_2 \\ m_1, m_2}} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) c_{\vec{R}_2, m_2}^\dagger c_{\vec{R}_1, m_1} \sum_{\vec{R}, m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_{nm} |\vec{R}, m\rangle \\ \Leftrightarrow E_{n, \vec{k}} \sum_{\vec{R}_2, m_2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_2} b_{nm_2} |\vec{R}_2, m_2\rangle &= \sum_{\substack{\vec{R}_1, \vec{R}_2 \\ m_1, m_2}} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_1} b_{nm_1} |\vec{R}_2, m_2\rangle. \end{aligned}$$

In der zweiten Äquivalenzumformung wurden links einfach die Summationsvariablen umbenannt und rechts ausgenutzt, dass

$$c_{\vec{R}_1, m_1} |\vec{R}, m\rangle = \delta_{\vec{R}_1 \vec{R}} \delta_{m_1 m} |0\rangle \quad \text{sowie} \quad c_{\vec{R}_2, m_2}^\dagger |0\rangle = |\vec{R}_2, m_2\rangle$$

¹ Wir schreiben den Hopping-Hamilton-Operator hier mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren c^\dagger und c . Damit greifen wir ein wenig vor; formal werden diese Operatoren erst in Kapitel 8 eingeführt.

gilt. Projiziert man diese Gleichung nun auf $\langle \vec{R}, m |$ erhält man (unter Umbenennung der Summationsvariablen $\vec{R}_1 \rightarrow \vec{R}'$ und $m_1 \rightarrow m'$)

$$E_{n,\vec{k}} b_{nm} = \sum_{\vec{R}', m'} t_{m'm}(\vec{R}' - \vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}' - \vec{R})} b_{nm'} = \sum_{\vec{R}', m'} t_{m'm}(\vec{R}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} b_{nm'}.$$

Auch dies entspricht wieder einer $M \times M$ -Matrixgleichung.

2.10 Ein Orbital pro Elementarzelle (Alternative Herleitung)

Für $M = 1$ spielen die Indizes wie schon in (>2.8) keine Rolle mehr, die Summe über m' fällt weg und es bleibt

$$E_{\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} t(\vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}.$$

2.11 Dispersionsrelation im eindimensionalen Gitter

Unter der Annahme, dass nur Sprünge zum nächsten Nachbar möglich sind, folgt für ein eindimensionales Gitter mit Gitterkonstante a

$$t(\vec{R}) = \begin{cases} t, & \vec{R} = \pm a \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad \Rightarrow \quad E_{\vec{k}} = t(e^{ika} + e^{-ika}) = 2t \cos ka.$$

2.12 Dispersionsrelation im bcc-Gitter

Man betrachte erneut nur Sprünge zum nächsten Nachbar (also von und zu dem Gitterpunkt in der Würfelmittle), das heißt

$$t(\vec{R}) = \begin{cases} t, & \vec{R} = \frac{a}{2}(\pm \hat{x} \pm' \hat{y} \pm'' \hat{z}), \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

wobei die Striche an den \pm -Zeichen andeuten sollen, dass alle acht \pm -Kombinationen erlaubt sind, also beispielsweise auch $+\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}$. a ist die Kantenlänge der bcc-Würfel. Somit folgt

$$\begin{aligned} E_{\vec{k}} &= t \sum_{\pm, \pm', \pm''} e^{i\vec{k} \cdot \frac{a}{2}(\pm \hat{x} \pm' \hat{y} \pm'' \hat{z})} = t \sum_{\pm, \pm', \pm''} e^{\pm i \frac{1}{2} k_x a} e^{\pm' i \frac{1}{2} k_y a} e^{\pm'' i k_y a} \\ &= 2^3 t \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2). \end{aligned}$$

3 DYNAMIK UNTER EXTERNEN FELDERN

3.1 Vom Wellenpaket zur Gruppengeschwindigkeit

Man beschreibe ein Elektron im Band n zum Zeitpunkt $t = 0$ als Wellenpaket,

$$\phi(\vec{r}) = \int d^3k g(\vec{k}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}),$$

wobei die Gewichtsfunktion $g(\vec{k})$ eine relativ scharfe Peakfunktion darstellen soll, sodass die Breite des Wellenpakets im realen Raum $\Delta r \sim 1/\Delta k$ deutlich größer ist als eine Elementarzelle a (aber deutlich kleiner als der gesamte Kristall). Setzt man die Form der Wellenfunktion aus dem Bloch-Theorem ein und fügt den Zeitentwicklungsfaktor $e^{-i\varepsilon_n t}$ hinzu, gelangt man zu der Formel

$$\phi(\vec{r}, t) = \int d^3k g(\vec{k}) u_{n,\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\varepsilon_n(\vec{k})t}.$$

Der größte Beitrag des Integrals kommt aus der Region des Peaks von $g(\vec{k})$. Sei \vec{k}_0 das Zentrum dieses Peaks, so kann man den Integranden bzw. die Funktionen des Integranden um dieses Zentrum entwickeln:

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \approx u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r}), \quad \varepsilon_n(\vec{k}) \approx \varepsilon_n(\vec{k}_0) + \nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})|_{\vec{k}_0}(\vec{k} - \vec{k}_0).$$

Das Wellenpaket wird dadurch zu

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, t) &= u_{n,\vec{k}_0} e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r} - i\varepsilon_n(\vec{k}_0)t} \int d^3k g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{r} - i\nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})|_{\vec{k}_0}(\vec{k}-\vec{k}_0)t} \\ &\sim \int d^3k g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot(\vec{r} - i\nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})|_{\vec{k}_0} t)}. \end{aligned}$$

Damit sich die Exponential-Funktion beim Integrieren nicht weg-mittelt, liegt es nahe, dass

$$\vec{r} = i\nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})|_{\vec{k}_0} t \quad \Rightarrow \quad \vec{v}_g := \frac{d\vec{r}}{dt} = i\nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})|_{\vec{k}_0}$$

gelten muss, obwohl dieses Argument alles andere als sauber ist, solange im Integral zusätzlich noch die Gewichtsfunktion steht.

3.2 Besserer Beweis

Dieser Beweis wird hier nur für $\vec{A} = 0$ durchgeführt. Nur das Skalarpotential sei $\varphi \neq 0$. Der allgemeine Hamilton-Operator war

$$H = \underbrace{\frac{1}{2m}(-i\nabla)^2 + U(\vec{r})}_{=: H_0} + q\varphi(\vec{r}), \quad i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi.$$

Zur Lösung der Eigenwertgleichung wechseln wir wieder in die Basis der Wannier-Funktionen,

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n,\vec{R}} a_{n,\vec{R}}(t) w_n(\vec{r} - \vec{R}).$$

Für $\varphi = 0$, also die einfache Bloch-Wellenfunktion, haben wir bereits in (>2.5) $a_{n,\vec{R}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ gezeigt.¹ Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung liefert uns

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = i \sum_{n,\vec{R}} \dot{a}_{n,\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) \stackrel{!}{=} H\psi = \underbrace{(H_0 + q\varphi)}_{=H} \sum_{n,\vec{R}} a_{n,\vec{R}}(t) w_n(\vec{r} - \vec{R}).$$

Um zu bestimmen, wie H_0 auf ψ wirkt, betrachten wir zunächst, wie H_0 auf²

$$w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

wirkt. Wendet man den ungestörten Hamilton-Operator H_0 nun auf diese Wannier-Funktion an, erhält man unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die stationären Wellenfunktion $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R})$ (siehe (>2.5)) dessen Eigenfunktionen sind,

$$\begin{aligned} H_0 w_n(\vec{r} - \vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} H_0 \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \mathcal{E}_n(\vec{k}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \mathcal{E}_n(\vec{k}) \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}'} w_n(\vec{r} - \vec{R}') = \sum_{\vec{R}'} w_n(\vec{r} - \vec{R}') \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \mathcal{E}_n(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}'}}_{=\mathcal{E}_n(\vec{R}' - \vec{R})}, \end{aligned}$$

wobei $\mathcal{E}_n(\vec{R}' - \vec{R})$ der Fourierkoeffizient von $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ ist.

Somit ergibt sich für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} i \sum_{n,\vec{R}} \dot{a}_{n,\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) &= (H_0 + q\varphi) \sum_{n,\vec{R}} a_{n,\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) \\ \Leftrightarrow i \sum_{n,\vec{R}} \dot{a}_{n,\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}) &= \sum_{n,\vec{R},\vec{R}'} a_{n,\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}') \mathcal{E}_n(\vec{R}' - \vec{R}) + q\varphi \sum_{n,\vec{R}} a_{n,\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R}). \end{aligned}$$

Projiziert man nun diese Gleichung auf $\langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) |$ und verwendet $\langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) | w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}') \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\vec{R}\vec{R}'}$ aus Abschnitt 2.2, erhält man

$$i \dot{a}_{n,\vec{R}} = \sum_{\vec{R}'} a_{n,\vec{R}'} \mathcal{E}_n(\vec{R} - \vec{R}') + \sum_{n',\vec{R}'} a_{n',\vec{R}'} \langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) | q\varphi | w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}') \rangle.$$

Für kleine Störungen φ kann man den hinteren Term nähern als

$$\langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) | q\varphi | w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}') \rangle \approx q\varphi \langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) | w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}') \rangle = q\varphi \delta_{nn'} \delta_{\vec{R}\vec{R}'}$$

In diesem Fall ist $\dot{a}_{n,\vec{R}} = 0$ für all jene n , für die auch $a_{n,\vec{R}'} = 0$ ist. Das heißt, startet das Elektron in einem Band n_0 , so wird es die ganze Zeit über in diesem Band bleiben.

¹ Auch das ist natürlich etwas unexakt. Damals trug auch die Wellenfunktion $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ einen Index n , sie beschrieb den n -ten Zustand. Hier beschreibt $\psi(\vec{r}, t)$ im Prinzip, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich das Elektron im Zustand bzw. Band n befindet und der Koeffizient $a_{n,\vec{R}}(t)$ gibt diese Wahrscheinlichkeit an. Man beachte ebenfalls, dass die Wellenfunktion hier nun zeitabhängig ist, dass es um die Dynamik der Elektronen geht, wohingegen zuvor lediglich die stationäre Schrödinger-Gleichung gelöst wurde.

² Diese Form der Wannier-Funktion erhält man, wenn man die Bloch-Wellenfunktion in die Definition einsetzt und sich davon ausgehen die Verschiebung um $\vec{r} \rightarrow \vec{r} - \vec{R}$ betrachtet:

$$w_n(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}).$$

$$|\vec{e}_B \times \dot{\vec{k}}| = |qB\vec{v}_\perp| \quad \Leftrightarrow \quad \frac{dk}{dt} = eBv_\perp,$$

denn aus der Lorentz-Kraft aus (>3.4) folgt für $\vec{E} = 0$, dass $\dot{\vec{k}} \perp \vec{B} \parallel \vec{e}_B$. Wir benutzen stets $e > 0$, sodass für ein Elektron $q = -e$ gilt. Mit der *magnetischen Länge*¹ $l_B^2 := 1/eB$ folgt für die Periodendauer für einem Umlauf der geschlossenen Trajektorie

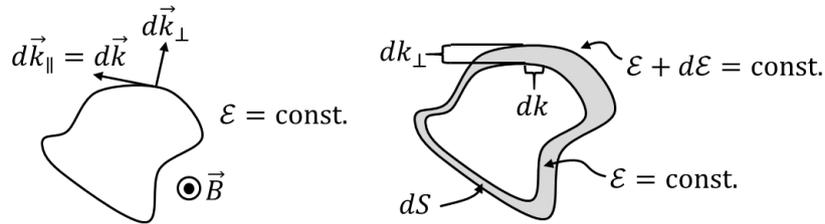
$$T = \oint dt = \oint l_B^2 \frac{dk}{v_\perp}.$$

Nun ist aus Abschnitt 3.1 die Gruppengeschwindigkeit

$$\vec{v} = \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k})$$

bekannt.

Die Trajektorie im reziproken Raum liegt in einer Ebene senkrecht zum Magnetfeld. Da uns nur hier die Geschwindigkeiten entlang der Trajektorie interessieren, die in dieser Ebene liegt, schreiben wir statt \vec{v} im Folgenden \vec{v}_\perp und dann können wir auch den Gradienten nur in dieser zum Magnetfeld senkrechten Ebene ausführen.



Der Gradient hat somit noch Anteile senkrecht zur Trajektorie, also in $d\vec{k}_\perp$ -Richtung, und entlang der Trajektorie, also in $d\vec{k}_\parallel = d\vec{k}$ Richtung.² Die Anteile entlang der Trajektorie, also in $d\vec{k}_\parallel$ -Richtung, verschwinden, da \mathcal{E} in diese Richtung konstant ist. Somit bleibt in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld nur die Komponente senkrecht zur Trajektorie übrig:

$$\vec{v}_\perp = \frac{d\mathcal{E}(\vec{k})}{dk_\perp} \vec{e}_{k_\perp}.$$

Die (Gruppen-)geschwindigkeit im realen Raum steht also immer senkrecht auf der *reziproken* Trajektorie.

Einsetzen ins Integral liefert

$$T = l_B^2 \oint \frac{dk}{\frac{d\mathcal{E}(\vec{k})}{dk_\perp}} = l_B^2 \oint dk \frac{dk_\perp}{d\mathcal{E}} = l_B^2 \frac{1}{d\mathcal{E}} \oint dk dk_\perp = l_B^2 \frac{dS}{d\mathcal{E}}.$$

Das Integral $\oint dk$ läuft einmal entlang der Trajektorie im Kreis. Entlang dieser Trajektorie gilt $\mathcal{E} = \text{const.}$, \mathcal{E} hängt im Integrationsbereich also nicht von \vec{k} ab, weswegen wir $d\mathcal{E}$ vor das Integral ziehen konnten. dk_\perp ist nun als Funktion von \vec{k} zu verstehen. An jedem \vec{k} -Punkt zeigt dk_\perp auf eine benachbarte Trajektorie, die ihrerseits entlang einer konstanten Energie $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ läuft. Integriert man nun die Differentiale dk und dk_\perp einmal im Kreis entlang der Trajektorie, enthält man eine

¹ In SI-Einheiten: $l_B^2 = \hbar c / eB$.

² Es gilt $d\vec{k}_\perp = d\vec{k}$, da $d\vec{k}$ der infinitesimale Differenzvektor zwischen zwei Vektoren \vec{k} und $\vec{k} + d\vec{k}$ ist, die beide aus dem Ursprung auf die Trajektorie zeigen. Somit zeigt $d\vec{k}$ am Punkt \vec{k} entlang der Trajektorie.

infinitesimale (reziproke) Fläche dS , die zwischen den beiden Trajektorien mit Energien \mathcal{E} und $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ liegt.

Definiert man nun die Zyklotron-Masse

$$m_c := \frac{1}{2\pi} \frac{dS}{d\mathcal{E}},$$

so kann man die Zyklotron-Frequenz schreiben als

$$\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{1}{l_B^2 m_c}.$$

3.8 Zyklotron-Masse für harmonische Dispersionsrelation

Man betrachte eine Dispersionsrelation

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{k^2}{2m^*}.$$

Die Trajektorie ist die Schnittlinie einer Ebene senkrecht zum Magnetfeld mit einer Fläche konstante Energie, die für diese Dispersionsrelation eine Kugelschale ist; die reziproke Trajektorie ist hier also ein Kreis mit Radius k_\perp , wobei k_\perp der \vec{k} -Anteil senkrecht zum Magnetfeld ist:

$$S = \pi k_\perp^2 = \pi(k^2 - k_\parallel^2) = \pi(2m^* \mathcal{E} - k_\parallel^2) \quad \Rightarrow \quad m_c = \frac{1}{2\pi} \frac{dS}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{2\pi} \pi \cdot 2m^* = m^*.$$

3.9 Born-Sommerfeld-Bedingung für den magnetischen Fluss

Aus (>3.6) ist die Gleichung

$$\underbrace{\vec{e}_B}_{=:\vec{e}} \times \underbrace{(\vec{k}(t) - \vec{k}(0))}_{=:\vec{K}} = \underbrace{qB(\vec{r}_\perp(t) - \vec{r}_\perp(0))}_{=:\vec{R}} \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon_{ijk} e_j K_k = R_i$$

bekannt, wobei die die Symbole \vec{K} und \vec{R} kurz als Abkürzung benutzen wollen. Multipliziert man die Gleichung in Indexschreibweise mit $\epsilon_{lim} e_m$ folgt

$$\underbrace{\epsilon_{lim}}_{=-\epsilon_{lmi}} e_m R_i = \epsilon_{lim} e_m \epsilon_{ijk} e_j K_k = (\delta_{mj} \delta_{lk} - \delta_{mk} \delta_{lj}) e_m e_j K_k = e_j e_j K_l - e_k e_l K_k$$

$$\Leftrightarrow \quad -\vec{e} \times \vec{R} = \vec{K} - \vec{e}(\vec{e} \cdot \vec{K}),$$

wobei mit $\vec{e}^2 = 1$ verwendet wurde, dass $\vec{e} = \vec{e}_B$ ein Einheitsvektor ist. Da nun $\vec{K} = \vec{k}(t) - \vec{k}(0)$, die Trajektorie, senkrecht auf dem Magnetfeld steht, verschwindet das Skalarprodukt und übrig bleibt

$$\vec{k}(t) - \vec{k}(0) = -\vec{e}_B \times qB(\vec{r}_\perp(t) - \vec{r}_\perp(0)) = -q\vec{B} \times (\vec{r}_\perp(t) - \vec{r}_\perp(0))$$

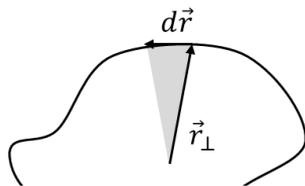
$$\Leftrightarrow \quad \vec{k}(t) = -q\vec{B} \times \vec{r}_\perp(t) + \text{const.}$$

Somit ergibt sich für die Born-Sommerfeld-Bedingung, wobei die Konstante durch die geschlossene Integration verschwindet,

$$2\pi(n + \gamma) \stackrel{!}{=} \oint d\vec{r} \cdot \vec{p} = \oint d\vec{r} \cdot (\vec{k} + q\vec{A}) = q \oint d\vec{r} \cdot (-\vec{B} \times \vec{r}_\perp + \vec{A})$$

$$= -q\vec{B} \cdot \oint (\vec{r}_\perp \times d\vec{r}) + q \int_{\mathcal{A}} d\vec{A} \cdot (\nabla \times \vec{A}) = -q\vec{B} \cdot 2\vec{A} + q \int_{\mathcal{A}} d\vec{A} \cdot \vec{B} = -2q\Phi + q\Phi = -q\Phi.$$

Dabei wurde verwendet, dass (die Länge von) $\vec{r}_\perp \times d\vec{r}$ zweimal der Fläche des grauen Dreiecks in der Abbildung entspricht;¹ integriert über die Trajektorie ergibt sich somit zweimal die eingeschlossene Fläche \mathcal{A} . Für den zweiten Integralterm wurde der Satz von Stokes verwendet.



Somit folgt, dass nur Trajektorien mit magnetischen Flüssen

$$\Phi_n = \frac{2\pi}{e} (n + \gamma) = \Phi_0 (n + \gamma)$$

rlaubt sind, wobei $q = -e < 0$ ist und $\Phi_0 := 2\pi/e$ Flussquantum genannt wird.²

3.10 Quantisierung der Flächen und der Energien

Für ein homogenes Magnetfeld folgt aus der Quantisierung des Flusses in (>3.9) sofort die folgende Quantisierung der eingeschlossenen Fläche im realen Raum:

$$\mathcal{A}_n = \frac{\Phi_0}{B} (n + \gamma) = 2\pi l_B^2 (n + \gamma).$$

Die quadrierte magnetische Länge $l_B^{-2} = eB$ ist der Skalierungsfaktor von Strecken im realen und reziproken Raum. Dies sieht man etwa an der letzten Gleichung in (>3.6). Für Flächen ist der Umrechnungsfaktor entsprechend l_B^{-4} :

$$S_n = l_B^{-4} \mathcal{A}_n = \frac{2\pi}{l_B^2} (n + \gamma) = 2\pi e B (n + \gamma).$$

Für die Quantisierung der Energie folgt mit der Definition der Zyklotron-Masse $2\pi m_c := dS/d\mathcal{E}$ sowie der Zyklotron-Frequenz $\omega_c := (l_B^2 m_c)^{-1}$ aus Abschnitt 3.3

$$\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = d\mathcal{E} \underbrace{\frac{S_{n+1} - S_n}{dS}}_{=1} = \left(\frac{dS}{d\mathcal{E}} \right)^{-1} (S_{n+1} - S_n) = \frac{1}{2\pi m_c} \cdot \frac{2\pi}{l_B^2} = \omega_c.$$

Man beachte, dass $dS/d\mathcal{E}$ und somit auch m_c und ω_c im Allgemeinen Funktionen der Energie sind. Die Energieniveaus sind also nicht zwingend äquidistant.

3.11 Bei vollen Bändern fließt kein Strom

Falls $\mathcal{E}_{\vec{k},s} = \mathcal{E}_{-\vec{k},-s}$ und $\vec{v}_g(\vec{k},s) = -\vec{v}_g(-\vec{k},-s)$ ist die Stromdichte bei vollen Bändern null. Da das Integrationsintervall symmetrisch kann, kann im Integranden $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ bzw. $s \rightarrow -s$ ersetzt werden. Für volle Bänder gilt $n(\vec{k},s) = 1 = \text{const.}$ Somit folgt in diesem Fall für den Strom:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k},s) = \frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(-\vec{k},-s) = -\frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k},s) = -\vec{j} \\ &\Rightarrow \vec{j} = 0. \end{aligned}$$

¹ Achtung: \vec{r}_\perp ist der Anteil von \vec{r} senkrecht zum Magnetfeld, nicht senkrecht zur Trajektorie!

² In SI-Einheiten: $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$.

3.12 Strom als Funktional der Löcher-Besetzungszahl

Da, wie in (>3.11) dargelegt wurde, der Strom \vec{j} für $n = 1$ verschwindet, folgt

$$\begin{aligned}\vec{j} &= \frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k}, s) n(\vec{k}, s) = -\frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k}, s) \underbrace{(1 - n(\vec{k}, s))}_{=: n_h(\vec{k}, s)} \\ &= -\frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k}, s) n_h(\vec{k}, s).\end{aligned}$$

4 MAGNETISMUS

4.1 Großes Potential beim Pauli-Paramagnetismus

Für ein schwaches Magnetfeld B sind etwa die Hälfte der Spins parallel und die andere Hälfte antiparallel ausgerichtet. Für ein kleines a gilt ferner

$$f(x+a) \approx f(x) + af'(x) + \frac{1}{2}a^2f''(x).$$

Daher kann man für ein schwaches Magnetfeld wie folgt nähern:

$$\begin{aligned} \Omega(\mu) &\approx \frac{1}{2}(\Omega_0(\mu + \mu_B B) + \Omega_0(\mu - \mu_B B)) \\ &\approx \frac{1}{2}\left(\Omega_0(\mu) + \mu_B B \Omega'_0(\mu) + \frac{1}{2}\mu_B^2 B^2 \Omega''_0(\mu) + \Omega_0(\mu) - \mu_B B \Omega'_0(\mu) + \frac{1}{2}\mu_B^2 B^2 \Omega''_0(\mu)\right) \\ &= \Omega_0(\mu) + \frac{1}{2}\mu_B^2 B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0(\mu)}{\partial \mu^2}. \end{aligned}$$

4.2 Landau-Energieniveaus

Wir nehmen den einfachsten Fall einer isotropen Dispersionsrelation an, sodass wir diese mit der effektiven Masse aus Abschnitt 3.2 schreiben können als $\mathcal{E}(\vec{k}) = \vec{k}^2/2m^*$. Somit erhalten wir den effektiven Hamilton-Operator (siehe Abschnitt 3.1, wir lassen nun den Index „eff“ weg)

$$H = \mathcal{E}(\vec{k}) + q\varphi = \frac{1}{2m^*}(\hat{p} - q\vec{A})^2 + q\varphi = \frac{1}{2m^*}((\hat{p}_x + qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2),$$

wobei wir im letzten Schritt $\vec{A} = (-By, 0, 0) \Rightarrow \vec{B} = \nabla \times \vec{A} = B\vec{e}_z$ sowie $\varphi = 0$ eingesetzt haben. Für diesen Hamilton-Operator ist der Ansatz

$$\psi(\vec{r}) = Y(y)e^{i(p_x x + p_z z)}$$

zielführend:

$$\begin{aligned} H\psi(\vec{r}) &= E\psi(\vec{r}) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{2m^*}((p_x + qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + p_z)Y(y) &= EY(y) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{2m^*}\left(\hat{p}_y^2 + q^2 B^2 \left(y + \frac{p_x}{qB}\right)^2 + p_z\right)Y(y) &= \left(E - \frac{p_z}{2m^*}\right)Y(y). \end{aligned}$$

Wir können nun $y \rightarrow y - p_x/qB$ verschieben; für die Energieeigenwerte spielt diese Verschiebung offensichtlich keine Rolle. Vergleicht man dies dann mit einem harmonischen Oszillator,

$$\left(\frac{p^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega^2}{2} x^2\right)\phi(x) = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\phi(x),$$

folgt sofort

$$\frac{m^* \omega^2}{2} = \frac{q^2 B^2}{2m^*} \quad \Leftrightarrow \quad \omega = \frac{eB}{m^*}, \quad q = -eq = -e < 0$$

sowie

$$E - \frac{p_z}{2m^*} = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \Leftrightarrow \quad E \equiv E_{n,p_z} = \frac{eB}{m^*}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m^*}.$$

Da wir die Dispersionsrelation $\mathcal{E} = \vec{k}^2/2m^*$ angenommen haben, gilt laut (>3.8) $m^* = m_c$ und somit

$$\omega = \frac{eB}{m^*} = \frac{eB}{m_c} = \frac{1}{m_c l_B^2} = \omega_c,$$

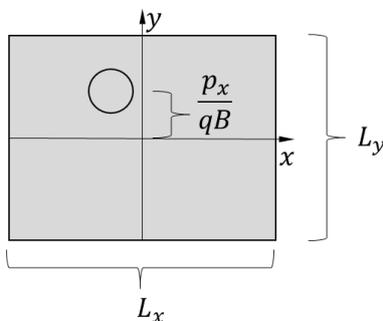
mit der Zyklotron-Frequenz aus Abschnitt 3.3. Die Energie lässt sich also schreiben als

$$E_{n,p_z} = \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m^*}$$

Beruhigenderweise liefert dies in Konsistenz mit Abschnitt 3.4 die Relation $E_{n+1,p_z} - E_{n,p_z} = \omega_c$.

4.3 Entartung der Landau-Niveaus

Zu jeder Energie E_{n,p_z} gibt es *ein* $Y_n(y)$ und *ein* p_z , jedoch beliebige p_x . Die Zustandsdichte im p -Raum in einer Dimension (hier interessant: x -Dimension) ist $L_x/(2\pi)$. Es sind aber nur solche p_x -Werte zulässig, für die der Bahnmittelpunkt innerhalb der Fläche $L_x \cdot L_y$ liegt (wenn wir den Bahnradius gegenüber L_x, L_y vernachlässigen).



Da p_x laut Schrödinger-Gleichung eine Verschiebung der Bahn um p_x/qB in y -Richtung verursacht, gilt

$$\frac{p_x}{eB} \leq \frac{1}{2} L_y \quad \text{bzw.} \quad |p_x| \leq \frac{eB}{2} L_y.$$

Somit folgt für die Anzahl der Zustände

$$\mathcal{N} = \text{1D-Zustandsdichte} \cdot \text{reziproke Länge} = \frac{L_x}{2\pi} \cdot 2 \left(\frac{eB}{2} L_y \right) = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{\Phi_{L_x L_y}}{\Phi_0},$$

wobei $l_B = 1/\sqrt{eB}$ die magnetische Länge, $\Phi_0 = 2\pi/e$ das Flussquantum und $\Phi_{L_x L_y} = L_x L_y B$ der magnetische Fluss durch die Fläche $L_x L_y$ ist.

Wir vernachlässigen hier nun den Spin, da wir ohnehin nur schwache Magnetfelder betrachten, sodass ein Zustand mit Spin-up praktisch dieselbe Energie hat, wie einer mit Spin-down. Um den Spin in dieser Näherung zu berücksichtigen, könnte man einen weiteren Entartungsfaktor 2 zu \mathcal{N} hinzufügen.

4.4 Großes Potential für ideales Fermigas mit Landau-Niveau-Energien

Für ein ideales Fermigas ist das große Potential gegeben durch¹

¹ Wir wollen diese Formel hier als Randbemerkung herleiten: Die großkanonische Zustandssumme Z_G hat die Gesamtenergie $E(\Lambda)$ und die Teilchenzahl $N(\lambda)$ im Exponenten, die vom makroskopischen Zustand Λ abhängen. Für 1-Teilchen-Zustände λ und zugehörige Energien E_λ sowie Besetzungszahlen n_λ gilt $E(\Lambda) = \sum_\lambda E_\lambda n_\lambda(\Lambda)$, wobei die Besetzungszahlen vom aktuellen makroskopischen Zustand abhängen. Ebenso gilt

$$\Omega = -kT \sum_{\text{Zustände } \lambda} \ln(1 + e^{\beta(E_\lambda - \mu)}).$$

In unserem Fall sind die Zustände durch $\lambda = (n, p_z)$ charakterisiert und \mathcal{N} -fach entartet. Schreibt man die p_z -Summe analog zu Abschnitt 1.4 als Integral, $\sum_{p_z} \rightarrow \int dp_z / ((2\pi)/L_z)$, so folgt

$$\begin{aligned} \Omega &= -kT \sum_{n, p_z} \mathcal{N} \ln(1 + \exp(\beta(E_{n, p_z} - \mu))) \\ &= -\frac{\mathcal{N} L_z kT}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln(1 + \exp(\beta(E_{n, p_z} - \mu))). \end{aligned}$$

Schreibt man den Vorfaktor als

$$\mathcal{N} L_z = \frac{L_x L_y}{2\pi} eB L_z = \frac{VeB}{2\pi} = \frac{V\mu_B^* B}{\pi} m^*, \quad \mu_B^* := \frac{e}{2m^*}$$

und setzt die Energie aus (>4.2) ein, erhält man

$$\begin{aligned} \Omega &= -\frac{\mu_B^* B}{2\pi^2} m^* V kT \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln\left(1 + \exp\left(\beta\left(\frac{1}{2} \frac{eB}{m^*} (2n+1) + \frac{p_z^2}{2m^*} - \mu\right)\right)\right) \\ &= -2\mu_B^* B \frac{m^* V kT}{4\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln(1 + \exp(\beta(\mu_B^* B (2n+1) + p_z^2/2m^* - \mu))) \\ &= 2\mu_B^* B \sum_{n=0}^{\infty} f(\mu - (2n+1)\mu_B^* B), \end{aligned}$$

wobei

$$f(x) := -\frac{m^* V}{4\pi^2 \beta} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln(1 + \exp(-\beta(x - p_z^2/2m^*))).$$

natürlich $N(\Lambda) = \sum_\lambda n_\lambda(\Lambda)$. Die Summe in Z_G über alle möglichen Zustände Λ lässt sich dann auch schreiben als Summe über alle möglichen Kombinationen von Besetzungszahlen $\{n_\lambda\}$:

$$\begin{aligned} Z_G &= \sum_{\Lambda} e^{-\beta(E(\Lambda) - \mu N(\Lambda))} = \sum_{\Lambda} e^{-\beta \sum_\lambda (E_\lambda - \mu) n_\lambda(\Lambda)} = \sum_{\{n_\lambda\}} e^{-\beta \sum_\lambda (E_\lambda - \mu) n_\lambda} = \sum_{n_1=0}^{1, \infty} \sum_{n_2=0}^{1, \infty} \dots \prod_{\lambda} e^{-\beta(E_\lambda - \mu) n_\lambda} \\ &= \prod_{\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{1, \infty} e^{-\beta(E_\lambda - \mu) n_\lambda} = \prod_{\lambda} \underbrace{(1 \pm e^{-\beta(E_\lambda - \mu)})^{\pm 1}}_{=: Z_\lambda}. \end{aligned}$$

Die Summen über die Besetzungszahlen gehen bis 1 für Fermionen (wegen des Pauli-Prinzips) oder bis ∞ für Bosonen. Das obere Vorzeichen von \pm bzw. \mp gilt entsprechend für Fermionen, das untere für Bosonen. Im letzten Schritt haben wir einfach die Summe berechnet: Die Fermionen-Summe bis 1 hat einfach zwei Glieder, die sich direkt ausschreiben lassen. Die Bosonen-Summe ist eine Geometrische Reihe, für die $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = (1-x)^{-1}$ gilt. Für das große Potential folgt nun sofort

$$\Omega = -kT \ln Z_G = -kT \sum_{\lambda} \ln Z_\lambda = \mp kT \sum_{\lambda} \ln(1 \pm e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}).$$

Da wir es hier mit Fermionen zu tun haben, haben wir die Gleichung mit dem oberen Vorzeichen benutzt. Übrigens: Mit der Wahrscheinlichkeit $W_\lambda(n_\lambda) = e^{-\beta(E_\lambda - \mu) n_\lambda} / Z_\lambda$, dass sich n_λ im Zustand λ befinden, folgt auch sofort die Fermi-Dirac- bzw. Bose-Einstein-Verteilung als mittlere Besetzungszahl:

$$\begin{aligned} \langle n_\lambda \rangle &= \sum_{n_\lambda=0}^{1, \infty} n_\lambda W_\lambda(n_\lambda) = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{1, \infty} n_\lambda e^{-\beta(E_\lambda - \mu) n_\lambda} = \frac{1}{Z_\lambda \beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n_\lambda=0}^{1, \infty} e^{-\beta(E_\lambda - \mu) n_\lambda} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \mu} \\ &= \pm \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln(1 \pm e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}) = \frac{e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}}{1 \pm e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(E_\lambda - \mu)} \pm 1}. \end{aligned}$$

4.5 Vereinfachungen mit Euler-Maclaurin-Formel

Eine Form der Summationsformel von Euler-Maclaurin ist

$$\sum_{n=0}^{\infty} F(n + 1/2) \approx \int_0^{\infty} dx F(x) + \frac{1}{24} F'(0).$$

Mit

$$f(\mu - (2n + 1)\mu_B^* B) = f(\mu - 2(n + 1/2)\mu_B^* B) =: F(n + 1/2)$$

folgt nun für unser großes Potential

$$\Omega = 2\mu_B^* B \sum_{n=0}^{\infty} F(n + 1/2) \approx 2\mu_B^* B \left(\int_0^{\infty} dx F(x) + \frac{1}{24} F'(0) \right).$$

Das Integral kann nun mittels Substitution $z := 2\mu_B Bx$ und dann $y := \mu - z$ in ein Integral umgeschrieben werden, das das Magnetfeld nur noch als Vorfaktor enthält:

$$\int_0^{\infty} dx F(x) = \int_0^{\infty} dx f(\mu - 2\mu_B^* Bx) = \frac{1}{2\mu_B^* B} \int_0^{\infty} dz f(\mu - z) = \frac{1}{2\mu_B^* B} \int_{-\infty}^{\mu} dy f(y).$$

Außerdem gilt

$$F'(0) = \left. \frac{d}{dx} F(x) \right|_{x=0} = \left. \frac{d}{dx} f(\mu - 2\mu_B^* Bx) \right|_{x=0} = -2\mu_B^* B \left. \frac{df(\mu - 2\mu_B^* Bx)}{d(\mu - 2\mu_B^* Bx)} \right|_{x=0} = -2\mu_B^* B f'(\mu).$$

Somit folgt für das große Potential

$$\Omega(\mu) = \underbrace{\int_{-\infty}^{\mu} dy f(y)}_{=\Omega_0(\mu)} - \frac{(2\mu_B^* B)^2}{24} f'(\mu),$$

wobei wir den Integralterm mit Ω_0 identifiziert haben, da er der B -unabhängige Beitrag zu Ω ist. Ferner können wir $f'(\mu)$ unter Verwendung der Leibnizregel für Parameterintegrale wie folgt schreiben:

$$f'(\mu) = \frac{\partial}{\partial \mu} f(\mu) = \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \int_{-\infty}^{\mu} dx f(x) = \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \Omega_0(\mu).$$

Somit folgt

$$\Omega = \Omega_0(\mu) - \frac{1}{6} \mu_B^{*2} B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0(\mu)}{\partial \mu^2}.$$

4.6 De-Haas-van-Alphen-Effekt

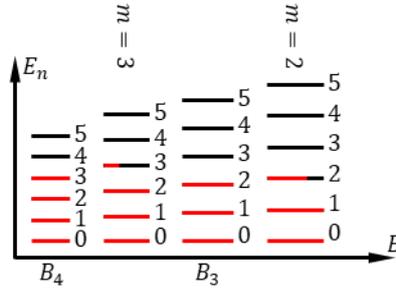
Für die Entartung \mathcal{N} der einzelnen Landau-Niveaus wissen wir aus Abschnitt 4.4

$$\mathcal{N}_B = \frac{L_x L_y e}{2\pi} B =: \alpha B,$$

wobei wir $\alpha := L_x L_y e / 2\pi$ als Abkürzung verwenden wollen. Bei $T = 0$ sitzen die N Teilchen immer in möglichst tiefen Zuständen. Für $\mathcal{N}_B > N$ sitzen alle Teilchen im untersten Zustand $n = 0$, für $2\mathcal{N}_B > N > \mathcal{N}_B$ ist der unterste Zustand $n = 0$ voll und der Zustand $n = 1$ teilweise besetzt usw. Allgemein ist der Zustand m also teilweise besetzt, falls

$$(m + 1)\mathcal{N}_B > N > m\mathcal{N}_B.$$

Für $m = 3$ gilt also $4\mathcal{N}_B > N > 3\mathcal{N}_B$, insgesamt sind also drei Niveaus ($m = 0$ bis $m = 2$) voll und eines ($m = 3$) teilweise besetzt.



Sei nun B_m das Magnetfeld, bei dem *genau* m Zustände *voll* besetzt sind, also alle von $n = 0$ bis $n = m - 1$, und alle anderen Zustände leer. Dann gilt

$$\mathcal{N}_{B_m} = \frac{N}{m} \quad \Leftrightarrow \quad B_m = \frac{N}{\alpha m}.$$

Man beachte, dass kontraintuitiverweise $B_{m+1} < B_m$. Wir betrachten nun magnetische Feldstärken im Intervall $B \in [B_{m+1}, B_m]$, für die das m -te Band teilweise und alle darunterliegenden vollständig gefüllt sind. Für die Teilchenanzahl in einem n -ten Zustand gilt dann abhängig vom Magnetfeld B

$$N_n(B) = \begin{cases} \mathcal{N}_B, & n < m \\ \tilde{\mathcal{N}}_m(B), & n = m. \\ 0, & n > m \end{cases}$$

Wir wollen uns nun eine Formel für $\tilde{\mathcal{N}}_m(B)$ überlegen. Für $B = B_{m+1}$ ist das m -te Band gerade voll; also muss $\tilde{\mathcal{N}}_m(B_{m+1}) = \mathcal{N}_{B_{m+1}}$ gelten. Für $B > B_{m+1}$ entleert es sich zu gleichen Teilen in die darunterliegenden Bänder. Diese enthielten bei $B = B_{m+1}$ bereits $\mathcal{N}_{B_{m+1}}$ Zustände, also kommen für $B > B_{m+1}$ genau $\mathcal{N}_B - \mathcal{N}_{B_{m+1}}$ neue Zustände pro Band durch die wachsende Entartung hinzu. Es gibt m Bänder unterhalb von m (nämlich von $n = 0$ bis $n = m - 1$). Also gilt

$$\tilde{\mathcal{N}}_m(B) = \mathcal{N}_{B_{m+1}} - m(\mathcal{N}_B - \mathcal{N}_{B_{m+1}}) = (m + 1)\mathcal{N}_{B_{m+1}} - m\mathcal{N}_B.$$

Diese Gleichung erfüllt die beiden Randbedingungen:

$$\tilde{\mathcal{N}}_m(B_{m+1}) = \mathcal{N}_{B_{m+1}} - m(\mathcal{N}_{B_{m+1}} - \mathcal{N}_{B_{m+1}}) = \mathcal{N}_{B_{m+1}},$$

$$\tilde{\mathcal{N}}_m(B_m) = (m + 1)\mathcal{N}_{B_{m+1}} - m\mathcal{N}_{B_m} = (m + 1)\frac{N}{m + 1} - m\frac{N}{m} = 0.$$

Das m -te Band muss bei B_m gerade leer sein.

Bei $T = 0$ gilt für die freie Energie $F = E - TS = E$, sodass wir und für die Magnetisierung $M = -\partial F/\partial B = -\partial E/\partial B$ nur um die Energie kümmern müssen. Die Energie des n -ten Landau-Niveaus ohne Berücksichtigung von p_z ist gemäß Abschnitt 4.4

$$E_n = \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{eB}{m^*} \left(n + \frac{1}{2} \right) =: \gamma B \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

wobei wir $\gamma := e/m^*$ abkürzen wollen. Dann folgt für die Gesamtenergie

$$\begin{aligned}
E(B) &= \sum_{n=0}^{\infty} N_n E_n = \sum_{n=0}^{m-1} \mathcal{N}_B E_n + \tilde{N}_m E_m \\
&= \alpha \gamma B^2 \underbrace{\sum_{n=0}^{m-1} \left(n + \frac{1}{2}\right)}_{=m^2/2} + \left((m+1)\mathcal{N}_{B_{m+1}} - m\mathcal{N}_B\right) \gamma B \left(m + \frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{1}{2} \alpha \gamma m^2 B^2 + (N - \alpha m B) \gamma B \left(m + \frac{1}{2}\right) = \alpha \gamma B^2 \left(\frac{1}{2} m^2 - m \left(m + \frac{1}{2}\right)\right) + N \gamma B \left(m + \frac{1}{2}\right) \\
&= -\frac{1}{2} \alpha \gamma B^2 m(m+1) + N \gamma B \left(m + \frac{1}{2}\right).
\end{aligned}$$

Eine genauere Analyse der Energiefunktion erfolgt der Vollständigkeit halber weiter unten; eigentlich interessieren wir uns schließlich für die Magnetisierung:

$$M(B) = -\frac{\partial E}{\partial B} = \alpha \gamma B m(m+1) - N \gamma \left(m + \frac{1}{2}\right) = \gamma \mathcal{N}_B m(m+1) - N \gamma \left(m + \frac{1}{2}\right).$$

Es gilt mit $\mathcal{N}_{B_m} = N/m$ stets

$$M(B_{m+1}) = \frac{N}{m+1} \gamma m(m+1) - N \gamma \left(m + \frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2} N \gamma,$$

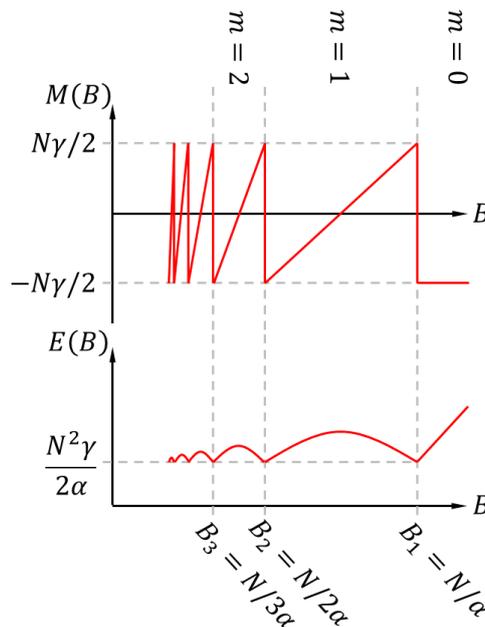
$$M(B_m) = \frac{N}{m} \gamma m(m+1) - N \gamma \left(m + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} N \gamma.$$

Die Magnetisierung macht daher bei B_m (und auch B_{m+1}) einen Sprung (siehe Abbildung unten). Dazwischen gilt, zum Beispiel für $m = 1$, mit $\mathcal{N}_B = \alpha B$

$$M(B) = 2\gamma \alpha B - \frac{3}{2} N \gamma.$$

Die Magnetisierung nimmt also von $M(B_{m+1})$ bis $M(B_m)$ linear zu.

Wir haben hier natürlich nur die Effekte untersucht, die aus $E_n \sim B$ und $\mathcal{N}_B \sim B$ entstehen, um prinzipiell die Oszillation von M zu zeigen. Zusätzlich haben wir bereits $M \approx \chi_{\text{dia}} B$ in Abschnitt 4.4 gezeigt. Die tatsächliche Magnetisierung ist dann eine Überlagerung mehrerer Effekte.



Die Grafik zeigt auch die Energiefunktion $E(B)$. Die charakteristischen Werte ergeben sich wie folgt:

$$E(B_m) = -\frac{1}{2}\alpha\gamma\frac{N^2}{\alpha^2m^2}m(m+1) + N\gamma\frac{N}{\alpha m}\left(m + \frac{1}{2}\right) = \frac{N^2\gamma}{\alpha}\left(-\frac{1}{2}\frac{m+1}{m} + \frac{m+1/2}{m}\right) = \frac{N^2\gamma}{2\alpha},$$

$$\begin{aligned} E(B_{m+1}) &= -\frac{1}{2}\alpha\gamma\frac{N^2}{\alpha^2(m+1)^2}m(m+1) + N\gamma\frac{N}{\alpha(m+1)}\left(m + \frac{1}{2}\right) = \frac{N^2\gamma}{\alpha}\left(\frac{-m/2}{m+1} + \frac{m+1/2}{m+1}\right) \\ &= \frac{N^2\gamma}{2\alpha}. \end{aligned}$$

Die Energiefunktion hat also beruhigenderweise *keine* Unstetigkeit bei $B = B_m$. Für $m = 0$ ist $E(B)$ eine lineare Funktion, für größere m eine Parabel:

$$m = 0: \quad E(B) = \frac{1}{2}N\gamma B,$$

$$m = 1: \quad E(B) = -\alpha\gamma B^2 + \frac{3}{2}N\gamma B,$$

$$m = 2: \quad E(B) = -3\alpha\gamma B^2 + \frac{5}{2}N\gamma B.$$

Das Maximum der einzelnen Parabelabschnitte liegt bei der Nullstelle der Magnetisierung:

$$M(B) = \alpha\gamma Bm(m+1) - N\gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Leftrightarrow \quad B_{\max} = \frac{N}{\alpha} \frac{m+1/2}{m(m+1)}$$

$$\Rightarrow \quad E(B_{\max}) = \frac{N^2\gamma}{\alpha} \left(-\frac{1}{2} \frac{(m+1/2)^2}{m(m+1)} + \frac{(m+1/2)^2}{m(m+1)} \right) = \frac{N^2\gamma}{2\alpha} \frac{(m+1/2)^2}{m(m+1)}.$$

5 DIE BERRY-PHASE

5.1 Einfacher Beweis des adiabatischen Theorems

Man betrachte einen Hamilton-Operator $H(\vec{\chi})$, der von verschiedenen Parametern χ_1, \dots, χ_n anhängt. Dann gilt

$$H(\vec{\chi})|n(\vec{\chi})\rangle = E_n(\vec{\chi})|n(\vec{\chi})\rangle.$$

Sei nun $\vec{\chi} \equiv \vec{\chi}(t)$ zeitabhängig, sodass sich $H(\vec{\chi}(t))$ mit der Zeit ändert:

$$H(\vec{\chi}(t))|n_t\rangle = E_n(\vec{\chi}(t))|n_t\rangle, \quad |n_t\rangle := |n(\vec{\chi}(t))\rangle$$

Der Zustand $|\psi(t)\rangle$ erfülle nun die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, das heißt in der Entwicklung

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n_t\rangle$$

seien die Koeffizienten $a_n(t)$ Funktionen der Zeit derart, dass

$$i|\dot{\psi}(t)\rangle = H(\vec{\chi}(t)) |\psi(t)\rangle.$$

Einsetzen in die linke Seite liefert

$$i|\dot{\psi}\rangle = i \sum_n (\dot{a}_n(t) |n_t\rangle + a_n(t) |\dot{n}_t\rangle) \approx i \sum_n \dot{a}_n(t) |n_t\rangle,$$

unter der Annahme, dass sich $\vec{\chi}$ mit der Zeit nur langsam ändert, sodass die Zeitableitung $\dot{\vec{\chi}}$ verschwindet (und damit per Kettenregeln auch die Zeitableitung jeder Funktion von $\vec{\chi}$, wie hier $|n_t\rangle$). Die rechte Seite liefert nun

$$H(\vec{\chi}(t)) |\psi(t)\rangle = H(\vec{\chi}(t)) \sum_n a_n(t) |n_t\rangle = \sum_n a_n(t) E_n(\vec{\chi}(t)) |n_t\rangle.$$

Gleichsetzen liefert folgende Differentialgleichung, die sich trivial lösen lässt:

$$i\dot{a}_n(t) = a_n(t)E_n(\vec{\chi}(t)) \implies a_n(t) = a_n(0)e^{-iE_n(\vec{\chi}(t))t}.$$

Diese Lösung ist korrekt, da mit $\dot{\vec{\chi}} \approx 0$ folgt, dass

$$\begin{aligned} i\dot{a}_n(t) &= ia_n(0)(-iE_n(\vec{\chi}(t)) - i\dot{\vec{\chi}} \cdot \nabla_{\vec{\chi}} E_n(\vec{\chi}(t)) t) e^{-iE_n(\vec{\chi}(t))t} \approx a_n(0)E_n(\vec{\chi}(t))e^{-iE_n(\vec{\chi}(t))t} \\ &= a_n(t)E_n(\vec{\chi}(t)). \end{aligned}$$

Somit ist $a_n(t)$ – bis auf eine Phase – konstant. Die Wahrscheinlichkeit $|a_n(t)|^2$, dass sich das System im Zustand n befindet, ist also ebenfalls konstant, obwohl der n -te Zustand sowie die Eigenenergie natürlich zeitabhängig ist, sich also zeitlich verändern kann.

5.2 Zweiter Beweis des adiabatischen Theorems

Man betrachte einen Hamilton-Operator $H(\vec{\chi})$, der von verschiedenen Parametern χ_1, \dots, χ_n anhängt. Dann gilt

$$H(\vec{\chi})|n(\vec{\chi})\rangle = E_n(\vec{\chi})|n(\vec{\chi})\rangle.$$

Sei nun $\vec{\chi} \equiv \vec{\chi}(t)$ zeitabhängig, sodass sich $H(\vec{\chi}(t))$ mit der Zeit ändert:

$$H(\vec{\chi}(t))|n_t\rangle = E_n(\vec{\chi}(t))|n_t\rangle, \quad |n_t\rangle := |n(\vec{\chi}(t))\rangle.$$

Diese Basis ist offensichtlich zeitabhängig. Wir wollen in einer zeitunabhängigen Basis arbeiten. Dazu wählen wir uns eine Basis zu einem festen Zeitpunkt t_0 . Sei nun $|\psi(t)\rangle$ irgendein Zustand, der die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i|\dot{\psi}(t)\rangle = H(\vec{\chi}(t)) |\psi(t)\rangle$$

erfüllt. In unserer Basis $|n_t\rangle$ können wir ihn entwickeln als

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n_t\rangle.$$

Um diesen Zustand in unserer zeitunabhängigen Basis $|n_0\rangle$ auszudrücken, benötigen wir eine Transformation

$$R(t_0, t) := \sum_n |n_0\rangle\langle n_t|, \quad |n_0\rangle := |n(\vec{\chi}(t_0))\rangle.$$

Diese Transformation ist unitär und zeitabhängig. Sei $|\phi(t)\rangle$ unser beliebiger Zustand $|\psi(t)\rangle$ in unserer neuen Basis:

$$|\phi(t)\rangle = R(t_0, t)|\psi(t)\rangle = \sum_n |n_0\rangle\langle n_t|\psi(t)\rangle = \sum_{nm} a_m(t) |n_0\rangle \underbrace{\langle n_t|m_t\rangle}_{=\delta_{nm}} = \sum_n a_n(t) |n_0\rangle.$$

Dann folgt per Produktregel sowie der Schrödinger-Gleichung für $|\psi\rangle$

$$i|\dot{\phi}\rangle = iR|\dot{\psi}\rangle + i\dot{R}|\psi\rangle = RH|\psi\rangle + i\dot{R}|\psi\rangle = RHR^{-1}|\phi\rangle + i\dot{R}R^{-1}|\phi\rangle.$$

Ist die zeitliche Änderung $\vec{\chi}(t)$ langsam, so folgt $\dot{R} \approx 0$. $H' := RHR^{-1}$ ist einfach der in die neue Basis transformierte Hamilton-Operator:

$$H' = RHR^{-1} = \sum_{nm} |n_0\rangle\langle n_t|H(\vec{\chi}(t))|m_t\rangle\langle m_0| = \sum_n E_n(\vec{\chi}(t)) |n_0\rangle\langle n_0|,$$

das heißt er ist diagonal in der neuen Basis mit denselben Energien E_n wie H .

Sei zum Beispiel

$$|\psi(t)\rangle = |m(\vec{\chi}(t))\rangle \quad \Rightarrow \quad |\phi(t)\rangle = |m(\vec{\chi}(t_0))\rangle.$$

$|\phi(t)\rangle$ ist in diesem Beispiel also konstant. Seine Energie ist in diesem Fall gegeben durch

$$H'|\phi\rangle = H'|m(\vec{\chi}(t_0))\rangle = E_m(t).$$

Der Zustand in dieser Basis ist also konstant, die Energie ist jedoch nach wie vor zeitabhängig. Dies beweist die Aussage des adiabatischen Theorems.

5.3 Die Berry-Phase

Die Phase eines Eigenzustandes mit Quantenzahl n eines zeitunabhängigen Hamilton-Operators ist gegeben durch

$$e^{-iE_n t}, \quad \text{d. h.} \quad \varphi = -E_n t.$$

Sind die Energien zeitabhängig gilt entsprechend

$$\varphi = - \int_{t_0}^t dt' E_n(t').$$

Nun sind $E_n(t)$ aber nur die Eigenenergien des Systems unter der Näherung $\dot{R} \approx 0$ (siehe (>5.2)). Betrachtet man $i\dot{R}R^{-1}$ als Störung zum Hamilton-Operator H' , so folgt für die Energiekorrektur

$$E_n^{(1)}(t) = i\langle n_0 | \dot{R}R^{-1} | n_0 \rangle = i \sum_{m,l} \langle n_0 | m_0 \rangle \langle \dot{m}_t | l_t \rangle \langle l_0 | n_0 \rangle = i\langle \dot{n}_t | n_t \rangle = i\dot{\chi} \langle \nabla_{\vec{\chi}} n_t | n_t \rangle,$$

wobei zuletzt die Zeitableitung per Kettenregel ausgeführt wurde. Somit folgt durch diese Energiekorrektur auch eine Korrektur der Phase. Diese Korrektur wird *Berry-Phase* genannt:

$$\varphi_{\text{Berry},n} := \varphi_n^{(1)} = - \int_{t_0}^t dt' E_n^{(1)}(t') = -i \int_{t_0}^t dt' \left(\frac{d\vec{\chi}}{dt'} \right) \langle \nabla_{\vec{\chi}} n_{t'} | n_{t'} \rangle = -i \int_{\vec{\chi}(t_0)}^{\vec{\chi}(t)} d\vec{\chi} \cdot \langle \nabla_{\vec{\chi}} n_{\vec{\chi}} | n_{\vec{\chi}} \rangle.$$

Die Berry-Phase wurde im letzten Schritt ausgedrückt als Pfadintegral im $\vec{\chi}$ -Raum – sie hängt nur vom Pfad ab, nicht aber von der Geschwindigkeit, in der auf diesem Pfad entlanggewandert wird. In diesem Sinne ist die Berry-Phase eine *geometrische Phase*.

Allerdings liefert die Eichinvarianz eine Einschränkung für die derartige Anwendbarkeit der Störungstheorie: Eichinvarianz fordert, dass sich nichts ändert, wenn ein Zustand eine zusätzliche Phase

$$|n'_t\rangle := e^{-i\Lambda_n(\vec{\chi})} |n_t\rangle$$

erhält. Allerdings ergibt sich in diesem Fall nun

$$E_n^{(1)}(t) = i\langle \dot{n}'_t | n'_t \rangle = i\langle \dot{n}_t | n_t \rangle + \dot{\vec{\chi}} \cdot \nabla_{\vec{\chi}} \Lambda_n(\vec{\chi}).$$

Für geschlossene Pfade verschwindet der Beitrag der Eichung,

$$\oint d\vec{\chi} \cdot \nabla_{\vec{\chi}} \Lambda_n = 0.$$

Damit φ_{Berry} eichinvariant ist, sind also nur geschlossene Pfade $\vec{\chi}(t)$ zulässig.

Da die Berry-Phase reell ist, kann man beide Seiten der Gleichung komplex konjugieren und erhält

$$\varphi_{\text{Berry},n} = \oint d\vec{\chi} \cdot \frac{i\langle n_{\vec{\chi}} | \nabla_{\vec{\chi}} | n_{\vec{\chi}} \rangle}{=: \vec{A}_n(\vec{\chi})} = \oint d\vec{\chi} \cdot \vec{A}_n(\vec{\chi}) = \int d\vec{S} \cdot (\nabla_{\vec{\chi}} \times \vec{A}_n(\vec{\chi})) =: \int d\vec{S} \cdot \vec{B}_n(\vec{\chi}).$$

Dabei wurde der Satz von Stokes verwendet, um eine Analogie zum „Magnetfeld“ $\vec{B}_n(\vec{\chi})$ herzustellen.

5.4 Beispiel: Spin im variablen Magnetfeld

Man betrachte den Hamilton-Operator

$$H(t) = -\frac{1}{2} \vec{B}(t) \cdot \vec{\sigma}, \quad \vec{B}(t) = B(t) \begin{pmatrix} \sin \theta(t) \cos \varphi(t) \\ \sin \theta(t) \sin \varphi(t) \\ \cos \theta(t) \end{pmatrix},$$

wobei sich das Magnetfeld nur langsam in der Zeit verändert. Das Magnetfeld \vec{B} entspricht nun dem Parametervektor $\vec{\chi}$ aus (>5.3). Für ein gegebenes Magnetfeld zu einem bestimmten Zeitpunkt gibt es zwei Zustände: Spin-up und Spin-down:

$$|\uparrow_t\rangle := \left| \uparrow \left(\vec{B}(t) \right) \right\rangle, \quad |\downarrow_t\rangle := \left| \downarrow \left(\vec{B}(t) \right) \right\rangle.$$

Spin-up ist dabei der Grundzustand. Sei bei $t_0 = 0$ das Magnetfeld in z-Richtung ausgerichtet und das System im Grundzustand. Dann gilt

$$|\uparrow_t\rangle = R|\uparrow_0\rangle, \quad |\uparrow_0\rangle = \left| \uparrow \left(\vec{B}(0) \right) \right\rangle = |\uparrow(\hat{z})\rangle$$

$$\Leftrightarrow |\uparrow_t\rangle = R^{-1}|\uparrow_0\rangle.$$

R^{-1} ist hier eine Drehmatrix. Drehungen werden von Drehimpulsoperatoren erzeugt; wir wollen unsern Spin $|\uparrow_0\rangle$ um den Winkel θ um die y -Achse und anschließend um den Winkel φ um die z -Achse drehen:

$$R^{-1} = e^{-\frac{i}{2}\varphi\sigma_z} e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y}.$$

Für eine geschlossene Trajektorie kann gelten, dass $\varphi(t_0 + T) = \varphi(t_0) + 2\pi$ und $\theta(t_0 + T) = \theta(t_0)$. Daraus würde folgen, dass

$$R^{-1}(t_0 + T) = e^{-i\pi\sigma_z} R^{-1}(t_0) = -R^{-1}(t_0),$$

wobei verwendet wurde, dass

$$e^{\pm i\pi\sigma_z} = \cos \pi \pm i\sigma_z \sin \pi = -1.$$

Es gilt also leider nicht $R^{-1}(t_0 + T) = R^{-1}(t_0)$. Als Korrektur kann man eine weitere anfängliche Drehung um die z -Achse hinzufügen, die nichts ändert, da unser Spin zu Beginn in z -Richtung ausgerichtet sein soll:

$$R^{-1} = e^{-\frac{i}{2}\varphi\sigma_z} e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y} e^{\frac{i}{2}\varphi\sigma_z}.$$

Nun gilt wie gewünscht

$$R^{-1}(t_0 + T) = e^{-i\pi\sigma_z} R^{-1}(t_0) e^{i\pi\sigma_z} = (-1)R^{-1}(t_0)(-1) = R^{-1}(t_0).$$

Mit diesem R^{-1} folgen diese beiden Beziehungen:¹

$$RHR^{-1} = -\frac{1}{2}|\vec{B}|\sigma_z,$$

¹ Die erste Beziehung kann man sich aufgrund der Definition von R denken: R wurde definiert, um das System zurück in den Zustand zu drehen, in dem es bei $t = t_0$ war. Hier war das Magnetfeld entlang der z -Achse ausgerichtet. Daher ist der Hamilton-Operator einfach der eines Spins im Magnetfeld, das in z -Richtung ausgerichtet ist.

Für die zweite Beziehung betrachte man zunächst die folgende Identität (wobei *nur* die Indizes i und j *nicht* unter die Summenkonvention fallen):

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_i}\sigma_j e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_i} &= (\cos \psi/2 + i\sigma_i \sin \psi/2)\sigma_j(\cos \psi/2 - i\sigma_i \sin \psi/2) \\ &= \cos^2 \psi/2 \sigma_j + i[\sigma_i, \sigma_j] \cos \psi/2 \sin \psi/2 + \sigma_i\sigma_j\sigma_i \sin^2 \psi/2 \\ &= \cos^2 \psi/2 \sigma_j - 2\epsilon_{ijk}\sigma_k \cos \psi/2 \sin \psi/2 + \sigma_i(\sigma_i\sigma_j - [\sigma_i, \sigma_j]) \sin^2 \psi/2 \\ &= \cos^2 \psi/2 \sigma_j - \epsilon_{ijk}\sigma_k \sin \psi + (\sigma_j - 2i\epsilon_{ijk}\sigma_i\sigma_k) \sin^2 \psi/2 \\ &= \sigma_j - \epsilon_{ijk}\sigma_k \sin \psi - 2i\epsilon_{ijk}\sigma_i\sigma_k \sin^2 \psi/2 = \sigma_j - \epsilon_{ijk}\sigma_k \sin \psi - 2i\epsilon_{ijk}(\delta_{ik} + i\epsilon_{kni}\sigma_n) \sin^2 \psi/2 \\ &= \sigma_j - \epsilon_{ijk}\sigma_k \sin \psi + 2(\delta_{in}\delta_{ji} - \delta_{jn}\delta_{ii})\sigma_n \sin^2 \psi/2 \\ &= \sigma_j(1 - 2\sin^2 \psi/2) - \epsilon_{ijk}\sigma_k \sin \psi + 2\delta_{ji}\sigma_i \sin^2 \psi/2 = \sigma_j \cos \psi - \epsilon_{ijk}\sigma_k \sin \psi + 2\delta_{ji}\sigma_i \sin^2 \psi/2. \end{aligned}$$

Somit folgt für ein allgemeines $R^{-1} = e^{-\frac{i}{2}\varphi\sigma_z} e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y} e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z}$

$$\begin{aligned} i\dot{R}R^{-1} &= i \left(\frac{i}{2}\sigma_z\dot{\psi}R + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z} \frac{i}{2}\sigma_y\dot{\theta} e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z} R + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z} e^{\frac{i}{2}\theta\sigma_y} \frac{i}{2}\sigma_z\dot{\varphi} e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y} e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z} R \right) R^{-1} \\ &= -\frac{1}{2} \left(\sigma_z\dot{\psi} + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z}\sigma_y e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z}\dot{\theta} + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z} \left(e^{\frac{i}{2}\theta\sigma_y}\sigma_z e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y} \right) e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z}\dot{\varphi} \right) \\ &= -\frac{1}{2} \left(\sigma_z\dot{\psi} + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z}\sigma_y e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z}\dot{\theta} + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z}(\sigma_z \cos \theta - \sigma_x \sin \theta) e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z}\dot{\varphi} \right) \\ &= -\frac{1}{2} \left(\sigma_z(\dot{\psi} + \cos \theta \dot{\varphi}) + e^{\frac{i}{2}\psi\sigma_z}(\sigma_y\dot{\theta} - \sigma_x \sin \theta \dot{\varphi}) e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma_z} \right). \end{aligned}$$

Setzt man hierfür nun unseren Spezialfall $\psi = -\varphi$ ein, erhält man die gewünschte Relation.

$$i\dot{R}R^{-1} = \underbrace{\frac{1}{2}\dot{\varphi}(1 - \cos\theta)\sigma_z}_{\text{diagonal}} + e^{-\frac{i}{2}\varphi\sigma_z} \underbrace{\left(\frac{1}{2}\dot{\varphi}\sin\theta\sigma_x - \frac{1}{2}\dot{\theta}\sigma_y\right)}_{\text{nicht diagonal}} e^{\frac{i}{2}\varphi\sigma_z}.$$

Zur Energiekorrektur erster Ordnung, die für die Berry-Phase verantwortlich ist, tragen nur die diagonalen Anteile der Korrektur $i\dot{R}R^{-1}$ bei. Somit folgt

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{Berry},\uparrow} &= -\int_{t_0}^t dt' E_{\uparrow}^{(1)}(t') = -i \int_{t_0}^t dt' \langle \uparrow_0 | \dot{R}R^{-1} | \uparrow_0 \rangle = -\frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \langle \uparrow(\hat{z}) | \dot{\varphi}(1 - \cos\theta)\sigma_z | \uparrow(\hat{z}) \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \dot{\varphi}(1 - \cos\theta) = -\frac{1}{2} \oint d\varphi (1 - \cos\theta).\end{aligned}$$

Für ein konstantes θ entspricht dies gerade dem halben vom Pfad eingeschlossenen Raumwinkel. Zum Beispiel ergibt sich für $\theta = \pi/2$

$$\varphi_{\text{Berry},\uparrow} = -\frac{1}{2} \oint d\varphi = -\pi.$$

Der volle Raumwinkel eines Kreises durch den Ursprung wäre 2π .

Für den Spin-down-Zustand ergäbe sich aus dem Matrixelement $\langle \downarrow_0 | \sigma_z | \downarrow_0 \rangle$ ein negatives Vorzeichen und entsprechend $\varphi_{\text{Berry},\downarrow} = -\varphi_{\text{Berry},\uparrow}$.

6 GRAPHEN

6.1 Basisvektoren des realen und reziproken Gitters

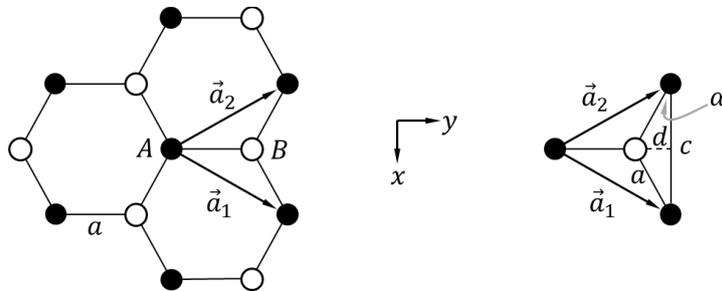
Da das gleichmäßige Dreieck, das von den drei schwarzen Punkten gebildet wird, drei gleiche Winkel von je $2\alpha = 60^\circ$ hat, folgen für d und c :

$$\sin \alpha = \frac{d}{a}, \quad \cos \alpha = \frac{c/2}{a}.$$

Somit folgt für die Basisvektoren¹

$$\vec{a}_1 = \frac{c}{2}\hat{x} + (a+d)\hat{y} = a \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ 1 + \sin \alpha \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\vec{a}_2 = -\frac{c}{2}\hat{x} + (a+d)\hat{y} = a \begin{pmatrix} -\cos \alpha \\ 1 + \sin \alpha \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$



Für die Fläche der Elementarzelle folgt

$$\Omega_a = \hat{z} \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \hat{z} \cdot \frac{a^2}{4} \left(\begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{3\sqrt{3}a^2}{2}.$$

und für die Basisvektoren des reziproken Gitters

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega_a} (\vec{a}_2 \times \hat{z}) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 3 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega_a} (\hat{z} \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -3 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega_a} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = 2\pi\hat{z}.$$

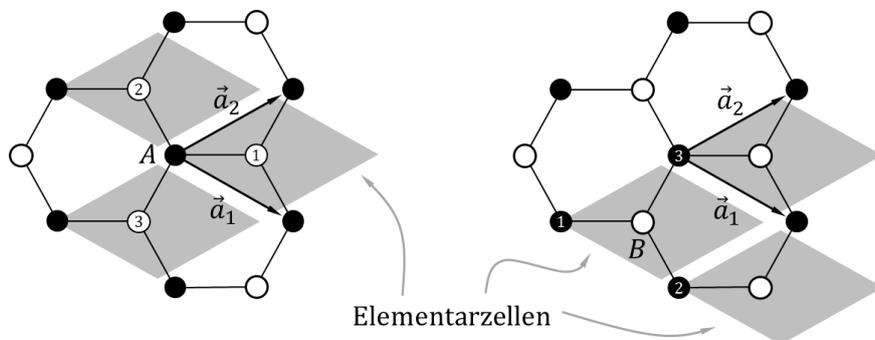
6.2 Bandstruktur nach Tight-Binding-Näherung

Der Hamilton-Operator in Tight-Binding-Näherung ist in Abschnitt 2.3 gegeben worden als

$$H = \sum_{\vec{R}_1, \vec{R}_2, m_1, m_2} t_{m_1 m_2} (\vec{R}_1 - \vec{R}_2) c_{\vec{R}_2 m_2}^\dagger c_{\vec{R}_1 m_1}.$$

¹ Wir wählen hier die x -Achse nach unten, da spätere Ergebnisse dadurch in eleganterer Form auftreten.

Dabei ist $t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Elektron von einem Zustand m_1 der Elementarzelle \vec{R}_1 in einen Zustand m_2 der Elementarzelle \vec{R}_2 wechselt bzw. „springt“. Wir wollen annehmen, dass es pro Atom nur einen relevanten Zustand gibt. Dabei vernachlässigen wir zunächst auch den Spin; da wir annehmen, dass die Elektronen ihren Spin beim Hin- und Herspringen ohnehin beibehalten, ist der Spin irrelevant. Pro Elementarzelle gibt es dann zwei Zustände, nämlich einen Zustand für jedes der beiden Atome in der Elementarzelle, also $m_i = A, B$ (die Atome vom Typ A sind in den Grafiken schwarz ausgemalt, die Atome vom Typ B weiß).



Man berücksichtige ferner nur Sprünge zwischen nächsten Nachbarn. Wenn man von einem Atom A zu einem Atom B springt, wechselt man die Elementarzelle entweder gar nicht (Sprung zu Atom ①, $\vec{R} := \vec{R}_1 - \vec{R}_2 = 0$), man geht eine Elementarzelle nach links-oben (Sprung zu Atom ②, $\vec{R} = -\vec{a}_1$) oder eine Elementarzelle nach unten links-unten (zu Atom ③, $\vec{R} = -\vec{a}_2$). Aufgrund der Symmetrie wird die Wahrscheinlichkeit für die drei Optionen gleich sein, wir bezeichnen sie mit t :

$$t_{AB}(\vec{R}) = \begin{cases} t, & \vec{R} = 0, -\vec{a}_1, -\vec{a}_2. \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Wenn man umgekehrt von B nach A (also zu ①, ② oder ③) springt gilt entsprechend

$$t_{BA}(\vec{R}) = \begin{cases} t, & \vec{R} = 0, \vec{a}_1, \vec{a}_2. \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Man beachte, dass man bei jedem Sprung immer den Zustand m wechseln muss. Sprünge zwischen Atomen gleichen Typs sind aufgrund der Geometrie von Graphen immer Sprünge zu übernächsten Nachbarn oder weiter, die wir hier vernachlässigen. Also gilt $t_{AA} = t_{BB} = 0$.

Ausgehend von obigem Hamilton-Operator wurde im Abschnitt 2.3 eine Gleichung für die Energieniveaus hergeleitet:

$$E_{n,\vec{k}} b_{nm} = \sum_{\vec{R}', m'} t_{m' m}(\vec{R}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} b_{nm'},$$

wobei b_{nm} die Koeffizienten der atomaren Zustände sind:

$$\psi_{n,\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_{m=1}^M b_{nm} |\vec{R}, m\rangle.$$

Die Energiegleichung für $m = A$ und $m = B$ lässt sich somit explizit schreiben als

$$E_{n,\vec{k}} b_{nA} = \sum_{\vec{R}', m'} t_{m' A}(\vec{R}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} b_{nm'} = \sum_{\vec{R}'} t_{BA}(\vec{R}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} b_{nB} = t \left(1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) b_{nB},$$

$$E_{n,\vec{k}} b_{nB} = \sum_{\vec{R}', m'} t_{m' B}(\vec{R}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} b_{nm'} = \sum_{\vec{R}'} t_{AB}(\vec{R}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} b_{nA} = t \left(1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) b_{nA}.$$

Diese beiden Gleichungen können wir in einer Matrixgleichung zusammenfassen:

$$\begin{pmatrix} E_{n,\vec{k}} & -t(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}) \\ -t(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}) & E_{n,\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{nA} \\ b_{nB} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} E_{n,\vec{k}} & -t\epsilon_{\vec{k}} \\ -t\epsilon_{\vec{k}}^* & E_{n,\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{nA} \\ b_{nB} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0.$$

Dabei haben wir die Klammern mit den Exponentialfunktionen als $\epsilon_{\vec{k}}$ abgekürzt. Eine nicht-triviale Lösung erfordert, dass die Determinante der Matrix verschwindet:

$$\det \begin{pmatrix} E_{n,\vec{k}} & -t\epsilon_{\vec{k}} \\ -t\epsilon_{\vec{k}}^* & E_{n,\vec{k}} \end{pmatrix} = E_{n,\vec{k}}^2 - t^2 \epsilon_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^* \stackrel{!}{=} 0 \quad \Leftrightarrow \quad E_{\pm,\vec{k}} = \pm t \sqrt{\epsilon_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^*}.$$

Setzt man nun die Basisvektoren \vec{a}_i in die Formel für $\epsilon_{\vec{k}}$ ein, erhält man

$$\epsilon_{\vec{k}} := 1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} = 1 + e^{\frac{ia}{2}(\sqrt{3}k_x + 3k_y)} + e^{\frac{ia}{2}(-\sqrt{3}k_x + 3k_y)} = 1 + 2e^{\frac{3ia}{2}k_y} \cos(\sqrt{3}ak_x/2).$$

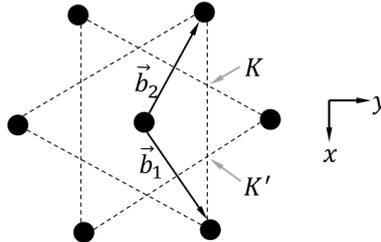
und

$$\begin{aligned} \epsilon_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^* &= \left(1 + 2e^{\frac{3ia}{2}k_y} \cos(\sqrt{3}ak_x/2)\right) \left(1 + 2e^{-\frac{3ia}{2}k_y} \cos(\sqrt{3}ak_x/2)\right) \\ &= 1 + 4 \cos(3ak_y/2) \cos(\sqrt{3}ak_x/2) + 4 \cos^2(\sqrt{3}ak_x/2) \\ &= 3 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_x) + 4 \cos(3ak_y/2) \cos(\sqrt{3}ak_x/2), \end{aligned}$$

wobei zuletzt $\cos^2 x = (\cos 2x + 1)/2$ verwendet wurde.

6.3 Näherung an den Ecken der ersten Brillouin-Zone

Die erste Brillouin-Zone von Graphen ist ein Sechseck. Wir benennen nun eine Ecke als K und eine benachbarte als K' (siehe Abbildung). Die übrigen vier Ecken lassen sich über reziproke Gittervektoren entweder von K aus oder von K' aus erreichen. Alle Ecken, die sich von K aus erreichen lassen, zählen wir zur „ K -Gruppe“, die übrigen entsprechend zur „ K' -Gruppe“. Wegen der Erreichbarkeit über reziproke Gittervektoren sind die Ecken einer Gruppe einander Äquivalent. Daher genügt es, nur die beiden unten eingezeichneten nicht-äquivalenten Ecken K und K' zu betrachten.



Diese beiden Ecken liegen an folgenden Stellen:

$$\vec{K} = \vec{b}_1 + \frac{2}{3}(\vec{b}_2 - \vec{b}_1) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{K}' = \vec{b}_1 + \frac{1}{3}(\vec{b}_2 - \vec{b}_1) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Wir wollen nun die Energiebänder $E_{\pm,\vec{k}}$ bei \vec{K} und \vec{K}' nähern. Mit der Taylorreihe

$$\cos(\pm \pi/3 + x) = \frac{1}{2} \mp \frac{\sqrt{3}}{2} x + \mathcal{O}(x^2)$$

folgt bis Ordnungen kleiner als $\mathcal{O}(q_i^2)$ für $\epsilon_{\vec{K}+\vec{q}}$ (also am Punkt K)

$$\begin{aligned}\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} &= 1 + 2e^{\frac{3ia}{2}(\frac{2\pi}{3a}+q_y)} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} + q_x\right)\right) = 1 + 2e^{i\pi} e^{i\frac{3a}{2}q_y} \cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}a}{2}q_x\right) \\ &\approx 1 + 2(-1)\left(1 + i\frac{3a}{2}q_y\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{3a}{4}q_x\right) \approx \frac{3a}{2}(q_x - iq_y).\end{aligned}$$

Für die Energie folgt somit

$$E_{\pm, \vec{k}+\vec{q}} = \pm t \sqrt{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^*} \approx \pm \frac{3at}{2} \sqrt{q_x^2 + q_y^2} = \pm \frac{3at}{2} |\vec{q}|^2.$$

Am Punkt K' folgt:

$$\begin{aligned}\epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} &= 1 + 2e^{\frac{3ia}{2}(\frac{2\pi}{3a}+q_y)} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\left(-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} + q_x\right)\right) = 1 + 2e^{i\pi} e^{i\frac{3a}{2}q_y} \cos\left(-\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}a}{2}q_x\right) \\ &\approx 1 + 2(-1)\left(1 + i\frac{3a}{2}q_y\right)\left(\frac{1}{2} + \frac{3a}{4}q_x\right) \approx -\frac{3a}{2}(q_x + iq_y)\end{aligned}$$

sowie

$$E_{\pm, \vec{k}'+\vec{q}} = \pm t \sqrt{\epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}}^*} \approx \pm \frac{3at}{2} \sqrt{q_x^2 + q_y^2} = \pm \frac{3at}{2} |\vec{q}|^2.$$

6.4 Hamilton-Operator mit Pauli-Matrizen

Die Matrix-Gleichung aus (>6.2) lässt sich schreiben als

$$\begin{pmatrix} E_{\pm, \vec{k}} & -t\epsilon_{\vec{k}} \\ -t\epsilon_{\vec{k}}^* & E_{\pm, \vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\pm A} \\ b_{\pm B} \end{pmatrix} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 & t\epsilon_{\vec{k}} \\ t\epsilon_{\vec{k}}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\pm A} \\ b_{\pm B} \end{pmatrix} = E_{\pm, \vec{k}} \begin{pmatrix} b_{\pm A} \\ b_{\pm B} \end{pmatrix}.$$

Diese Matrix, deren Eigenwerte die Energien sind, ist also unser Hamilton-Operator. In der Näherung für kleine Energien/Temperaturen lässt er sich in der Umgebung von \vec{K} und \vec{K}' mit Pauli-Matrizen schreiben als

$$\begin{aligned}H_K &= \begin{pmatrix} 0 & t\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} \\ t\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^* & 0 \end{pmatrix} \approx \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} = \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \end{pmatrix} = \frac{3at}{2} \vec{q} \cdot \vec{\sigma}, \\ H_{K'} &= \begin{pmatrix} 0 & t\epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} \\ t\epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}}^* & 0 \end{pmatrix} \approx -\frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} = -\frac{3at}{2} \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1^* \\ \sigma_2^* \end{pmatrix} = -\frac{3at}{2} \vec{q} \cdot \vec{\sigma}^*.\end{aligned}$$

Was die Dimension angeht, ist Energie gleich Geschwindigkeit mal Impuls. $3at/2$ hat somit die Dimension einer Geschwindigkeit. Da t bisher ohnehin unbestimmt ist, definieren wir $v := 3at/2$:

$$H_K = v \vec{\sigma} \cdot \vec{q}, \quad H_{K'} = -v \vec{\sigma}^* \cdot \vec{q}.$$

Schreibt man nun eine Basis als $\psi = (b_{\pm AK}, b_{\pm BK}, b_{\pm AK'}, b_{\pm BK'})$, kann man beide Hamilton-Matrizen zusammenfassen:

$$H = v \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{q} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma}^* \cdot \vec{q} \end{pmatrix}.$$

6.5 Landau-Niveaus

Man betrachte die Landau-Niveaus bei niedrigen Energien im Punkt K . Wir benutzen hier \vec{p} statt \vec{q} für den Impuls, um Verwechslungen mit der Ladung q zu vermeiden. Dann gilt

$$H_K = v\vec{\sigma} \cdot \vec{p} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}.$$

Mit minimaler Kopplung $\vec{q} \rightarrow \vec{q} - q\vec{A}$ und einem Magnetfeld in z-Richtung mit $\vec{A} = -By\vec{e}_x$ folgt

$$H_K = v \begin{pmatrix} 0 & p_x + qBy - ip_y \\ p_x + qBy + ip_y & 0 \end{pmatrix}.$$

Die entsprechende Eigenwertgleichung ist dann

$$v \begin{pmatrix} 0 & p_x + qBy - ip_y \\ p_x + qBy + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}.$$

Führt man die Matrixmultiplikation aus, ergeben sich die beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} v(p_x + qBy - ip_y)\psi_B &= E\psi_A, & v(p_x + qBy + ip_y)\psi_A &= E\psi_B \\ \Leftrightarrow v^2(p_x + qBy - ip_y)(p_x + qBy + ip_y)\psi_A &= E^2\psi_A, \\ v^2(p_x + qBy + ip_y)(p_x + qBy - ip_y)\psi_B &= E^2\psi_B, \end{aligned}$$

wobei wir die ψ_A 's und ψ_B 's ineinander eingesetzt haben, um je eine Gleichung für ψ_A und ψ_B zu erhalten. Die Doppelklammern lassen sich ausschreiben als

$$\begin{aligned} (p_x + qBy \mp ip_y)(p_x + qBy \pm ip_y) &= p_x^2 + 2qBy p_x + q^2 B^2 y^2 \pm iqB \underbrace{[y, p_y]}_{=i} + p_y^2 \\ &= p_y^2 + (p_x + qBy)^2 \mp qB. \end{aligned}$$

Das obere Vorzeichen gehört zu ψ_A , das untere zu ψ_B . Dies entspricht der Oszillatorgleichung. Damit man das besser sieht, kann man die Gleichungen umschreiben als

$$\begin{aligned} v^2(p_y^2 + (qBy + p_x)^2 \mp qB)\psi_{A,B} &= E^2\psi_{A,B} \\ \Leftrightarrow \left(p_y^2 + q^2 B^2 \left(y + \frac{p_x}{qB} \right)^2 \right) \psi_{A,B} &= \left(\frac{E^2}{v^2} \pm qB \right) \psi_{A,B}. \end{aligned}$$

Vergleicht man dies nun mit der typischen Oszillatorgleichung,

$$\left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} y^2 \right) \psi = \omega(n + 1/2)\psi \quad \Leftrightarrow \quad (p_y^2 + m^2\omega^2 y^2)\psi = 2m\omega(n + 1/2)\psi$$

findet man

$$m^2\omega^2 = q^2 B^2 \quad \Leftrightarrow \quad \omega = \frac{eB}{m}$$

sowie¹

$$\begin{aligned} 2m\omega(n + 1/2) &= E^2/v^2 \pm eB \\ \Leftrightarrow E &= \pm' v \sqrt{2m\omega(n + 1/2) \mp eB} = \pm' v \sqrt{2eBn + eB \mp eB} = \begin{cases} \pm' v \sqrt{2eBn}, & \psi_A \\ \pm' v \sqrt{2eB(n + 1)}, & \psi_B \end{cases}. \end{aligned}$$

Insgesamt sind also Energiewerte

¹ Der Strich an dem einen \pm soll andeuten, dass dieses Vorzeichen unabhängig von dem ungestrichenen \mp gewählt werden kann. Es sind also alle Energien für alle Kombinationen von Vorzeichen von \pm' und \mp erlaubt.

$$E_{n\pm} = \pm v\sqrt{2eBn}$$

möglich.

7 BOLTZMANN-GLEICHUNG

7.1 Satz von Liouville

Sei $\vec{x} = (\vec{r}, \vec{p})$ ein Ort im Phasenraum, dann gilt mit den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{x}} = \begin{pmatrix} \dot{\vec{r}} \\ \dot{\vec{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla_{\vec{p}} H \\ -\nabla_{\vec{r}} H \end{pmatrix}.$$

Somit folgt unter Verwendung der Phasenraumdivergenz $\text{div} := (\nabla_{\vec{r}}, \nabla_{\vec{p}})$, dass das Geschwindigkeitsfeld von Trajektorien im Phasenraum quellenfrei ist:

$$\text{div } \dot{\vec{x}} = \nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{p}} H - \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{r}} H = 0.$$

Die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte $f(n, \sigma, \vec{p}, \vec{r}, t)$ ergibt sich aus dem Hamilton-Formalismus mittels Poisson-Klammer dann zu

$$\frac{\partial}{\partial t} f = -\{f, H\} = (\nabla_{\vec{p}} f) \cdot (\nabla_{\vec{r}} H) - (\nabla_{\vec{r}} f) \cdot (\nabla_{\vec{p}} H) = -\dot{\vec{p}} \cdot (\nabla_{\vec{p}} f) - \dot{\vec{r}} \cdot (\nabla_{\vec{r}} f) = -\text{div } \dot{\vec{x}} f.$$

Dies ist eine Kontinuitätsgleichung für f im Phasenraum. Rechnet man mit der Produktregel weiter, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t} f = -\text{div } \dot{\vec{x}} f = -\dot{\vec{x}} \text{grad } f - f \underbrace{\text{div } \dot{\vec{x}}}_{=0}.$$

Schließlich folgt für die totale Zeitableitung

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\vec{x}} \text{grad } f = 0.$$

7.2 Hinreichende Bedingung für ein Gleichgewicht

Eine hinreichende Möglichkeit, die Gleichgewichtsbedingung $I = I_{\text{in}} + I_{\text{out}} = 0$ zu erfüllen, besteht darin, in der Impulssumme alle Summenglieder zum Verschwinden zu bringen (sogenannte *detailed Balance*):

$$\begin{aligned} I[f_0] &= I_{\text{in}}[f_0] + I_{\text{out}}[f_0] = \sum_{\vec{p}_1} W_{\vec{p}_1 \vec{p}} f_0(\vec{p}_1) (1 - f_0(\vec{p})) + \sum_{\vec{p}_2} W_{\vec{p} \vec{p}_2} f_0(\vec{p}) (1 - f_0(\vec{p}_2)) \\ &= \sum_{\vec{p}'} \left(W_{\vec{p}' \vec{p}} f_0(\vec{p}') (1 - f_0(\vec{p})) - W_{\vec{p} \vec{p}'} f_0(\vec{p}) (1 - f_0(\vec{p}')) \right) \\ &= \sum_{\vec{p}'} \left(W_{\vec{p}' \vec{p}} f_0(\vec{p}') f_0(\vec{p}) e^{\beta(\varepsilon_n(\vec{p}) - \mu)} - W_{\vec{p} \vec{p}'} f_0(\vec{p}) f_0(\vec{p}') e^{\beta(\varepsilon_n(\vec{p}') - \mu)} \right) \\ &= \sum_{\vec{p}'} f_0(\vec{p}') f_0(\vec{p}) e^{-\beta\mu} \left(W_{\vec{p}' \vec{p}} e^{\beta\varepsilon_n(\vec{p})} - W_{\vec{p} \vec{p}'} e^{\beta\varepsilon_n(\vec{p}')} \right) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow & \quad W_{\vec{p}' \vec{p}} e^{\beta\varepsilon_n(\vec{p})} \stackrel{!}{=} W_{\vec{p} \vec{p}'} e^{\beta\varepsilon_n(\vec{p}')} \end{aligned}$$

Dabei wurde verwendet, dass f im Gleichgewicht die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f_0(\vec{p}) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n(\vec{p}) - \mu)} + 1} \quad \Leftrightarrow \quad 1 - f_0(\vec{p}) = f_0(\vec{p}) e^{\beta(\varepsilon_n(\vec{p}) - \mu)}$$

einnimmt.

Im Folgenden werden wir $W_{\vec{p}\vec{p}'} = W_{\vec{p}'\vec{p}} = 2\pi|\langle\vec{p}'|U(\vec{r})|\vec{p}\rangle|^2\delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p}))$ verwenden (Fermis Goldene Regel). Die δ -Funktion sorgt dafür, dass wir nach Belieben $\mathcal{E}(\vec{p}') \leftrightarrow \mathcal{E}(\vec{p})$ ersetzen dürfen. Im Gleichgewicht mit $f = f_0$ erfüllt dieses $W_{\vec{p}\vec{p}'}$ somit detailed Balance:

$$W_{\vec{p}'\vec{p}}e^{\beta\mathcal{E}_n(\vec{p})} = \underbrace{W_{\vec{p}\vec{p}'}}_{=W_{\vec{p}'\vec{p}} \rightarrow e^{\beta\mathcal{E}_n(\vec{p})}} e^{\beta\mathcal{E}_n(\vec{p}')}$$

Wählt man also dieses spezielle $W_{\vec{p}\vec{p}'}$, so folgt $I[f_0] = 0$.

7.3 Stoßintegral für elastische Stöße

Nimmt man Zeitumkehrsymmetrie an, folgt $W_{\vec{p}\vec{p}'} = W_{\vec{p}'\vec{p}}$. Damit folgt

$$\begin{aligned} I[f(\vec{p})] &= \sum_{\vec{p}'} \left(W_{\vec{p}'\vec{p}} f(\vec{p}') (1 - f(\vec{p})) - W_{\vec{p}\vec{p}'} f(\vec{p}) (1 - f(\vec{p}')) \right) \\ &= \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \left(f(\vec{p}') (1 - f(\vec{p})) - f(\vec{p}) (1 - f(\vec{p}')) \right) = \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} (f(\vec{p}') - f(\vec{p})). \end{aligned}$$

7.4 Fermis Goldener Regel: Vereinfachung des Matrixelements

Wir wollen nun den Fall untersuchen, in dem die Störstellen jeweils durch ein Potential $u(\vec{r} - \vec{a}_i)$ beschrieben werden. Wir untersuchen also eine Menge gleichartige Störstellen an Stellen \vec{a}_i . Insgesamt Verursachen alle diese Störstellen ein Störpotential

$$U(\vec{r}) = \sum_i u(\vec{r} - \vec{a}_i).$$

In der Regel entstehen Störstellen durch den Austausch von einem regulären Gitteratom mit einem „falschen“ Atom. Daher nehmen wir an, dass *wenn* es eine Störstelle in einer bestimmten Elementarzelle gibt, dass sie sich *dann* innerhalb dieser Zelle immer am selben Ort befindet $\delta\vec{a}$. Wir schreiben den Ort einer Störstelle dann also mit $\vec{a}_i = \vec{R}_i + \delta\vec{a}$, wobei \vec{R}_i all jene Elementarzellen liefert, in der diese Störstelle liegt und $\delta\vec{a}$ für alle Störstellen gleich ist. Dies ist insbesondere dort sinnvoll, wo es in jeder Elementarzelle nur ein Atom von einer bestimmten Sorte gibt, denn ein bestimmtes „falsches“ Atom wird sich vermutlich bevorzugt anstelle eines Atoms einer bestimmten Sorte ansiedeln – und dieses liegt dann innerhalb einer Elementarzelle immer an der gleichen Stelle.

Wir können nun die Übergangswahrscheinlichkeiten $W_{\vec{p}\vec{p}'}$ mit Fermis Goldener Regel berechnen:¹

$$W_{\vec{p}\vec{p}'} = 2\pi|\langle\vec{p}'|U(\vec{r})|\vec{p}\rangle|^2\delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})), \quad |\vec{p}\rangle := \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} u_{\vec{p}}(\vec{r}).$$

Als nächstes betrachte wir das Matrixelement genauer:²

$$\begin{aligned} \langle\vec{p}'|U(\vec{r})|\vec{p}\rangle &= \frac{1}{V} \int d^3r \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_i \int d^3r e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}} u_{\vec{p}'}(\vec{r}) u_{\vec{p}}(\vec{r}) u(\vec{r} - \vec{R}_i - \delta\vec{a}) \\ &= \sum_i e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{R}_i} \underbrace{\frac{1}{V} \int d^3r e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}} u_{\vec{p}'}(\vec{r}) u_{\vec{p}}(\vec{r}) u(\vec{r} - \delta\vec{a})}_{=:\langle\vec{p}'|u(\vec{r})|\vec{p}\rangle} \end{aligned}$$

¹ Wir beschränken uns bei dieser Rechnung wieder auf ein bestimmtes Band und lassen Bandindizes weg. Außerdem nutzen wir hier auf 1 normierte Bloch-Zustände mit dem Normierungsfaktor $1/\sqrt{V}$ (siehe hierzu auch Abschnitt 1.9).

² Man verwechsle hier nicht die Bloch-Funktionen $u_{\vec{p}}(\vec{r})$ mit dem Potential einer Störstelle $u(\vec{r})$.

Dabei wurde bei der Verschiebung des Integrals um \vec{R}_i verwendet, dass die Bloch-Funktionen $u_{\vec{p}}(\vec{r})$ periodisch unter Verschiebung um Gittervektoren sind. In Fermis Goldener Regel kommt das Matrixelement quadriert vor:

$$|\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 = |\langle \vec{p}' | u(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 \sum_{ij} e^{-i(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}.$$

Wir nehmen an, dass die Störstellen stochastisch im Material verteilt liegen. Die doppelte Summe über sämtliche Störstellen liefert also für alle i, j stochastische Phasen $\sim \vec{R}_i - \vec{R}_j$, außer bei jenen Summanden mit $i = j$; davon gibt es immer N_{St} Stück – wobei N_{St} die Anzahl der Störstellen ist. Die Summanden liegen also alle stochastisch verteilt auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene und zusätzlich gibt es noch N_{St} Summanden bei $1 + 0i$. Die stochastisch verteilten Summanden heben sich nun (annähernd) gegenseitig weg; daher gilt

$$|\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 = N_{\text{St}} |\langle \vec{p}' | u(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2.$$

7.5 Bemerkung zur Annahme für die Impuls-Relaxationszeit

In der Vorlesung von Herr Shnirman geht man anders vor: Man nimmt zunächst an, dass $W_{\vec{p}\vec{p}'} =: W$ konstant ist, sodass $\sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \delta f(\vec{p}') = W \sum_{\vec{p}'} \delta f(\vec{p}')$. Diese Summe ist proportional zur Variation der Dichte, wenn man die Abhängigkeit vom Bandindex und vom Spin vernachlässigt:

$$\delta n(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{n, \sigma} \int d^3 \vec{p} \delta f(\vec{p}') = \frac{1}{V} \sum_{n, \sigma} \sum_{\vec{p}'} \delta f(\vec{p}', \vec{r}).$$

Somit entspricht die Annahme $\sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \delta f(\vec{p}') = W \sum_{\vec{p}'} \delta f(\vec{p}') = 0$ der Annahme, dass die Elektronen-Dichte nicht von der Dichte im Gleichgewicht abweicht.

Unter den Annahmen, dass $W_{\vec{p}\vec{p}'}$ konstant ist sowie dass die Dichte nicht von der Dichte im Gleichgewicht abweicht, findet man also

$$I[\delta f(\vec{p})] = \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} (\delta f(\vec{p}') - f(\vec{p})) = W \sum_{\vec{p}'} (\delta f(\vec{p}') - f(\vec{p})) = -f(\vec{p}) \underbrace{W \sum_{\vec{p}'} 1}_{=: \tau} = -\frac{f(\vec{p})}{\tau}.$$

Dieses τ ist allerdings nicht das τ , das später auch im Shnirman-Skript als Impuls-Relaxationszeit berechnet wird; dort berechnet man nämlich

$$\tau = \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'}$$

für ein nicht-konstantes $W_{\vec{p}\vec{p}'}$ (wir führen diese Rechnung in (>7.6) aus). Ich kann diese Diskrepanz nicht erklären.

7.6 Impuls-Relaxationszeit

Mit Fermis Goldener Regel und der Vereinfachung des Störpotentials,

$$W_{\vec{p}\vec{p}'} = 2\pi |\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})),$$

$$|\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 = N_{\text{St}} |\langle \vec{p}' | u(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 =: N_{\text{St}} |\theta_{\vec{p}\vec{p}'}|^2,$$

folgt für die Relaxationszeit unter Verwendung von Abschnitt 1.4 zu¹

¹ Wir beschränken uns bei dieser Rechnung wieder auf ein bestimmtes Band und lassen Bandindizes weg.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau} &:= \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} = \int d^3\vec{p}' W_{\vec{p}\vec{p}'} = 2\pi N_{\text{St}} \int d^3\vec{p}' |u(\theta_{\vec{p}\vec{p}'})|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})) \\
&= 2\pi N_{\text{St}} \int g(\mathcal{E}(\vec{p}')) d\mathcal{E}(\vec{p}') \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} |u(\theta_{\vec{p}\vec{p}'})|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})) \\
&= 2\pi N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) \int \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} |u(\theta_{\vec{p}\vec{p}'})|^2.
\end{aligned}$$

Wenn wir nun die z -Achse entlang \vec{p} wählen, ist $\theta_{\vec{p}\vec{p}'} = \theta_{\vec{p}'} =: \theta$ der Kugelkoordinaten-Azimutwinkel von \vec{p}' . Wir schreiben somit $d\Omega_{\vec{p}'} = \sin \theta_{\vec{p}'} d\theta_{\vec{p}'} d\varphi_{\vec{p}'}$. Das Integral über $\varphi_{\vec{p}'}$ liefert dann einfach 2π und wir erhalten

$$\frac{1}{\tau} = \pi N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) \int_0^\pi \sin \theta d\theta |u(\theta)|^2.$$

7.7 Transport-Relaxationszeit

Wie bereits für die „einfache“ Relaxationszeit nehmen wir an, dass das Stoßintegral für die Dichtefunktion im Gleichgewicht verschwindet, sodass $I[f] = I[\delta f]$. Wir nehmen diesmal jedoch *nicht* an, dass $\sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \delta f(\vec{p}')$ verschwindet und arbeiten somit mit dem Ausdruck

$$I[\delta f] = \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} (\delta f(\vec{p}') - \delta f(\vec{p}))$$

aus Abschnitt 7.2 für das Stoßintegral. Erneut benutzen wir

$$\begin{aligned}
W_{\vec{p}\vec{p}'} &= 2\pi |\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})), \\
|\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 &= N_{\text{St}} |\langle \vec{p}' | u(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 =: N_{\text{St}} |u(\theta_{\vec{p}\vec{p}'})|^2.
\end{aligned}$$

Für das Stoßintegral folgt somit nun

$$\begin{aligned}
I[\delta f] &= \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} (\delta f(\vec{p}') - \delta f(\vec{p})) = \sum_{\vec{p}'} 2\pi |\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})) (\delta f(\vec{p}') - \delta f(\vec{p})) \\
&= 2\pi N_{\text{St}} \int d^3\vec{p}' |\langle \vec{p}' | u | \vec{p} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})) (\delta f(\vec{p}') - \delta f(\vec{p})).
\end{aligned}$$

Wir machen nun den Ansatz¹

$$\delta f(\vec{p}) = -\vec{e}_{\vec{p}} \cdot \vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p})), \quad \vec{e}_{\vec{p}} := \vec{p}/|\vec{p}|,$$

wobei $\vec{a}(\mathcal{E})$ eine beliebige Funktion der Energie ist. Wir definieren unser Koordinatensystem nun so, dass $\vec{p} \parallel \hat{z}$, und definieren $\theta_{\vec{a}}$ als Winkel zwischen \vec{a} und \vec{p} sowie $\theta_{\vec{p}'}$ als Winkel zwischen \vec{p}' und \vec{p} . Wenn wir die δ -Funktion, die unter dem Integral steht, verwenden, können wir $\mathcal{E}(\vec{p}') = \mathcal{E}(\vec{p})$ schreiben und bekommen somit

$$\begin{aligned}
\delta f(\vec{p}') - \delta f(\vec{p}) &= -\vec{e}_{\vec{p}'} \cdot \vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}')) + \vec{e}_{\vec{p}} \cdot \vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p})) = \vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p})) \cdot (\vec{e}_{\vec{p}} - \vec{e}_{\vec{p}'}) \\
&= |\vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}))| (\vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}} - \vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}'}).
\end{aligned}$$

¹ In vielen Anwendungsfällen nimmt δf diese Form an. Beispielsweise werden wir in (>7.8) im Falle der Drude-Leitfähigkeit für ein externes elektrisches Feld \vec{E} die Relation $\delta f \sim \partial f_0 / \partial \mathcal{E} \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}$ herleiten. $\partial f_0 / \partial \mathcal{E}$ ist offensichtlich nur eine Funktion von $\mathcal{E}(\vec{p})$ und für eine isotrope Dispersionsrelation gilt

$$v_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}(\vec{p}) = \vec{e}_{\vec{p}} \frac{\partial \mathcal{E}(\vec{p})}{\partial p} \quad \Rightarrow \quad \delta f \sim \vec{e}_{\vec{p}} \cdot \vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial \mathcal{E}(\vec{p})}{\partial p} = \vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}))$$

Für die beiden Skalarprodukte finden wir

$$\vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}} = \cos \theta_{\vec{a}},$$

$$\begin{aligned} \vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}'} &= (\vec{e}_{\vec{a}})_i (\vec{e}_{\vec{p}'})_i \\ &= (\sin \theta_{\vec{a}} \cos \phi_{\vec{a}})(\sin \theta_{\vec{p}'} \cos \phi_{\vec{p}'}) + (\sin \theta_{\vec{a}} \sin \phi_{\vec{a}})(\sin \theta_{\vec{p}'} \sin \phi_{\vec{p}'}) + (\cos \theta_{\vec{a}})(\cos \theta_{\vec{p}'}) \\ &= \sin \theta_{\vec{a}} \sin \theta_{\vec{p}'} (\cos \phi_{\vec{a}} \cos \phi_{\vec{p}'} + \sin \phi_{\vec{a}} \sin \phi_{\vec{p}'}) + \cos \theta_{\vec{a}} \cos \theta_{\vec{p}'} \\ &= \sin \theta_{\vec{a}} \sin \theta_{\vec{p}'} \cos(\phi_{\vec{a}} - \phi_{\vec{p}'}) + \cos \theta_{\vec{a}} \cos \theta_{\vec{p}'}, \end{aligned}$$

wobei ausgenutzt wurde, dass $\theta_{\vec{a}}, \phi_{\vec{a}}$ und $\theta_{\vec{p}'}, \phi_{\vec{p}'}$ gerade die Polarkoordinatenwinkel von \vec{a} und \vec{p}' sind.

Wie in Abschnitt 1.4 gezeigt können wir nun wieder die Beziehung

$$d^3 \vec{p} = g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{4\pi}$$

nutzen und das Energieintegral mit der δ -Funktion auswerten. Anschließend setzen wir unsere trigonometrischen Funktionen für die Skalarprodukte der Einheitsvektoren ein. Das $\phi_{\vec{p}'}$ -Integral aus $d\Omega_{\vec{p}'}$ über $\cos(\phi_{\vec{a}} - \phi_{\vec{p}'})$ verschwindet und gibt bei den anderen Termen ein Faktor 2π . All dies geschieht in den folgenden Schritten:

$$\begin{aligned} I[\delta f] &= 2\pi N_{\text{St}} |\vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}))| \int g(\mathcal{E}(\vec{p}')) d\mathcal{E}(\vec{p}') \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} |\langle \vec{p}' | u | \vec{p} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})) (\vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}} - \vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}'}) \\ &= 2\pi N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) |\vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}))| \int \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} |\langle \vec{p}' | u | \vec{p} \rangle|^2 (\vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}} - \vec{e}_{\vec{a}} \cdot \vec{e}_{\vec{p}'}) \\ &= \frac{(2\pi)^2}{4\pi} N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) |\vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}))| \int_0^\pi \sin \theta_{\vec{p}'} d\theta_{\vec{p}'} |\langle \vec{p}' | u | \vec{p} \rangle|^2 (\cos \theta_{\vec{a}} - \cos \theta_{\vec{a}} \cos \theta_{\vec{p}'}) \\ &= \pi N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) \underbrace{|\vec{a}(\mathcal{E}(\vec{p}))| \cos \theta_{\vec{a}}}_{= \vec{a} \cdot \vec{e}_{\vec{p}} = -\delta f} \int_0^\pi d\theta_{\vec{p}'} \underbrace{|\langle \vec{p}' | u | \vec{p} \rangle|^2}_{=: |u(\theta_{\vec{p}'})|^2} \sin \theta_{\vec{p}'} (1 - \cos \theta_{\vec{p}'}) \\ &= -\delta f \cdot \pi N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) \int_0^\pi d\theta |u(\theta)|^2 \sin \theta (1 - \cos \theta). \end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir unseren Ansatz $\delta f = -\vec{a} \cdot \vec{e}_{\vec{p}}$ wieder identifiziert und den Integrationsparameter $\theta_{\vec{p}'} \rightarrow \theta$ umbenannt.

In Analogie zur Relaxationszeitnäherung definieren wir eine *Transport-Relaxationszeit* wie folgt:¹

$$I[\delta f] = -\frac{\delta f}{\tau} \quad \Rightarrow \quad \tau^{-1} := \pi N_{\text{St}} g(\mathcal{E}(\vec{p})) \int_0^\pi d\theta |u(\theta)|^2 \sin \theta (1 - \cos \theta).$$

7.8 Leitfähigkeitstensor

Setzt man

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}, \quad \vec{B} = 0, \quad \delta f = \delta f_0 e^{-i\omega t}, \quad \nabla_{\vec{r}} f = 0, \quad \partial_t f = \partial_t \delta f, \quad I[f] = -\delta f / \tau$$

¹ Anmerkungen zu einem Vergleich mit dem Shnirman-Skript: Das hier hergeleitete Resultat ist – abgesehen von der hiesigen Verwendung natürlicher Einheiten ($\hbar = 1$) – auf den ersten Blick identisch mit dem Resultat des Shnirman-Skripts. Allerdings haben wir die Zustandsdichte $g(\mathcal{E})$ *inklusive* Volumen definiert, also $g(\mathcal{E}) \sim V$, im Shnirman-Skript ist $g(\mathcal{E})$ jedoch *pro Volumen* definiert. Dafür haben wir die Bloch-Zustände im Matricelement $u(\theta) = \langle \vec{p}' | u(\vec{r}) | \vec{p} \rangle$ ebenso mit dem Normierungsfaktor $1/V$ definiert, wie im Matricelement $\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle$. Im Shnirman-Skript wird jedoch $\langle \vec{p}' | U(\vec{r}) | \vec{p} \rangle \rightarrow N_{\text{St}} \langle \vec{p}' | u(\vec{r}) | \vec{p} \rangle / V$ ersetzt, sodass die Bloch-Zustände im u -Matricelement anders normiert sind, als jene im U -Matricelement. Diese beiden V 's heben sich gerade auf, sodass das Ergebnis gleich aussieht.

in die Boltzmann-Gleichung ein, erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f &= -\frac{\delta f}{\tau} \\ \Leftrightarrow -i\omega \delta f_0 e^{-i\omega t} + q\vec{E}_0 e^{-i\omega t} \cdot \nabla_{\vec{p}} f &= -\frac{1}{\tau} \delta f_0 e^{-i\omega t} \\ \Leftrightarrow \delta f_0 &\approx \frac{q}{i\omega - \tau^{-1}} \vec{E}_0 \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0 = \frac{q}{i\omega - \tau^{-1}} \vec{E}_0 \cdot (\nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}(\vec{p})) \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} = \frac{q}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{E}_0 \cdot \vec{v}_{\vec{p}}. \end{aligned}$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass das externe Feld schwach sein soll und die entsprechende lineare Antwort darauf dann auch schwach ist; also sind $|\vec{E}_0|$ und δf_0 beide klein und es folgt

$$\vec{E}_0 f = \vec{E}_0 f_0 + \mathcal{O}(|\vec{E}_0| \delta f_0).$$

Man beachte zudem, dass f_0 das Gleichgewichts- f ist, das wir gemäß Abschnitt 7.2 als Fermi-Dirac-Verteilung annehmen. Die Stromdichte ist aus Abschnitt 7.1 bekannt:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{q}{V} \sum_{n,\sigma} \int d^3\vec{p} \vec{v}_{\vec{p}} f.$$

Im Gleichgewicht ist kein (netto-)Stromfluss zu erwarten. Wir nehmen daher an, dass nur der δf -Anteil von f zum Stromfluss beiträgt. Für einen Ansatz $\vec{j}(\vec{r}, t) = \vec{j}_0(\vec{r}) e^{-i\omega t}$ folgt somit

$$\vec{j}_0(\vec{r}, t) = \frac{q}{V} \sum_{n,\sigma} \int d^3\vec{p} \vec{v}_{\vec{p}} \delta f_0 \approx \frac{q^2}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{1}{V} \sum_{n,\sigma} \int d^3\vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_n} \vec{v}_{\vec{p}} (\vec{E}_0 \cdot \vec{v}_{\vec{p}}).$$

Definiert man einen Leitfähigkeitstensor σ_{ab} impliziert über

$$j_a = \sigma_{ab} E_b,$$

so kann man diesen an obiger Gleichung direkt ablesen:

$$\sigma_{ab} = \frac{q^2}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{1}{V} \sum_{n,\sigma} \int d^3\vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_n} v_{\vec{p}a} v_{\vec{p}b}.$$

7.9 Leitfähigkeitstensor unter Sommerfeld-Näherung

Im Fall $T = 0$ ist f_0 eine θ -Funktion und $\mu = E_F$ und daher kann man

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \approx -\delta(\mathcal{E} - \mu) = -\delta(\mathcal{E} - E_F)$$

nähern. Ferner nimmt man an, dass die Dispersionsrelation nur vom Betrag von \vec{p} abhängt, das heißt $\mathcal{E}(\vec{p}) = \mathcal{E}(|\vec{p}|)$. Somit können wir nun wie in Abschnitt 1.4 das Impulsintegral in ein Energieintegral umschreiben. Allerdings hängt der Integrand wegen den Geschwindigkeiten hier durchaus von den Winkeln ab, sodass wie $d\Omega_{\vec{q}}/4\pi$ nicht gleich 1 setzen dürfen:

$$d^3\vec{p} = g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \frac{d\Omega_p}{4\pi}.$$

Zudem nehmen wir an, dass uns die Summe über σ einfach einen Faktor 2 ergibt und wir nur ein Band betrachten und daher die Summe über n nicht mehr benötigen. Unter all diesen Annahmen folgt für den Leitfähigkeitstensor aus (>7.8)

$$\sigma_{ab} = -\frac{2q^2}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{1}{V} \int g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \frac{d\Omega_p}{4\pi} \delta(\mathcal{E} - E_F) v_{\vec{p}a} v_{\vec{p}b}.$$

Da die Dispersionsrelation isotrop ist, folgt für die Geschwindigkeit

$$\vec{v}_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}(p) = \frac{\partial \mathcal{E}(p)}{\partial p} \vec{e}_p,$$

wobei \vec{e}_p der Einheitsvektor in \vec{p} -Richtung ist. Das Winkelintegral reduziert sich dann auf

$$\int \frac{d\Omega_p}{4\pi} e_{pa} e_{pb} = \frac{1}{3} \delta_{ab}.$$

Nur die Diagonalkomponenten des Leitfähigkeitstensors bleiben übrig. Die folgt aus der Symmetrie oder durch explizites Nachrechnen: Setzt man etwa für $a = 1$, $b = 2$ den Kugelkoordinaten-Basisvektor ein, erhält man¹

$$\int \frac{d\Omega_p}{4\pi} e_{px} e_{py} = \int \frac{\sin \theta d\varphi d\theta}{4\pi} (\sin \theta \cos \varphi)(\sin \theta \sin \varphi) = 0.$$

Den Faktor $1/3$ erhält man zum Beispiel für das Element $a = 1, b = 1$ wie folgt:

$$\int \frac{d\Omega_p}{4\pi} e_{px} e_{px} = \int \frac{\sin \theta d\varphi d\theta}{4\pi} (\sin \theta \cos \varphi)^2 = \frac{1}{3}.$$

Setzt man dieses Resultat ein und wertet anschließend die δ -Funktion aus, die einem sagt, dass alle Größen am Fermi-Niveau zu nehmen sind, folgt

$$\sigma_{ab} = -\frac{2q^2}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{1}{V} \int g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \delta(\mathcal{E} - E_F) \frac{1}{3} \delta_{ab} \vec{v}_{\vec{p}}^2 = -\frac{2q^2}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{g(E_F) v_F^2}{V} \frac{1}{3} \delta_{ab}.$$

Für den Fall $\mathcal{E}_{\vec{p}} \sim \vec{p}^2$ folgt $g(\mathcal{E}_{\vec{p}}) = a\sqrt{\mathcal{E}_{\vec{p}}}$ mit einer Konstanten a . Somit ist die Teilchendichte gegeben durch

$$n = \frac{2}{V} \int_0^{E_F} d\mathcal{E} g(\mathcal{E}) = \frac{2a}{V} \int_0^{E_F} d\mathcal{E} \sqrt{\mathcal{E}} = \frac{4a}{3V} E_F^{3/2} = \frac{4}{3V} g(E_F) E_F.$$

Mit $E_F = m^* v_F^2/2$ folgt somit

$$\sigma_{ab} = -\frac{2q^2}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{g(E_F) 2E_F}{V} \frac{1}{3m^*} \delta_{ab} = -\frac{q^2}{i\omega - \tau^{-1}} n \frac{1}{m^*} \delta_{ab}.$$

Hätten wir die Relaxationszeit impulsabhängig, also $\tau(\mathcal{E}(\vec{p}))$ statt einfach τ gewählt, hätte sich kaum etwas geändert: Wir müssten nun im Endergebnis offensichtlich einfach $\tau \rightarrow \tau(E_F)$ ersetzen.

7.10 Elektro-Chemisches Potential

Setzt man die folgenden angenommen Relationen,

$$f = f_0 + \delta f, \quad f_0 = \frac{1}{e^{\beta(\vec{r})(\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu(\vec{r}))} + 1}, \quad I[f] = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial \delta f}{\partial t} = 0, \quad \vec{B} = 0$$

in die Boltzmann-Gleichung ein, erhält man

$$-\frac{\delta f}{\tau} = q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}}(f_0 + \delta f) + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}}(f_0 + \delta f) \approx q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0 + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_0.$$

Da sich die Temperatur nur langsam im Raum ändern soll, gehen wir davon aus, dass auch $\nabla_{\vec{r}} \delta f$ vernachlässigbar klein ist. Zudem ist das Feld schwach, sodass wir auch $\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} \delta f$ vernachlässigen können. Man betrachte nun die Gradienten von f_0 :

¹ Integrationsgrenzen sind selbstverständlich $\varphi \in [0, 2\pi]$ sowie $\theta \in [0, \pi]$.

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{p}} f_0 &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}(\vec{p}) = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}_{\vec{p}}, \\ \nabla_{\vec{r}} f_0 &= \nabla_{\vec{r}} \frac{1}{e^{X(\vec{r}, \vec{p})} + 1} = \frac{\partial f_0}{\partial X} \nabla_{\vec{r}} X = \frac{\partial f_0}{\beta \partial \mathcal{E}} ((\mathcal{E} - \mu) \nabla_{\vec{r}} \beta + \beta \nabla_{\vec{r}} (\mathcal{E} - \mu)) \\ &= \frac{\partial f_0}{\beta \partial \mathcal{E}} \left((\mathcal{E} - \mu) \frac{\partial \beta}{\partial T} \nabla_{\vec{r}} T - \beta \nabla_{\vec{r}} \mu \right) = kT \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left(-(\mathcal{E} - \mu) \frac{1}{kT^2} \nabla_{\vec{r}} T - \frac{1}{kT} \nabla_{\vec{r}} \mu \right) \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left(-\frac{\mathcal{E} - \mu}{T} \nabla_{\vec{r}} T - \nabla_{\vec{r}} \mu \right).\end{aligned}$$

Einsetzen in die Boltzmann-Gleichung liefert

$$\frac{\delta f}{\tau} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \left(-q \vec{E} + \frac{\mathcal{E} - \mu}{T} \nabla_{\vec{r}} T + \nabla_{\vec{r}} \mu \right) = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \left(e \vec{E}_{ec} + \frac{\mathcal{E} - \mu}{T} \nabla_{\vec{r}} T \right),$$

wobei die Elektronenladung $q = -e$ einsetzt und das *elektro-chemische Feld* und *Potential*

$$\vec{E}_{ec} := \vec{E} + \frac{1}{e} \nabla_{\vec{r}} \mu = -\nabla \varphi + \frac{1}{e} \nabla_{\vec{r}} \mu =: -\nabla \varphi_{ec}, \quad \varphi_{ec} = \varphi - \frac{1}{e} \mu$$

eingeführt wurde.

7.11 Matrixgleichung für elektrischen und Wärmestrom

Setzen wir δf aus (>7.10) in die Ströme ein, erhalten wir mit Indizes a, b und $q = -e < 0$

$$\begin{aligned}j_{E,a} &= -\frac{2e\tau}{V} \int d^3 \vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left(e \vec{E}_{ec,b} + \frac{\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu}{T} \nabla_{\vec{r},b} T \right) v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}, \\ j_{Q,a} &= \frac{2\tau}{V} \int d^3 \vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) \left(e \vec{E}_{ec,b} + \frac{\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu}{T} \nabla_{\vec{r},b} T \right) v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}.\end{aligned}$$

Somit folgt

$$\begin{aligned}K_{11,ab} &= -\frac{2e^2\tau}{V} \int d^3 \vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}, \\ K_{12,ab} &= -\frac{2e\tau}{V} \int d^3 \vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}, \\ K_{21,ab} &= \frac{2e\tau}{V} \int d^3 \vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b} = -K_{12,ab}, \\ K_{22,ab} &= \frac{2\tau}{V} \int d^3 \vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu)^2 v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}.\end{aligned}$$

7.12 Wiedemann-Franz-Gesetz

Wenn man nahe $T = 0$ die Sommerfeld-Näherung

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} = -\delta(\mathcal{E} - \mu) - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \delta''(\mathcal{E} - \mu) + \dots$$

für $K_{22,ab}$ verwendet, verschwindet die führende Ordnung, da $(\mathcal{E} - \mu)\delta(\mathcal{E} - \mu) = 0$ gilt. Die zweite Ordnung liefert

$$K_{22,ab} \approx -\frac{2\pi^2}{6V} (kT)^2 \tau \int d^3 \vec{p} \delta''(\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu)^2 v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}.$$

Mit Abschnitt 1.4 und der Annahme, dass die Geschwindigkeiten nur von der Richtung, nicht aber vom Betrag des Impulses bzw. nicht von der Energie abhängen, kann man das Energieintegral wie folgt zweimal partiell integrieren:

$$\begin{aligned} \int d\mathcal{E} g(\mathcal{E}) (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu)^2 \delta''(\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) &= -2 \int d\mathcal{E} G(\mathcal{E}) (\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) \delta'(\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) \\ &= 2 \int d\mathcal{E} g(\mathcal{E}) \delta(\mathcal{E}(\vec{p}) - \mu) = 2g(\mu). \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Zustandsdichte g einmal zusammen mit δ'' integriert und bei der zweiten partiellen Integration zusammen mit $\mathcal{E} - \mu$ abgeleitet. Somit folgt

$$K_{22,ab} \approx -\frac{2\pi^2}{3V} (kT)^2 \tau \underbrace{g(\mu)}_{\approx g(E_F)} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b},$$

wobei die Geschwindigkeiten wegen der δ -Funktion auch am Fermi-Niveau zu verstehen sind. Wie in (>7.9) gezeigt, kann man für eine isotrope Dispersionsrelation $\int d\Omega_p/4\pi v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b} = \delta_{ab} v_F^2/3$ verwenden:

$$K_{22,ab} \approx -\frac{2\pi^2}{9V} (kT)^2 \tau g(E_F) v_F^2 \delta_{ab}.$$

Definiert man die Wärmeleitfähigkeit κ als

$$\vec{j}_Q = -\kappa \nabla T \quad \Rightarrow \quad \kappa = -\frac{K_{22,aa}}{T} = \frac{2\pi^2}{9V} k^2 T \tau g(E_F) v_F^2$$

und vergleicht dies mit der elektrischen Drude-Leitfähigkeit für $\omega = 0$ aus Abschnitt 7.4,

$$\sigma = \sigma_{aa} = -\frac{2q^2}{3V} \frac{v_F^2 g(E_F)}{i\omega - \tau^{-1}} \rightarrow \frac{2q^2}{3V} v_F^2 g(E_F) \tau,$$

so folgt das Wiedemann-Franz-Gesetz (mit $q = -e$)

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2 k^2 T}{3e^2}.$$

7.13 Hall-Effekt – Form der Boltzmann-Gleichung

Man betrachte die Boltzmann-Gleichung für ein Magnetfeld \vec{B} und ein schwaches elektrisches Feld \vec{E} . Wie üblich schreiben wir das Stoßintegral als $I[f] = -\delta f/\tau$ sowie $f = f_0 + \delta f$, wobei f_0 die Fermi-Dirac-Verteilung ist. Die Boltzmann-Gleichung ist nun zunächst

$$\frac{\partial f}{\partial t} + q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f + q(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} f + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

Wie üblich vereinfachen wir die Boltzmann-Gleichung zunächst mit einer Reihe von Annahmen: Wir suchen ein stationäres Ergebnis, für das $\partial f/\partial t = 0$ gilt, sowie eine homogene Lösung mit $\nabla_{\vec{r}} f = 0$. Für ein kleines elektrisches Feld gilt zudem

$$\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f = \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} (f_0 + \delta f) \approx \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0.$$

Den Term mit dem Magnetfeld kann man schreiben als

$$(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0 = (\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \underbrace{\nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}}}_{=\vec{v}_{\vec{p}}} = 0,$$

da $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{a} = 0$. Setzt man dies alles ein, erhält man die Boltzmann-Gleichung in der Form

$$q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0 = -\frac{\delta f}{\tau_{\text{Tr}}} - q(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} \delta f.$$

$$= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \vec{v}_{\vec{p}}$$

7.14 Hall-Effekt – Ansatz

Wir wollen nun einen Ansatz für δf wählen. Wir betrachten dazu noch einmal den Abschnitt 7.4 zur Drude-Leitfähigkeit, die wir damals für ein oszillierendes elektrisches Feld berechnet haben. Hier ist unser Feld konstant, wir können also die Drude-Leitfähigkeit für den Fall $\omega = 0$ betrachten.

Dort, in (>7.8), haben wir aus folgender Boltzmann-Gleichung folgende Lösung hergeleitet:

$$q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f = -\frac{\delta f}{\tau} \quad \Rightarrow \quad \delta f = \delta f_0 e^{-i\omega t} = \frac{q}{i\omega - \tau^{-1}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{E}_0 \cdot \vec{v}_{\vec{p}} e^{-i\omega t} \stackrel{\omega=0}{=} -\tau q \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \vec{E}_0 \cdot \vec{v}_{\vec{p}}.$$

Dies entspricht genau unserem jetzigen Fall, nur, dass wir nun zusätzlich zum elektrischen Feld noch ein Magnetfeld haben. Wir wählen daher für δf nun den Ansatz

$$\delta f = -\tau q \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}$$

mit einem unbekanntem, zu bestimmenden, konstanten Vektor \vec{X} , der von dem externen elektrischen und Magnetfeld abhängen wird.

7.15 Hall-Effekt – Lösen der Boltzmann-Gleichung

Setzt man diesen Ansatz in unseren jetzige Boltzmann-Gleichung ein, erhält man in dem Magnetfeld-Term den Ausdruck

$$q(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} \delta f = -\tau q^2 (\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} (\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X})$$

$$= -\tau q^2 (\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \left((\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}) \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} + \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \nabla_{\vec{p}} (\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}) \right)$$

$$= -\tau q^2 (\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \left((\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}) \frac{\partial^2 f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}^2} \underbrace{\nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}}}_{=\vec{v}_{\vec{p}}} + \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \nabla_{\vec{p}} (\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}) \right)$$

$$= -\tau q^2 (\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \nabla_{\vec{p}} (\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}),$$

wobei der Term mit der zweiten Ableitung von f_0 wegen $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{a} = 0$ verschwunden ist. Wir nehmen nun einfachheitshalber die Dispersionsrelation $\mathcal{E}_{\vec{p}} = \vec{p}^2/2m^*$ an, sodass $\vec{v}_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}} = \vec{p}/m^*$. In diesem Fall gilt

$$\left(\nabla_{\vec{p}} (\vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X}) \right)_i = \nabla_{\vec{p}i} v_{\vec{p}j} X_j = \frac{1}{m^*} X_i.$$

Somit folgt nun für unsere Boltzmann-Gleichung von oben

$$q\vec{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \vec{v}_{\vec{p}} = -\frac{\delta f}{\tau} - q(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} \delta f$$

$$\Leftrightarrow q\vec{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \vec{v}_{\vec{p}} = q \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{X} + \frac{\tau q^2}{m^*} (\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{p}}} \vec{X}$$

$$\Leftrightarrow \vec{v}_p \cdot \vec{E} = \vec{v}_p \cdot \vec{X} + \frac{\tau q}{m^*} \underbrace{(\vec{v}_p \times \vec{B}) \cdot \vec{X}}_{=\vec{v}_p \cdot (\vec{B} \times \vec{X})}$$

$$\Leftrightarrow \vec{E} = \vec{X} + \tau q m^{*-1} (\vec{B} \times \vec{X})$$

$$\Leftrightarrow \vec{e} = \vec{x} - \tau \omega_c (\vec{b} \times \vec{x}).$$

Im letzten Schritt wurden die folgenden Beziehungen eingesetzt:

$$\vec{b} := \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|}, \quad \vec{e} := \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|}, \quad \vec{x} := \frac{\vec{X}}{|\vec{E}|}, \quad q = -e, \quad \omega_c = \frac{1}{l_B^2 m_c} = \frac{eB}{m^*}.$$

Wir schreiben nun unseren gesuchten Vektor \vec{x} in einer (nicht notwendigerweise orthogonalen) Basis $\{\vec{e}, \vec{b}, \vec{e} \times \vec{b}\}$:

$$\vec{x} = \alpha \vec{e} + \beta \vec{b} + \gamma \vec{e} \times \vec{b}.$$

Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} \vec{e} &= \alpha \vec{e} + \beta \vec{b} + \gamma \vec{e} \times \vec{b} - \tau \omega_c (\vec{b} \times (\alpha \vec{e} + \beta \vec{b} + \gamma \vec{e} \times \vec{b})) \\ &= \alpha \vec{e} + \beta \vec{b} + \gamma \vec{e} \times \vec{b} - \tau \omega_c (\alpha \vec{b} \times \vec{e} + \gamma \vec{b} \times (\vec{e} \times \vec{b})) \\ &= \alpha \vec{e} + \beta \vec{b} + \gamma \vec{e} \times \vec{b} - \tau \omega_c (\alpha \vec{b} \times \vec{e} + \gamma (\vec{e} - \vec{b}(\vec{b} \cdot \vec{e}))), \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die BAC-CAB-Regel verwendet wurde. Wir können nun die Koeffizienten der drei Basenvektoren vergleichen:

$$\text{Koeffizienten von } \vec{e}: \quad 1 = \alpha - \tau \omega_c \gamma,$$

$$\text{Koeffizienten von } \vec{b}: \quad 0 = \beta + \tau \omega_c \gamma (\vec{b} \cdot \vec{e}),$$

$$\text{Koeffizienten von } \vec{e} \times \vec{b}: \quad 0 = \gamma + \tau \omega_c \alpha.$$

Es lässt sich leicht nachrechnen, dass diese drei Gleichungen für die drei Variablen α, β, γ die Lösungen

$$\alpha = \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad \beta = \frac{\omega_c^2 \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \vec{e} \cdot \vec{b}, \quad \gamma = -\frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}$$

liefern. Die Lösung für den Vektor \vec{X} ist also

$$\vec{X} = |\vec{E}| \vec{x} = |\vec{E}| (\alpha \vec{e} + \beta \vec{b} + \gamma \vec{e} \times \vec{b}) = \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} (\vec{E} + \omega_c^2 \tau^2 (\vec{E} \cdot \vec{b}) \vec{b} - \omega_c \tau \vec{E} \times \vec{b}).$$

7.16 Hall-Effekt – Leitfähigkeitstensor

Im Abschnitt 7.4 haben wir den Drude-Leitfähigkeitstensor hergeleitet. Für ein konstantes elektrisches Feld, das heißt $\omega = 0$, liest er sich

$$\sigma_D = \frac{nq^2\tau}{m^*}, \quad \vec{j} = \sigma_D \vec{E}.$$

Wenn wir nun in der Herleitung der Drude-Leitfähigkeit in (>7.8) überall das \vec{E} durch ein \vec{X} ersetzen, finden wir entsprechend, dass

$$\vec{j} = \sigma_D \vec{X} \quad \text{mit} \quad \sigma_D = \frac{nq^2\tau}{m^*}$$

gelten muss. Für den im Falle des Hall-Effekt gültigen Leitfähigkeitstensors stellen wir die Gleichung

$$j_a = \sigma_{ab} E_b = \sigma_D X_a = \frac{\sigma_D}{1 + \omega_C^2 \tau^2} (E_a + \omega_C^2 \tau^2 E_b b_b b_a - \omega_C \tau^2 \epsilon_{abc} E_b b_c)$$

$$= \frac{\sigma_D}{1 + \omega_C^2 \tau^2} (\delta_{ab} + \omega_C^2 \tau^2 b_b b_a - \omega_C \tau \epsilon_{abc} b_c) E_b$$

auf und schließen daraus direkt auf die Komponenten von σ_{ab} :

$$\sigma_{ab} = \frac{\sigma_D}{1 + \omega_C^2 \tau^2} (\delta_{ab} + \omega_C^2 \tau^2 b_a b_b - \omega_C \tau \epsilon_{abc} b_c),$$

$$\sigma = \frac{\sigma_D}{1 + \omega_C^2 \tau^2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \omega_C^2 \tau^2 \begin{pmatrix} b_x^2 & b_x b_y & b_x b_z \\ b_y b_x & b_y^2 & b_y b_z \\ b_z b_x & b_z b_y & b_z^2 \end{pmatrix} - \omega_C \tau \begin{pmatrix} 0 & b_z & -b_y \\ -b_z & 0 & b_x \\ b_y & -b_x & 0 \end{pmatrix} \right).$$

7.17 Hall-Effekt – Hall-Koeffizient

Für $\vec{b} = \hat{z}$ folgt

$$\sigma = \frac{\sigma_D}{1 + \omega_C^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_C \tau & 0 \\ \omega_C \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_C^2 \tau^2 \end{pmatrix}$$

und somit für den Tensor des spezifischen Widerstands

$$\rho = \sigma^{-1} = \rho_D \begin{pmatrix} 1 & \omega_C \tau & 0 \\ -\omega_C \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho_D := \frac{1}{\sigma_D}, \quad \text{bzw.} \quad \rho_{ab} = \rho_D (\delta_{ab} + \omega_C \tau \epsilon_{ab3}).$$

Somit folgt

$$E_a = \rho_{ab} j_b = \rho_D (\vec{j} + \omega_C \tau \vec{j} \times \hat{z})_a.$$

Somit findet man für den sogenannten *Hall-Koeffizienten*

$$R := \frac{E_{\perp}}{B j} = \frac{\rho_D \omega_C \tau}{B} \approx \frac{1}{n e'}$$

wobei E_{\perp} die Feldkomponente senkrecht zum Magnetfeld und Strom ist.

8 ZWEITE QUANTISIERUNG

8.1 Bosonen-Zustände

Ein Ortsraum-Zustand $\phi_a(\vec{r})$ werde durch eine Menge von Quantenzahlen a beschrieben. Dann ist¹

$$\phi_a(r_1) \cdot \phi_b(r_2)$$

ein 2-Teilchen-Zustand, wobei das Teilchen am Ort r_1 die Quantenzahl a hat und das Teilchen am Ort r_2 die Quantenzahl b . Dies ist jedoch kein valider Zustand, dass wir nicht sagen können, welches Teilchen welche Quantenzahlen hat. Man weiß immer nur, wie viele Teilchen welche Quantenzahlen haben, aber nicht welche. Die Zustände müssen daher symmetrisiert sein, also

$$\phi_a(r_1) \cdot \phi_b(r_2) + \phi_b(r_1) \cdot \phi_a(r_2).$$

Somit müssen alle derartigen sinnvollen Permutationen aufsummiert werden. Nicht sinnvoll sind Permutationen von zwei Teilchen im selben Zustand, denn

$$\phi_a(r_1) \cdot \phi_a(r_2) = \phi_a(r_2) \cdot \phi_a(r_1).$$

Derartige nicht-sinnvolle Permutationen gibt es $N_1! N_2! \dots$ Stück, wenn N_a Teilchen im a -ten Zustand sitzen. Die Gesamtzahl aller *sinnvollen* Permutationen beträgt daher

$$\mathcal{N}_{\text{sinnvoll}} = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots}$$

Ein beliebiger N -Teilchen-Zustand ergibt sich dann aus der Summe aller sinnvollen Permutationen \mathcal{P} und einem Normierungsfaktor $1/\sqrt{\mathcal{N}_{\text{sinnvoll}}}$:

$$|N_1 N_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}}} \sum_{\mathcal{P}\{a_1, \dots, a_N\}} |\phi_{a_1}(r_1) \dots \phi_{a_N}(r_N)\rangle.$$

Eine Menge von Quantenzahlen a_i legt einen bestimmten Zustand fest; statt eine solche Menge von Quantenzahlen zu benutzen, um Zustände zu charakterisieren, können wir die Zustände einfach durchnummerieren. a_i steht dann nicht mehr für eine Menge von Quantenzahlen, sondern für die Zustandsnummer. Für $a_i = 1$ beschreibt i -te Wellenfunktion den ersten Zustand mit N_1 Teilchen. Die Summe über $\mathcal{P}\{a_1, \dots, a_N\}$, im Folgenden kurz \mathcal{P} , geht dann über alle Permutationen von Zustandsnummern, sodass die 1 genau N_1 mal vorkommt usw. Für einen 3-Teilchen-Zustand mit $|N_1, N_2\rangle = |2, 1\rangle$ gilt zum Beispiel

$$\mathcal{P}\{a_1, a_2, a_3\} = \left\{ \begin{matrix} 1, 1, 2 \\ a_1 a_2 a_3 \end{matrix}, \begin{matrix} 1, 2, 1 \\ a_1 a_2 a_3 \end{matrix}, \begin{matrix} 2, 1, 1 \\ a_1 a_2 a_3 \end{matrix} \right\}.$$

Die Zahl, die die a_i annehmen können, ist also die Zustandsnummer. Wie oft eine solche Zahl vorkommt, etwa die 2, ist die Anzahl an Teilchen im zweiten Zustand N_2 . Innerhalb eines Summanden ist die Summe über die a_i also immer dieselbe, nämlich

$$\sum_{i=1}^N a_i = N_1 + 2N_2 + \dots = \sum_{n=1}^{\text{Anzahl Zustände}} n N_n.$$

8.2 Matricelement von bosonischen 1-Teilchen-Operatoren I

Man betrachte folgendes Matricelement:

¹ Die Vektorpfeile der Argumente werden in den folgenden Abschnitten weggelassen.

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{i=1}^N \sum_{\tilde{\mathcal{P}}, \mathcal{P}} \left\langle \phi_{\tilde{a}_i}(r_1) \dots \phi_{\tilde{a}_N}(r_N) \left| f_{r_i}^{(1)} \right| \phi_{a_1}(r_1) \dots \phi_{a_N}(r_N) \right\rangle.$$

Nun kann $f_{r_i}^{(1)}$ nur auf ein einziges Teilchen wirken, nämlich nur den einen der 1-Teilchen-Zustände $\phi_{a_i}(r_i)$ verändern. Wenn man das Bracket als Integral umschreiben würde, würde man für jede der Koordinaten r_k ein (Volumen-)Integral erhalten. Steht kein Operator mit dem richtigen Index $f_{r_k}^{(1)}$ dazwischen, der auf die entsprechenden Zustände wirkt, separieren all diese Integrale. Wir bekommen also $N - 1$ separierte Matrixelemente ohne Operator und das eine i -te Matrixelement mit Operator:

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{i=1}^N \sum_{\tilde{\mathcal{P}}, \mathcal{P}} \left\langle \phi_{\tilde{a}_i}(r_i) \left| f_{r_i}^{(1)} \right| \phi_{a_i}(r_i) \right\rangle \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \underbrace{\left\langle \phi_{\tilde{a}_k}(r_k) \left| \phi_{a_k}(r_k) \right\rangle}_{=\delta_{\tilde{a}_k a_k}}.$$

Für nicht verschwindende Matrixelement werden also alle \tilde{a}_k durch das entsprechende a_k festgelegt, für alle $k \neq i$. Da die Summe über *alle* \tilde{a}_k aber immer dieselbe sein muss, wie wir in (>8.1) überlegt haben, muss \tilde{a}_i damit automatisch gleich a_i sein – eine andere Möglichkeit ist nicht in der Summe über die Permutationen $\tilde{\mathcal{P}}$ enthalten. Was somit übrig bleibt, ist

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{i=1}^N \left\langle \phi_{a_i}(r_i) \left| f_{r_i}^{(1)} \right| \phi_{a_i}(r_i) \right\rangle.$$

Man betrachte nun die Summe über i für eine feste Permutation \mathcal{P} . Egal welche Permutation gewählt wird: Es wird immer N_a -mal ein a_i mit dem Wert a geben, denn in jeder Permutation gibt es N_a Teilchen im a -ten Zustand. Nur die Reihenfolge ihres Auftauchens in der Summe über i hängt von der gewählten Permutation ab. Da die Summe kommutativ ist, spielt die Reihenfolge aber keine Rolle. Die Summe über i ist daher unabhängig von jener über die Permutationen und kann davor gezogen werden:

$$\begin{aligned} \langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{i=1}^N \left\langle \phi_{a_i}(r_i) \left| f_{r_i}^{(1)} \right| \phi_{a_i}(r_i) \right\rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{a=1}^{\text{Anzahl Zustände}} N_a \left\langle \phi_a(r) \left| f_r^{(1)} \right| \phi_a(r) \right\rangle = \sum_{a=1}^{\text{Anzahl Zustände}} N_a \left\langle \phi_a(r) \left| f_r^{(1)} \right| \phi_a(r) \right\rangle \underbrace{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{\mathcal{P}} 1}_{=1} \\ &= \sum_{a=1}^{\text{Anzahl Zustände}} N_a \langle a | f^{(1)} | a \rangle. \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde das Matrixelement noch in ein raumunabhängiges Matrixelement umgeschrieben.

8.3 Matrixelement von bosonischen 1-Teilchen-Operatoren II

Außer dem Matrixelement, dass in (>8.2) berechnet wurde, gibt es nur noch ein weiteres, das nicht verschwindet, nämlich

$$\langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle.$$

Dieses Matrixelement beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen aus dem Zustand $|b\rangle$ in den Zustand $|a\rangle$ wechselt, sodass sich N_b um 1 verringert und N_a um 1 erhöht. Zur Berechnung setzen wir wieder unsere Formel für den N -Teilchen-Zustand ein:

$$\begin{aligned} & \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots (N_a - 1)! \dots (N_b - 1)! \dots}{N!} \sqrt{N_a N_b} \sum_{i=1}^N \sum_{\tilde{\mathcal{P}}, \mathcal{P}} \langle \phi_{\tilde{a}_1}(r_1) \dots \phi_{\tilde{a}_N}(r_N) | f_{r_i}^{(1)} | \phi_{a_1}(r_1) \dots \phi_{a_N}(r_N) \rangle. \end{aligned}$$

Die Faktoren $N_a!$ und $N_b!$ kommen nur in je einem der beiden N -Teilchen-Zuständen vor; der andere enthält nur die Faktoren $(N_a - 1)!$ bzw. $(N_b - 1)!$. Daher gibt es unter der Wurzel nur einen einzigen Faktor $N_a N_b$; jeden anderen Faktor gibt es hingegen doppelt – je einmal aus jedem der beiden N -Teilchen-Zustände –, sodass bei ihnen die Wurzel verschwindet.

Im Bra stehen nun dieselben 1-Teilchen-Zustände, wie im Ket, außer dass im Bra ein zusätzlicher Zustand $|a\rangle$ vorkommt und im Ket ein zusätzlicher Zustand $|b\rangle$. Damit das Matrixelement nicht verschwindet, muss dieser zusätzliche Zustand $|b\rangle$ in einen Zustand $|a\rangle$ umgewandelt werden; dies kann nur durch den Operator $f_{r_i}^{(1)}$ geschehen; der Operator muss also zwischen $|b\rangle$ und $\langle a|$ stehen und nicht zwischen anderen Zuständen, damit das Matrixelement nicht verschwindet. Also gilt

$$\begin{aligned} & \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots (N_a - 1)! \dots (N_b - 1)! \dots}{N!} \sqrt{N_a N_b} \sum_{i=1}^N \sum_{\tilde{\mathcal{P}}, \mathcal{P}} \langle \phi_a(r_i) | f_{r_i}^{(1)} | \phi_b(r_i) \rangle \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \underbrace{\langle \phi_{\tilde{a}_k}(r_k) | \phi_{a_k}(r_k) \rangle}_{=\delta_{\tilde{a}_k a_k}} \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots (N_a - 1)! \dots (N_b - 1)! \dots}{N!} \sqrt{N_a N_b} \sum_{i=1}^N \sum_{\mathcal{P} \setminus i} \langle \phi_a(r_i) | f_{r_i}^{(1)} | \phi_b(r_i) \rangle. \end{aligned}$$

Mit den Kronecker-Deltas verschwindet die Summe über $\tilde{\mathcal{P}}$, nicht aber jene über \mathcal{P} . Allerdings ist nun das i -te Teilchen von der Permutation ausgenommen, da dieses sicherlich im Zustand $|b\rangle$ bzw. $\langle a|$ sein muss; wir permutieren mit der Summe über $\mathcal{P} \setminus i$ also nur alle übrigen $N - 1$ Teilchen. Das verblieben Matrixelement hängt von dieser Permutation sicherlich nicht mehr ab, da das i -te Teilchen, das im Matrixelement betrachtet wird, nicht mit permutiert wird. Somit kann man das Matrixelement vor die Summe über $\mathcal{P} \setminus i$ ziehen:

$$\begin{aligned} & \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ &= \frac{\sqrt{N_a N_b}}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_a(r_i) | f_{r_i}^{(1)} | \phi_b(r_i) \rangle \underbrace{\frac{N_1! N_2! \dots (N_a - 1)! \dots (N_b - 1)! \dots}{(N - 1)!} \sum_{\mathcal{P} \setminus i} 1}_{=1}. \end{aligned}$$

Das Matrixelement ist nun ein Integral über r_i und ist damit nicht mehr abhängig von der Integrationsvariable oder von i , sondern für jeden der N Summanden gleich. Die Summe kürzt also das $1/N$ und man erhält in raumunabhängiger Schreibweise

$$\langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle = \sqrt{N_a N_b} \langle a | f^{(1)} | b \rangle.$$

8.4 Erzeugungsoperator aus Definition des Vernichtungsoperators

Aus der Definition des Vernichtungsoperators

$$\hat{a}_b | \dots N_b \dots \rangle := \sqrt{N_b} | \dots N_b - 1 \dots \rangle$$

folgt direkt jene für die Erzeugungsoperator durch hermitesche Konjugation:

$$\begin{aligned} \langle \dots N_b \dots | \hat{a}_b^\dagger &:= \sqrt{N_b} \langle \dots N_b - 1 \dots | & \Leftrightarrow & \langle \dots N_b \dots | \hat{a}_b^\dagger | \dots N_b - 1 \dots \rangle := \sqrt{N_b} \\ \Leftrightarrow \hat{a}_b^\dagger | \dots N_b - 1 \dots \rangle &= \sqrt{N_b} | \dots N_b \dots \rangle & \Leftrightarrow & \hat{a}_b^\dagger | \dots N_b \dots \rangle = \sqrt{N_b + 1} | \dots N_b + 1 \dots \rangle. \end{aligned}$$

8.5 1-Teilchen-Operator mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Wenn wir den 1-Teilchen-Operator als

$$F^{(1)} = \sum_{a,b} \langle a|f^{(1)}|b\rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b$$

schreiben, bekommen wir direkt die in (>8.2) und (>8.3) berechneten Matrixelemente

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \sum_{a,b} \langle a|f^{(1)}|b\rangle \underbrace{\langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b | N_1 N_2 \dots \rangle}_{=N_a \delta_{ab}} = \sum_a N_a \langle a|f^{(1)}|b\rangle$$

und

$$\begin{aligned} & \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ &= \sum_{c,d} \langle c|f^{(1)}|d\rangle \underbrace{\langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | \hat{a}_c^\dagger \hat{a}_d | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle}_{=\sqrt{N_a N_b} \delta_{ca} \delta_{db}} = \sqrt{N_a N_b} \langle a|f^{(1)}|b\rangle. \end{aligned}$$

8.6 Matrixelement von bosonischen 2-Teilchen-Operatoren I

Im Abschnitt (>8.2) haben wir folgendes Matrixelement für einen 1-Teilchen-Operator berechnet; analog dazu führen wir diese Rechnung nun mit einem 2-Teilchen-Operator durch:

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(2)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \sum_{\tilde{\mathcal{P}}} \langle \phi_{\tilde{a}_i}(r_1) \dots \phi_{\tilde{a}_n}(r_N) | f_{r_i r_j}^{(2)} | \phi_{a_1}(r_1) \dots \phi_{a_n}(r_N) \rangle,$$

wobei wir $\Sigma_{i < j}^N = \Sigma_{i,j,i \neq j}^N / 2$ verwendet haben. Nun kann $f_{r_i r_j}^{(2)}$ nur auf das i -te und j -te Teilchen wirken; aus allen anderen Matrixelementen, in denen nicht die 1-Teilchen-Zustände $\phi_a(r_i)$ oder $\phi_a(r_j)$ vorkommen, kann man den Operator daher herausziehen; diese Matrixelemente separieren dann, denn es sind voneinander unabhängige Integrale:

$$\begin{aligned} & \langle N_1 N_2 \dots | F^{(2)} | N_1 N_2 \dots \rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \sum_{\tilde{\mathcal{P}}} \langle \phi_{\tilde{a}_i}(r_i) \phi_{\tilde{a}_j}(r_j) | f_{r_i r_j}^{(2)} | \phi_{a_i}(r_i) \phi_{a_j}(r_j) \rangle \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i,j}}^N \underbrace{\langle \phi_{\tilde{a}_k}(r_k) | \phi_{a_k}(r_k) \rangle}_{=\delta_{\tilde{a}_k a_k}}. \end{aligned}$$

Für nicht verschwindende Matrixelement werden also alle \tilde{a}_k durch das entsprechende a_k festgelegt, für alle $k \neq i$. Da die Summe nur über Permutationen der \tilde{a}_k (für alle k) geht, bleibt für \tilde{a}_i nur a_i oder a_j übrig und entsprechend $\tilde{a}_j = a_j$ oder $\tilde{a}_j = a_i$ – eine andere Möglichkeit ist nicht in der Summe über die Permutationen $\tilde{\mathcal{P}}$ enthalten. Die zwei übrigbleibenden Möglichkeiten liefern uns zwei Summanden:

$$\begin{aligned} & \langle N_1 N_2 \dots | F^{(2)} | N_1 N_2 \dots \rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{\tilde{\mathcal{P}}} \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \left(\langle \phi_{a_i}(r_i) \phi_{a_j}(r_j) | f_{r_i r_j}^{(2)} | \phi_{a_i}(r_i) \phi_{a_j}(r_j) \rangle \right. \\ & \quad \left. + \langle \phi_{a_j}(r_i) \phi_{a_i}(r_j) | f_{r_i r_j}^{(2)} | \phi_{a_i}(r_i) \phi_{a_j}(r_j) \rangle \right). \end{aligned}$$

Man betrachte nun eine beliebige aber feste Permutation \mathcal{P} . Die Summe über i liefert dann N_a -mal einen Zustand $\phi_a(r_i)$ und die Summe über j liefert für $N_a - 1$ -mal den Zustand $\phi_a(r_j)$ und N_b -mal den Zustand $\phi_b(r_j)$ für alle $b \neq a$.¹ Also gilt

$$\begin{aligned} & \langle N_1 N_2 \dots | F^{(2)} | N_1 N_2 \dots \rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^{\text{Anzahl Zustände}} (N_a N_b (1 - \delta_{ab}) + N_a (N_a - 1) \delta_{ab}) (\langle ab | f^{(2)} | ab \rangle + \langle ba | f^{(2)} | ab \rangle) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^{\text{Anzahl Zustände}} (N_a N_b (1 - \delta_{ab}) + N_a (N_a - 1) \delta_{ab}) (\langle ab | f^{(2)} | ab \rangle + \langle ba | f^{(2)} | ab \rangle), \end{aligned}$$

wobei wir gleichzeitig die Matrixelement raumunabhängig geschrieben haben. Die Summe über die Zustände a, b hängt nun nicht mehr von der Permutation ab; daher kann man verwenden, dass die Summe über die Permutationen nichts weiter als einen Faktor liefert, der der Anzahl an Permutationen entspricht und den Bruch mit den Fakultäten wegekürzt.

8.7 2-Teilchen-Operator mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Wenn wir den 2-Teilchen-Operator schreiben als

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | f^{(2)} | cd \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_d \hat{a}_c,$$

bekommen wir dasselbe Resultat für folgendes Matrixelement wie in (>8.6):

$$\begin{aligned} \langle N_1 N_2 \dots | F^{(2)} | N_1 N_2 \dots \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | f^{(2)} | cd \rangle \underbrace{\langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_c \hat{a}_d | N_1 N_2 \dots \rangle}_{\sim \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ab} \langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b | N_1 N_2 \dots \rangle (\langle ab | f^{(2)} | ab \rangle + \langle ab | f^{(2)} | ba \rangle). \end{aligned}$$

Für Summanden, in denen $a \neq b$ gilt, folgt

$$\langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_b | N_1 N_2 \dots \rangle = \langle N_1 N_2 \dots | \hat{N}_a \hat{N}_b | N_1 N_2 \dots \rangle = N_a N_b.$$

Für Summanden, in denen $a = b$ gilt folgt

$$\begin{aligned} \langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_a | N_1 N_2 \dots \rangle &= \langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger \hat{N}_a \hat{a}_a | N_1 N_2 \dots \rangle \\ &= \langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger (\hat{a}_a \hat{N}_a + [\hat{N}_a, \hat{a}_a]) | N_1 N_2 \dots \rangle = \langle N_1 N_2 \dots | \hat{a}_a^\dagger (\hat{a}_a \hat{N}_a - \hat{a}_a) | N_1 N_2 \dots \rangle \\ &= \langle N_1 N_2 \dots | \hat{N}_a^2 - \hat{N}_a | N_1 N_2 \dots \rangle = N_a (N_a - 1). \end{aligned}$$

Insgesamt folgt also

$$\begin{aligned} & \langle N_1 N_2 \dots | F^{(2)} | N_1 N_2 \dots \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ab} (N_a N_b (1 - \delta_{ab}) + N_a (N_a - 1) \delta_{ab}) (\langle ab | f^{(2)} | ab \rangle + \langle ab | f^{(2)} | ba \rangle). \end{aligned}$$

Für das hintere Matrixelement können wir nun die Summationsindices $a \leftrightarrow b$ umbenennen, dann stimmt dieses Ergebnis mit jenem aus (>8.6) überein.

¹ Beispiel: Man betrachte beispielhaft die Permutation $\{1 1 1 2 2\}$ in der Notation von (>8.1), wo das erste Teilchen im Zustand 1 ist und das vierte im Zustand 2 usw. Die Summe über i ist eine Summe über die Teilchen; somit wird ϕ_{a_i} genau $N_1 = 3$ -mal ϕ_1 sein und $N_2 = 2$ -mal ϕ_2 . Wenn $\phi_{a_i} = \phi_1$ ist, kann ϕ_{a_j} noch $N_1 - 1 = 2$ -mal ϕ_1 sein und $N_2 = 2$ -mal ϕ_2 .

8.8 Kommutatorrelationen für Feldoperatoren

Mit der Definition der Feld-Operatoren und der Vollständigkeit der 1-Teilchen-Zustände im Ortsraum

$$\sum_a \phi_a^*(\vec{r}) \phi_a(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

folgt direkt

$$[\psi(\vec{r}), \psi^\dagger(\vec{r}')] = \sum_{a,b} \phi_a^*(\vec{r}) \phi_b(\vec{r}') \underbrace{[\hat{a}_a, \hat{a}_b^\dagger]}_{=\delta_{ab}} = \sum_a \phi_a^*(\vec{r}) \phi_a(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

$$[\psi^{1,\dagger}(\vec{r}), \psi^{1,\dagger}(\vec{r}')] = \sum_{a,b} \phi_a^{1,*}(\vec{r}) \phi_b^{1,*}(\vec{r}') \underbrace{[\hat{a}_a^{1,\dagger}, \hat{a}_b^{1,\dagger}]}_{=0} = 0,$$

da $[\hat{a}_a, \hat{a}_b] = [\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_b^\dagger] = 0$.

8.9 1-Teilchen-Operator mit Feldoperatoren

Aus (>8.5) kennen wir die Schreibweise von $F^{(1)}$ mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Daraus folgt

$$\begin{aligned} F^{(1)} &= \sum_{a,b} \langle a | f^{(1)} | b \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b = \sum_{a,b} \int d^3r \phi_a^*(\vec{r}) f^{(1)} \phi_b(\vec{r}) \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b \\ &= \int d^3r \underbrace{\sum_a \phi_a^*(\vec{r}) \hat{a}_a^\dagger}_{=\psi^\dagger(\vec{r})} f^{(1)} \underbrace{\sum_b \phi_b(\vec{r}) \hat{a}_b}_{=\psi(\vec{r})} = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) f^{(1)} \psi(\vec{r}). \end{aligned}$$

8.10 Hamilton-Operator für Streuungen

Man betrachte die übliche Form des Hamilton-Operators

$$H = \sum_{i=1}^N H_i^{(1)} + \sum_{i<j}^N U^{(2)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad H_i^{(1)} = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + U^{(1)}(\vec{r}_i)$$

für freie, aber wechselwirkende Teilchen, also $U^{(1)} = 0$ und $U^{(2)} \neq 0$. Gemäß unseren Formeln aus Abschnitt 8.1 können wir diesen Hamilton-Operator mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren schreiben als

$$H = \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \langle \vec{p}_2 | H^{(1)} | \vec{p}_1 \rangle \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{p}_4} \langle \vec{p}_3 \vec{p}_4 | U^{(2)} | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle \hat{a}_{\vec{p}_3}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_4}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2}.$$

Dabei verwenden wir nun einfach die Impulse als Quantenzahlen bzw. Zustandsnummern; wir haben schließlich freie Teilchen. Freie Teilchen, also ebene Wellen, haben die 1-Teilchen-Zustände (im Ortsraum)

$$|\vec{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}.$$

Damit können wir nun die Matrixelemente berechnen (zum Vorfaktor V des Kronecker-Deltas siehe Abschnitt 1.5):

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}_2 | H^{(1)} | \vec{p}_1 \rangle &= -\frac{1}{2m} \langle \vec{p}_2 | \nabla^2 | \vec{p}_1 \rangle = -\frac{1}{2mV} \int d^3r e^{-i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}} \nabla^2 e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}} = \frac{\vec{p}_1^2}{2mV} \underbrace{\int d^3r e^{-i(\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \cdot \vec{r}}}_{=V \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_1}} \\ &= \frac{\vec{p}_1^2}{2m} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_1}.\end{aligned}$$

Somit gilt

$$\sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \langle \vec{p}_2 | H^{(1)} | \vec{p}_1 \rangle \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} = \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \frac{\vec{p}_1^2}{2m} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} = \sum_{\vec{p}} \frac{\vec{p}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}.$$

Das andere Matrixelement ist ein wenig komplizierter:

$$\langle \vec{p}_3 \vec{p}_4 | U^{(2)} | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle = \frac{1}{V^2} \int d^3r_1 d^3r_2 e^{-i\vec{p}_3 \cdot \vec{r}_1} e^{-i\vec{p}_4 \cdot \vec{r}_2} U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}_2}.$$

Wir können nun Relativ- und Schwerpunktskoordinaten einführen:

$$\vec{R} := \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}, \quad \vec{r} := \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \Rightarrow \quad \vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{r}.$$

Man beachte, dass die Jacobi-Determinante dieser Transformation 1 ist, sodass $d^3r_1 d^3r_2 = d^3R d^3r$ gilt. Setzt man nun diese Ausdrücke für \vec{r}_1 und \vec{r}_2 ein, erhält ein Integral über R und eines über r , die sich auseinanderziehen lassen. Das R -Integral lautet

$$\int d^3R e^{-i\vec{p}_3 \cdot \vec{R}} e^{-i\vec{p}_4 \cdot \vec{R}} e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{R}} e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{R}} = \int d^3R e^{-i(\vec{p}_3 + \vec{p}_4 - \vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot \vec{R}} = V \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{p}_3 + \vec{p}_4}.$$

Das r -Integral lautet

$$\begin{aligned}\int d^3r e^{-i\vec{p}_3 \cdot \vec{r}/2} e^{i\vec{p}_4 \cdot \vec{r}/2} U(\vec{r}) e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}/2} e^{-i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}/2} &= \int d^3r e^{-i\frac{\vec{p}_3 - \vec{p}_4 - \vec{p}_1 + \vec{p}_2}{2} \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) \\ &= V \tilde{U}((\vec{p}_3 - \vec{p}_4 - \vec{p}_1 + \vec{p}_2)/2),\end{aligned}$$

wobei $\tilde{U}(\vec{p})$ die Fouriertransformierte von $U(\vec{r})$ ist (siehe Abschnitt 1.5). Somit folgt

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{p}_4} \langle \vec{p}_3 \vec{p}_4 | U^{(2)} | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle \hat{a}_{\vec{p}_3}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_4}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2} \\ = \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{p}_4} \hat{a}_{\vec{p}_3}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_4}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2} \tilde{U}((\vec{p}_3 - \vec{p}_4 - \vec{p}_1 + \vec{p}_2)/2) \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{p}_3 + \vec{p}_4}.\end{aligned}$$

Das Kronecker-Delta hebt eine der vier Impulssummen auf – es wird also nur über drei unabhängige Impulse summiert. Wir führen den *Impulsübertrag* \vec{q} ein mit

$$\vec{q} := \vec{p}_3 - \vec{p}_1 = \vec{p}_2 - \vec{p}_4,$$

wobei die Gleichheit von $\vec{p}_3 - \vec{p}_1$ und $\vec{p}_2 - \vec{p}_4$ aus dem Kronecker-Delta folgt:

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_3 + \vec{p}_4 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{p}_3 - \vec{p}_1 = \vec{p}_2 - \vec{p}_4.$$

Wenn wir $\vec{p}_4 = \vec{p}_2 - \vec{q}$ einsetzen, erhalten wir

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{p}_4} \langle \vec{p}_3 \vec{p}_4 | U^{(2)} | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle \hat{a}_{\vec{p}_3}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_4}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2} \\ = \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{q}} \hat{a}_{\vec{p}_3}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2 - \vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2} \tilde{U}((\vec{p}_3 - \vec{p}_2 + \vec{q} - \vec{p}_1 + \vec{p}_2)/2) \underbrace{\delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{p}_3 + \vec{p}_2 - \vec{q}}}_{= \delta_{\vec{p}_3, \vec{p}_1 + \vec{q}}} \\ = \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}} \hat{a}_{\vec{p}_1 + \vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2 - \vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2} \tilde{U}(\vec{q}).\end{aligned}$$

Insgesamt ist der Hamilton-Operator nun also

$$H = \sum_{\vec{p}} \frac{\vec{p}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}} \tilde{U}(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{p}_1 + \vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2 - \vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2}.$$

8.11 Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bei Fermionen

Wir wissen, dass (für $N_a = N_b = 1$)

$$\begin{aligned} & \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ &= \langle a | f^{(1)} | b \rangle \cdot (-1)^{\sum_{k=a+1}^b N_k} \stackrel{!}{=} \sum_{cd} \langle c | f^{(1)} | d \rangle \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | \hat{a}_c^\dagger \hat{a}_d | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle. \end{aligned}$$

Dies legt nahe, dass wir die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit folgenden Vorfaktoren definieren sollten:

$$\hat{a}_a^\dagger | \dots N_a \dots \rangle := (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} | \dots N_a + 1 \dots \rangle \quad (\text{für } N_a = 0),$$

$$\hat{a}_a | \dots N_a \dots \rangle := (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} | \dots N_a - 1 \dots \rangle \quad (\text{für } N_a = 1).$$

Man beachte, dass für $N_a \neq 0$ die erste Zeile wegen des Pauli-Prinzips verschwindet, ebenso wie die zweite Zeile für $N_a \neq 1$. Somit bekommen wir nämlich den korrekten Vorfaktor:

$$\begin{aligned} & \sum_{cd} \langle c | f^{(1)} | d \rangle \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | \hat{a}_c^\dagger \hat{a}_d | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ &= \sum_{cd} \langle c | f^{(1)} | d \rangle \delta_{ac} \delta_{bd} \underbrace{(-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} (-1)^{\sum_{k=1}^{b-1} N_k}}_{=(-1)^{\sum_{k=a}^b N_k}} = \langle a | f^{(1)} | b \rangle \cdot (-1)^{\sum_{k=a+1}^b N_k}. \end{aligned}$$

8.12 Antikommutatorrelationen bei Fermionen

Betrachten wir mit $N_a = N_b = 1$ folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} \hat{a}_b \hat{a}_a | \dots N_b \dots N_a \dots \rangle &= (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} \cdot \hat{a}_b | \dots N_b \dots N_a - 1 \dots \rangle \\ &= (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} (-1)^{\sum_{k=1}^{b-1} N'_k} \cdot | \dots N_b - 1 \dots N_a - 1 \dots \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_a \hat{a}_b | \dots N_b \dots N_a \dots \rangle &= (-1)^{\sum_{k=1}^{b-1} N_k} \cdot \hat{a}_a | \dots N_b - 1 \dots N_a \dots \rangle \\ &= (-1)^{\sum_{k=1}^{b-1} N_k} (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N''_k} \cdot | \dots N_b - 1 \dots N_a - 1 \dots \rangle. \end{aligned}$$

Nun gilt $N'_a = N_a - 1 = 0$ und $N''_b = N_b - 1 = 0$. Im oberen Fall, bei N'_a , ändert dies jedoch nichts, da $a > b$ in der Summe von $k = 1$ bis $k = b - 1$ nicht vorkommt. Im unteren Fall, bei N''_b , fehlt hingegen ein Faktor -1 , denn b kommt in der Summe von $k = 1$ bis $k = a - 1$ vor, N''_b ist aber null. Also gilt

$$\hat{a}_b \hat{a}_a | \dots N_b \dots N_a \dots \rangle = -\hat{a}_a \hat{a}_b | \dots N_b \dots N_a \dots \rangle \quad \Rightarrow \quad \{\hat{a}_a, \hat{a}_b\} = 0 \quad \Rightarrow \quad \{\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_b^\dagger\} = 0.$$

Mit genau derselben Begründung folgt für $N_a = N_b = 1$ und $a \neq b$

$$\hat{a}_b \hat{a}_a^\dagger | \dots N_b \dots N_a - 1 \dots \rangle = -\hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b | \dots N_b \dots N_a \dots \rangle \quad \Rightarrow \quad \{\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_b\} = 0, \quad \text{für } a \neq b.$$

Hingegen gilt

$$\begin{aligned} \hat{a}_a \hat{a}_a^\dagger | \dots N_a - 1 \dots \rangle &= | \dots N_a - 1 \dots \rangle, \quad (1 - \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_a) | \dots N_a - 1 \dots \rangle = | \dots N_a - 1 \dots \rangle \\ \Rightarrow \quad \{\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_a\} &= 1. \end{aligned}$$

9 WECHSELWIRKUNGEN

9.1 1-Teilchen-Korrelationsfunktion für freie Fermionen

Die 1-Teilchen-Korrelationsfunktion sei definiert als

$$g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) := \frac{2}{n} \langle \varphi_0 | \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}_2) \psi_\sigma(\vec{r}_1) | \varphi_0 \rangle.$$

Wir wollen die Korrelationsfunktion nun für freie Fermionen berechnen: In diesem Fall ist $|\varphi_0\rangle$ der N -Teilchen-Grundzustand freier Elektronen. Genauso wie für Bosonen im Abschnitt 8.1 können wir uns nun auch für Fermionen dieselben Feldoperatoren

$$\psi_\sigma(\vec{r}) := \sum_a \phi_a(\vec{r}) a_{a\sigma}, \quad \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) := \sum_a \phi_a^*(\vec{r}) a_{a\sigma}^\dagger$$

definieren, wobei wir die Feldoperatoren spinabhängig definieren und nur über die anderen Quantenzahlen a summieren. Da wir freie Fermionen betrachten, ist es sinnvoll, die Zustände nicht durch allgemeine Quantenzahlen a , sondern direkt durch Impulse \vec{p} zu charakterisieren. Außerdem können wir für freie Fermionen ebene Wellen $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}/\sqrt{V}$ einsetzen. Somit erhalten wir für die Korrelationsfunktion (mit $\vec{r} := \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ und $x := p_F r$)

$$\begin{aligned} g_\sigma(\vec{r}) &= \frac{2}{nV} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} e^{-i\vec{p}_2\cdot\vec{r}_2} e^{i\vec{p}_1\cdot\vec{r}_1} \underbrace{\langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_2\sigma}^\dagger a_{\vec{p}_1\sigma} | \varphi_0 \rangle}_{= \frac{1}{2} N_{\vec{p}_1} \delta_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \text{ für } |\vec{p}_i| \leq p_F, \text{ sonst } 0}} = \frac{1}{nV} \sum_{\vec{p}_1 \text{ für } |\vec{p}_1| \leq p_F} \underbrace{N_{\vec{p}_1}}_{=2} e^{-i\vec{p}_1\cdot\vec{r}} \\ &= \frac{2}{n} \int_0^{p_F} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} = \frac{2}{n} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{p_F} p^2 \sin \theta dp d\theta e^{ipr \cos \theta} = \frac{2 \sin p_F r - p_F r \cos p_F r}{n \cdot 2\pi^2 r^3} \\ &= \frac{2 \sin p_F r - p_F r \cos p_F r}{n \cdot 2\pi^2 x^3 / p_F^3} = 3 \frac{\sin x - x \cos x}{x^3}. \end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt $p_F^3 = 3\pi^2 n$ eingesetzt. Man beachte dabei, dass das Matrixelement für einen bestimmten Spin σ definiert ist, wir $N_{\vec{p}}$ jedoch als Teilchen mit Impuls \vec{p} definieren wollen – unabhängig vom Spin. Daher gilt im Grundzustand für $|\vec{p}| < p_F$, dass $N_{\vec{p}} = 2$ ist. Da das Matrixelement aber wie gesagt nur pro Spin definiert ist, liefert es nur *ein* Teilchen mit Impuls \vec{p} ; daher haben wir $N_{\vec{p}_1}/2$ mit $N_{\vec{p}_1} = 2$ geschrieben.

Bei der Definition der 1-Teilchen-Korrelationsfunktion haben wir den Vorfaktor $n/2$ vor dem Matrixelement so gewählt, dass $g_\sigma(0) = 1$ gilt, wie man sich mithilfe von l'Hospital überzeugen kann:

$$g_\sigma(0) = 3 \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{d^3}{dx^3} (\sin x - x \cos x)}{\frac{d^3}{dx^3} x^3} = 3 \lim_{x \rightarrow 0} \frac{2 \cos x - x \sin x}{6} = 1.$$

9.2 2-Teilchen-Korrelationsfunktion für freie Fermionen

Die 2-Teilchen-Korrelationsfunktion sei definiert als

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) := \frac{4}{n^2} \langle \varphi_0 | \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) | \varphi_0 \rangle.$$

Wie in (>9.1) wollen wir nun diese Korrelationsfunktion für freie Fermionen berechnen. Wir setzen dazu dieselben Formel für die Feldoperatoren wie dort ein:

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \frac{4}{n^2 V^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{p}_4} e^{i(\vec{p}_4 - \vec{p}_1)\cdot\vec{r}_1} e^{i(\vec{p}_3 - \vec{p}_2)\cdot\vec{r}_2} \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma_1}^\dagger a_{\vec{p}_2 \sigma_2}^\dagger a_{\vec{p}_3 \sigma_2} a_{\vec{p}_4 \sigma_1} | \varphi_0 \rangle.$$

Betrachten wir das Matrixelement genauer: Für $\sigma_1 \neq \sigma_2$ gilt unter Verwendung der Antikommutationsrelationen aus Abschnitt 8.3

$$\begin{aligned} \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma_1}^\dagger a_{\vec{p}_2 \sigma_2}^\dagger a_{\vec{p}_3 \sigma_2} a_{\vec{p}_4 \sigma_1} | \varphi_0 \rangle &= - \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma_1}^\dagger a_{\vec{p}_2 \sigma_2}^\dagger a_{\vec{p}_4 \sigma_1} a_{\vec{p}_3 \sigma_2} | \varphi_0 \rangle \\ &= \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma_1}^\dagger a_{\vec{p}_4 \sigma_1} a_{\vec{p}_2 \sigma_2}^\dagger a_{\vec{p}_3 \sigma_2} | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{4} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} \delta_{\vec{p}_1 \vec{p}_4} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_3}. \end{aligned}$$

Der Faktor $\frac{1}{4}$ kommt dadurch zustande, dass wir $N_{\vec{p}}$ als Anzahl Teilchen mit Impuls \vec{p} bezeichnen. Dies sind in unserem System für $|\vec{p}| < p_F$ immer genau 2, je eins mit Spin-up und Spin-down. Da hier nicht über die Spins summiert wird, erzeugt uns der Teilchenzahloperator $a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger a_{\vec{p}, \sigma}$ aber nur ein Teilchen mit Impuls \vec{p} für einen der beiden möglichen Spins; daher müssen wir – wie auch bereits in 9.1) – $N_{\vec{p}}/2$ statt $N_{\vec{p}}$ schreiben.

Für $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ gilt hingegen

$$\langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma}^\dagger a_{\vec{p}_2 \sigma}^\dagger a_{\vec{p}_3 \sigma} a_{\vec{p}_4 \sigma} | \varphi_0 \rangle = \begin{cases} - \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma}^\dagger a_{\vec{p}_3 \sigma} a_{\vec{p}_2 \sigma}^\dagger a_{\vec{p}_4 \sigma} | \varphi_0 \rangle = -\frac{1}{4} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} \delta_{\vec{p}_1 \vec{p}_3} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_4} \\ \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}_1 \sigma}^\dagger a_{\vec{p}_4 \sigma} a_{\vec{p}_2 \sigma}^\dagger a_{\vec{p}_3 \sigma} | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{4} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} \delta_{\vec{p}_1 \vec{p}_4} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_3} \end{cases}.$$

Entweder muss also $\vec{p}_1 = \vec{p}_3$ und $\vec{p}_2 = \vec{p}_4$ sein, oder $\vec{p}_1 = \vec{p}_4$ und $\vec{p}_2 = \vec{p}_3$. Da wir über die Impulse summieren, müssen wir beide Beiträge berücksichtigen.

Zusätzlich verschwinden alle diese Matrixelemente natürlich, falls einer der Impulse größer als der Fermi-Impuls ist, da Zustände mit solchen Impulsen in $|\varphi_0\rangle$ nicht enthalten sind. Dass die folgenden Summen nur über Impulse mit $|\vec{p}| \leq p_F$ gehen, sei impliziert.

Somit folgt für $\sigma_1 \neq \sigma_2$

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \frac{4}{4n^2V^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} = \frac{1}{n^2V^2} \sum_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_1} \sum_{\vec{p}_2} N_{\vec{p}_2} = \frac{N^2}{n^2V^2} = 1$$

und für $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$

$$\begin{aligned} g_{\sigma \sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) &= \frac{4}{4n^2V^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{p}_4} e^{i(\vec{p}_4 - \vec{p}_1) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\vec{p}_3 - \vec{p}_2) \cdot \vec{r}_2} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} (\delta_{\vec{p}_1 \vec{p}_4} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_3} - \delta_{\vec{p}_1 \vec{p}_3} \delta_{\vec{p}_2 \vec{p}_4}) \\ &= \frac{1}{n^2V^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} (1 - e^{i(\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot \vec{r}_2}) \\ &= \frac{N^2}{n^2V^2} - \frac{1}{n^2V^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} e^{i\vec{p}_1 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} e^{-i\vec{p}_2 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} = 1 - |g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2, \end{aligned}$$

wobei die letzte Umformung gültig ist, da wir aus (>9.1) wissen, dass¹

$$\begin{aligned} g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) &= \frac{1}{nV} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} \\ \Rightarrow |g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2 &= \frac{1}{n^2V^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} e^{i\vec{p}_1 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} e^{-i\vec{p}_2 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}. \end{aligned}$$

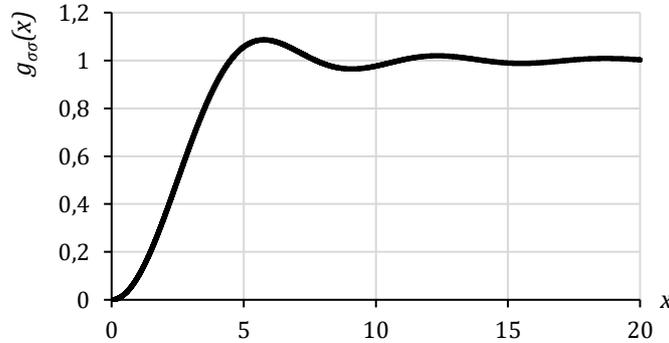
Insgesamt ergibt sich also

¹ Wie gesagt ist bei sämtlichen Summen hier die obere Grenze $|\vec{p}| \leq p_F$ impliziert.

$$g_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{für } \sigma_1 \neq \sigma_2 \\ 1 - |g_\sigma(\vec{r})|^2, & \text{für } \sigma_1 = \sigma_2 =: \sigma \end{cases}$$

9.3 Analyse der 2-Teilchen-Korrelationsfunktion

Plottet man die Funktion $g_{\sigma\sigma}(\vec{r}) = 1 - |g_\sigma(\vec{r})|^2$ mit dem $g_\sigma(\vec{r})$, das wir in (>9.1) berechnet haben, erhält man mit $x := p_F|\vec{r}|$ den folgenden Graphen:



Es ist also sehr unwahrscheinlich, dass sich zwei Fermionen sehr nahekommen. Die Reichweite dieser „Pauli-Wechselwirkung“ liegt bei einem festen $x = x_{\text{Pauli}} = p_F r_{\text{Pauli}}$, geht also mit $r_{\text{Pauli}} \sim p_F^{-1}$. Wir definieren uns einen solchen *Fermi-Abstand* mit

$$r_F := \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{p_F}$$

Setzt man hier den Fermi-Impuls für ein freies Fermi-Gas $p_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ mit Teilchendichte n ein und stellt nach V/N um, erhält man

$$\frac{V}{N} = \frac{4}{3} \pi r_F^3$$

Der komische Vorfaktor $(9\pi/4)^{1/3}$ sorgt also dafür, dass eine Kugel mit Radius r_F genau dem Volumen pro Teilchen entspricht. Zuletzt definieren wir den dimensionslosen Parameter r_S als Verhältnis von r_F zum Bohrschen Radius:

$$r_S := \frac{r_F}{a_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{a_0 p_F}$$

r_S ist ein Maß für die relative Stärke der Pauli-Abstoßung und der elektromagnetischen Wechselwirkung.

9.4 Hamilton-Operator des wechselwirkenden Fermi-Gases

Wie im Abschnitt 8.2 schreiben wir einen allgemeinen Hamilton-Operator als

$$H = \sum_{i=1}^N H_i^{(1)} + \sum_{i<j}^N U^{(2)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad H_i^{(1)} = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U^{(1)}(\vec{r}_i),$$

wobei $\hat{p}_i = -i\nabla_i$ der Impulsoperator ist, dessen Ableitung auf die Koordinaten des i -ten Teilchens wirkt. Schreibt man nun die 1- und 2-Teilchen-Operatoren mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren um, so wie wir es allgemein im Abschnitt 8.3 getan haben, folgt

$$H = \sum_{\sigma, ab} \langle a | H^{(1)} | b \rangle a_{a\sigma}^\dagger a_{b\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ abcd}} \langle ab | U^{(2)} | cd \rangle a_{a\sigma_1}^\dagger a_{b\sigma_2}^\dagger a_{d\sigma_2} a_{c\sigma_1}$$

Zusätzlich haben wir hier nun noch den Spin beachtet; $a_{a,\sigma}$ vernichtet ein Teilchen im Zustand a mit Spin σ . Diesen Hamilton-Operator können wir nun analog zu (>8.9) durch die fermionischen Feldoperatoren aus (>9.1) ausdrücken:

$$\begin{aligned} \sum_{ab} \langle a|H^{(1)}|b\rangle a_{a\sigma}^\dagger a_{b\sigma} &= \int d^3r \sum_{ab} \phi_a(\vec{r}) H^{(1)} \phi_b(\vec{r}) a_{a\sigma}^\dagger a_{b\sigma} = \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) H^{(1)} \psi_\sigma(\vec{r}), \\ \sum_{abcd} \langle ab|U^{(2)}|cd\rangle a_{a\sigma_1}^\dagger a_{b\sigma_2}^\dagger a_{d\sigma_2} a_{c\sigma_1} &= \int d^3r_1 d^3r_2 \phi_a(\vec{r}_1) \phi_b(\vec{r}_2) U^{(2)} \phi_c(\vec{r}_1) \phi_d(\vec{r}_2) a_{a\sigma_1}^\dagger a_{b\sigma_2}^\dagger a_{d\sigma_2} a_{c\sigma_1} \\ &= \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) U^{(2)} \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1). \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich also

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) H^{(1)} \psi_\sigma(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1). \end{aligned}$$

9.5 Erwartungswert der potentiellen Energie

Der Hamilton-Operator der potentiellen Energie ist in der Gel-Modell-Näherung $U^{(1)} = -n_1 U_0$

$$H_{\text{pot}} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) U^{(1)} \psi_\sigma(\vec{r}) = -n_1 U_0 \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) \psi_\sigma(\vec{r}).$$

Für den Erwartungswert mit freien Fermi-Gas-Zuständen folgt somit

$$E_{\text{pot}} = \langle \varphi_0 | H_{\text{pot}} | \varphi_0 \rangle = -n_1 U_0 \sum_{\sigma} \int d^3r \underbrace{\langle \varphi_0 | \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) \psi_\sigma(\vec{r}) | \varphi_0 \rangle}_{=\frac{n}{2} g_\sigma(0)}.$$

Hier taucht die Korrelationsfunktion g_σ aus Abschnitt 9.1 auf, und zwar an der Stelle $\vec{r} - \vec{r} = 0$, für die wir ganz am Ende von (>9.1) $g_\sigma(0) = 1$ gefunden haben. Somit folgt

$$E_{\text{pot}} = \langle \varphi_0 | H_{\text{pot}} | \varphi_0 \rangle = -\frac{nn_1 U_0}{2} \sum_{\sigma} \underbrace{\int d^3r}_{=V} = -nn_1 U_0 V = -n_1 U_0 N.$$

9.6 Erwartungswert der kinetischen Energie

Der Hamilton-Operator der kinetischen Energie ist

$$H_{\text{kin}} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi_\sigma(\vec{r}) = -\frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) \nabla^2 \psi_\sigma(\vec{r}).$$

Für den Erwartungswert mit freien Fermi-Gas-Zuständen folgt somit

$$E_{\text{kin}} = \langle \varphi_0 | H_{\text{kin}} | \varphi_0 \rangle = -\frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \langle \varphi_0 | \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) \nabla^2 \psi_\sigma(\vec{r}) | \varphi_0 \rangle.$$

Wir setzen nun die Definitionen der Feldoperatoren aus (>9.4) ein, und zwar in der freien Näherung mit $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}/\sqrt{V}$ (erneut charakterisieren wir unsere Zustände anstelle allgemeiner Quantenzahlen durch Impulse \vec{p}):¹

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= -\frac{1}{2mV} \sum_{\sigma\vec{p}\vec{p}'} \int d^3r e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} \nabla^2 e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}'\sigma}^\dagger a_{\vec{p}\sigma} | \varphi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2mV} \sum_{\sigma\vec{p}\vec{p}'} \vec{p}^2 \int d^3r e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}'\sigma}^\dagger a_{\vec{p}\sigma} | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{2m} \sum_{\sigma,\vec{p},\vec{p}'} \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \vec{p}^2 \langle \varphi_0 | a_{\vec{p}'\sigma}^\dagger a_{\vec{p}\sigma} | \varphi_0 \rangle \\ &= \sum_{\sigma\vec{p}} \frac{\vec{p}^2}{2m} \underbrace{\langle \varphi_0 | a_{\vec{p}\sigma}^\dagger a_{\vec{p}\sigma} | \varphi_0 \rangle}_{=1 \text{ für } |\vec{p}| < p_F, \text{ sonst } 0} = \sum_{\sigma, |\vec{p}| < p_F} \frac{\vec{p}^2}{2m} = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \int_0^{p_F} d^3\vec{p} \frac{\vec{p}^2}{2m}. \end{aligned}$$

Freie Fermionen haben die Dispersionsrelation $\mathcal{E} = p^2/2m$ und somit die Zustandsdichte (pro Spin)

$$g(\mathcal{E}) = \frac{V(2m)^{3/2}}{(4\pi)^2} \sqrt{\mathcal{E}} = \underbrace{\gamma}_{=: \gamma} \sqrt{\mathcal{E}}.$$

Man beachte, dass $d^3\vec{p} := d^3p V/(2\pi)^3$ und $V/(2\pi)^3$ gerade die Zustandsdichte im \vec{p} -Raum ist. Somit können wir das Impuls-Integral in ein Energie-Integral umschreiben als

$$E_{\text{kin}} = 2 \int_0^{p_F} d^3\vec{p} \frac{\vec{p}^2}{2m} = 2 \int_0^{E_F} d\mathcal{E} g(\mathcal{E}) \mathcal{E} = 2\gamma \int_0^{E_F} d\mathcal{E} \mathcal{E}^{3/2} = 2\gamma \cdot \frac{2}{5} E_F^{5/2} = \frac{4}{5} g(E_F) E_F^2 = \frac{3}{5} N E_F.$$

Das letzte Gleichheitszeichen ist gültig, da man die Anzahl an Teilchen wie folgt schreiben kann:

$$N = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \int_0^{E_F} d\mathcal{E} g(\mathcal{E}) = 2\gamma \int_0^{E_F} d\mathcal{E} \mathcal{E}^{1/2} = 2\gamma \cdot \frac{2}{3} E_F^{3/2} = \frac{4}{3} g(E_F) E_F.$$

9.7 Erwartungswert der Wechselwirkungsenergie

Der Hamilton-Operator der Wechselwirkungsenergie ist

$$H_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1).$$

Für den Erwartungswert mit freien Fermi-Gas-Zuständen folgt somit

$$E_{\text{WW}} = \langle \varphi_0 | H_{\text{WW}} | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \underbrace{\langle \varphi_0 | \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) | \varphi_0 \rangle}_{=\frac{n^2}{4} g_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}.$$

Dabei haben wir verwendet, dass $U^{(2)}$ nur eine Funktion von \vec{r}_1, \vec{r}_2 , aber kein Operator, den man nicht aus dem Matrixelement herausziehen dürfte. Hier taucht die 2-Teilchen-Korrelationsfunktion $g_{\sigma_1\sigma_2}$ aus Abschnitt 9.1 auf; in (>9.29.1) haben wir sie berechnet zu

$$g_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{für } \sigma_1 \neq \sigma_2 \\ 1 - |g_\sigma(\vec{r})|^2, & \text{für } \sigma_1 = \sigma_2 =: \sigma \end{cases}$$

Die Spinsumme über $g_{\sigma_1\sigma_2}$ liefert somit

$$\sum_{\sigma_1\sigma_2} g_{\sigma_1\sigma_2} = \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \sigma_1 \neq \sigma_2}} 1 + \sum_{\sigma} (1 - |g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2) = \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ =4}} 1 - \sum_{\sigma} |g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2.$$

¹ Hier benutzen wir wieder $\int d^3r e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} = V\delta_{\vec{p},\vec{p}'}$, siehe Abschnitt 1.5.

Somit haben wir für unsere Wechselwirkungsenergie

$$\begin{aligned} E_{\text{WW}} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \frac{n^2}{4} g_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \frac{n^2}{4} \left(4 - \sum_{\sigma} |g_{\sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \left(n^2 - \frac{n^2}{4} \sum_{\sigma} |g_{\sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2 \right). \end{aligned}$$

Diese Wechselwirkung unterteilt man nun in einen *Hartree*- und einen *Fock*-Beitrag:

$$E_{\text{WW}} = E_{\text{Ha}} + E_{\text{Fo}},$$

$$E_{\text{Ha}} := \frac{n^2}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1),$$

$$E_{\text{Fo}} := -\frac{n^2}{2 \cdot 4} \sum_{\sigma} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) |g_{\sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2.$$

9.8 Berechnung des Fock-Beitrags

In (>9.1) haben wir die Korrelationsfunktion g_{σ} für freie Fermionen berechnet,

$$g_{\sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = 3 \frac{\sin x - x \cos x}{x^3},$$

wobei $x := p_{\text{F}} |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ definiert wurde. Dieses Resultat setzen wir nun in die Formel für die Fock-Energie aus (>9.7) ein. Da g_{σ} hier offensichtlich nicht von σ abhängt, können wir die Spinsumme gleich zu Beginn auswerten:

$$\begin{aligned} E_{\text{Fo}} &= -\frac{n^2}{2 \cdot 4} \sum_{\sigma} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) |g_{\sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2 = -\frac{n^2 V}{4} \int d^3 r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2) |g_{\sigma}(\vec{r}_2)|^2 \\ &= -\frac{9Vn^2}{4} \int \frac{d^3 x}{p_{\text{F}}^3} \underbrace{U^{(2)}(x/p_{\text{F}})}_{=p_{\text{F}} e^2/x} \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^6} \\ &= -\frac{9Vn^2 e^2}{4 p_{\text{F}}^2} \underbrace{\int_0^{\infty} 4\pi dx x^2 \frac{1}{x} \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^6}}_{=\pi} = -\frac{3}{4\pi} \underbrace{Vn}_{=N} \underbrace{3\pi^2 n}_{=p_{\text{F}}^3} \frac{e^2}{p_{\text{F}}^2} = -\frac{3e^2}{4\pi} N p_{\text{F}}. \end{aligned}$$

9.9 Analyse der Energie

Wie wir im Abschnitt 9.2 diskutiert haben, tragen nur die kinetische Energie und der Fock-Beitrag zur relevanten Energie bei. Setzt man $p_{\text{F}} = (9\pi/4)^{1/3} a_0^{-1} r_{\text{S}}^{-1}$ aus (>9.3) ein, lässt sich diese Energie nun pro Teilchen schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{kin}} + E_{\text{Fo}}}{N} &= \frac{3}{5} E_{\text{F}} - \frac{3e^2}{4\pi} p_{\text{F}} = \frac{3 p_{\text{F}}^2}{5 2m} - \frac{3e^2}{4\pi} p_{\text{F}} = \frac{3}{10m} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{a_0^2 r_{\text{S}}^2} - \frac{3e^2}{4\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{a_0 r_{\text{S}}} \\ &= \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \left(\frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_{\text{S}}^2} - \frac{3}{2\pi} \frac{1}{r_{\text{S}}} \right) \frac{e^2}{2a_0} \approx \left(\frac{2,210}{r_{\text{S}}^2} - \frac{0,916}{r_{\text{S}}} \right) \frac{e^2}{2a_0} \end{aligned}$$

mit Bohrschem Radius $a_0 = 1/me^2$ schreiben. Diese Funktion hat ein Minimum bei

$$r_{\text{S}} = \frac{4\pi}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \approx 4,823.$$

Man erinnere sich aus (>9.3) an die Definition von $r_s = r_F/a_0$, wobei $4\pi r_F^3/3 = V/N$. Somit ist r_s experimentell bestimmbar. Da sich Systeme im Zustand minimaler Energie zu befinden pflegen, erwarten wir einen experimentellen Wert von $r_s \approx 4,823$. Diesen Wert findet man tatsächlich ungefähr für Alkalimetalle. Man beachte, dass diese Übereinstimmung von Experiment und unserer Theorie zeigt, dass die Abschätzung der Energie durch $\langle \varphi_0 | H | \varphi_0 \rangle$ für manche Materialien durchaus gerechtfertigt ist, obwohl $|\varphi_0\rangle$ kein Eigenzustand von H ist. Allerdings gibt es auch Materialien mit sehr viel Größeren r_s ; zu nennen wäre der Wigner-Kristall.

9.10 Energien der Quasiteilchen nahe der Fermi-Oberfläche

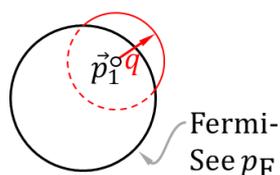
Für $\mathcal{E}_{1,2} \approx E_F$ folgt

$$\xi_1 := E_F - \mathcal{E}_1 = \frac{1}{2m}(p_F^2 - p_1^2) = \frac{1}{2m}(p_F - p_1) \underbrace{(p_F + p_1)}_{\approx 2p_F = 2mv_F} \approx v_F(p_F - p_1),$$

$$\xi_2 := \mathcal{E}_2 - E_F = \frac{1}{2m}(p_2^2 - p_F^2) = \frac{1}{2m}(p_2 - p_F) \underbrace{(p_2 + p_F)}_{\approx 2p_F = 2mv_F} = v_F(p_2 - p_F).$$

9.11 Mögliche Energieüberträge in Abhängigkeit vom Impulsübertrag

Man betrachte nun ein Elektron, dass aus einem Zustand im Fermi-See mit Energie \mathcal{E}_1 und Impuls \vec{p}_1 durch einen Impulsübertrag $\vec{q} := \vec{p}_2 - \vec{p}_1$ über die Oberfläche des Fermi-Sees hinaus auf einen Zustand mit Energie \mathcal{E}_2 und Impuls \vec{p}_2 gehoben wird. Im \vec{p} -Raum freier Elektronen befinden sich die durch den Impulsübertrag \vec{q} erreichbaren Zustände auf dem Teil eines Kreises mit Radius $|\vec{q}| = q$ um \vec{p}_1 , der aus dem Fermi-See herausragt:



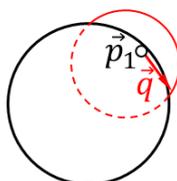
In Abhängigkeit von \vec{q} und \vec{p}_1 beträgt die Energiedifferenz

$$\Delta\mathcal{E} = \mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1 = \xi_1 + \xi_2 = \frac{1}{2m}((\vec{p}_1 + \vec{q})^2 - p_1^2) = \frac{1}{2m}(q^2 + 2\vec{p}_1 \cdot \vec{q}).$$

Diese ist maximal, falls \vec{q} parallel auf \vec{p}_1 steht, also falls $\vec{q} \cdot \vec{p}_1 = qp_1$. Außerdem ist der maximal mögliche Wert für p_1 der Fermi-Impuls p_F , q ist hingegen unbeschränkt. Für die maximal mögliche Energiezufuhr gilt also

$$\Delta\mathcal{E} \leq \Delta\mathcal{E}_{\max} = \frac{q(q + 2p_F)}{2m}.$$

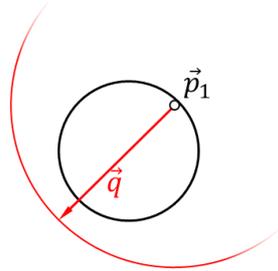
Der Radius des Fermi-Sees ist p_F und q ist der Radius des roten Kreises, dessen Mittelpunkt \vec{p}_1 zwingend innerhalb des Fermi-Sees liegt. Ist nun $q \leq 2p_F$ schneiden sich die beiden Kreise zwingend für jedes beliebige \vec{p}_1 (oder der rote Kreis liegt vollständig im Fermi-See; aber dabei kann es zu keiner Anregung kommen, weswegen wir diesen Fall nicht betrachten). Für $q < 2p_F$ gibt es daher immer ein Paar (\vec{q}, \vec{p}_1) mit einer beliebig kleinen Energiedifferenz; nämlich alle solchen Paare, bei denen \vec{p}_1 auf der Fermi-Oberfläche sitzt und \vec{q} auf einen Schnittpunkt der beiden Kreise zeigt:



Die minimale Energie ist daher

$$\Delta\mathcal{E} > \Delta\mathcal{E}_{\min} = 0 \quad \text{für} \quad q < 2p_F.$$

Ist jedoch $q > 2p_F$, so gibt es kein \vec{p}_1 mehr, sodass der rote Kreis nicht vollständig außerhalb des Fermi-Sees liegt. Die geringste Energiedifferenz hat man nun genau dann, wenn \vec{p}_1 die maximale Energie hat, also auf der Fermi-Oberfläche liegt, \vec{q} jedoch antiparallel zu \vec{p}_1 ist:



Dann gilt $\vec{q} \cdot \vec{p}_1 = -qp_F$ und es folgt

$$\Delta\mathcal{E} > \Delta\mathcal{E}_{\min} = \frac{q(q - 2p_F)}{2m}.$$

9.12 Energiebilanz der Streuung der Fermi-Flüssigkeit

ξ wurde eingeführt als Quasi-Energie eines Elektrons oder Lochs, und zwar wie folgt als Differenz zur Fermi-Energie E_F :

$$\xi := \mathcal{E} - E_F \quad \text{für ein Elektron,}$$

$$\xi := E_F - \mathcal{E} \quad \text{für ein Loch.}$$

Vor der Streuung haben wir nur ein Elektron außerhalb des Fermi-Sees; dieses hat die Quasi-Energie ξ_1 . Durch die Streuung wird ein Elektron-Loch-Paar mit Quasi-Energien ξ_2 (Loch) und ξ'_2 (Elektron) erzeugt, zudem ändert sich die Quasi-Energie des ersten Elektrons von ξ_1 zu ξ'_1 . Die Quasi-Energiebilanz ist also folgende:

$$\xi_1 = \xi'_1 + \xi_2 + \xi'_2 \quad \Leftrightarrow \quad (\mathcal{E}_1 - E_F) = (\mathcal{E}'_1 - E_F) + (E_F - \mathcal{E}_2) + (E_F - \mathcal{E}'_2)$$

$$\Leftrightarrow \quad \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 = \mathcal{E}'_1 + \mathcal{E}'_2.$$

Dabei ist \mathcal{E}_i die Energie des i -ten Elektrons vor dem Stoß und \mathcal{E}'_i nach dem Stoß. Die Quasi-Energiebilanz ist somit äquivalent zur realen Energiebilanz.

9.13 Minimierung der Entropie

Die Variation der Entropie

$$S = -k \sum_{\vec{p}} \text{Tr}(\hat{n}_{\vec{p}} \ln \hat{n}_{\vec{p}} + (1 - \hat{n}_{\vec{p}}) \ln(1 - \hat{n}_{\vec{p}}))$$

ergibt

$$\begin{aligned} \delta S &= -k \sum_{\vec{p}} \text{Tr}(\delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln \hat{n}_{\vec{p}} + \delta \hat{n}_{\vec{p}} - \delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln(1 - \hat{n}_{\vec{p}}) - \delta \hat{n}_{\vec{p}}) \\ &= -k \sum_{\vec{p}} \text{Tr}(\delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln \hat{n}_{\vec{p}} - \delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln(1 - \hat{n}_{\vec{p}})). \end{aligned}$$

Zudem beträgt die Variation der Gesamtenergie E und der Teilchenzahl N

$$\delta E = \sum_{\vec{p}} \text{Tr} \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} \delta \hat{n}_{\vec{p}}, \quad \delta N = \sum_{\vec{p}} \text{Tr} \delta \hat{n}_{\vec{p}}.$$

Die Gesamtenergie und -teilchenzahl muss erhalten sein, die Randbedingung für die Variation sind daher $\delta E = \delta N = 0$. Mit Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_{1,2}$ bleibt also die Gleichung

$$\delta \tilde{S} = \delta S - \lambda_1 \delta E - \lambda_2 \delta N$$

zu lösen, um die Entropie zu minimieren:

$$\begin{aligned} \delta \tilde{S} &= \delta S - \lambda_1 \delta E - \lambda_2 \delta N \\ &= -k \sum_{\vec{p}} \text{Tr} (\delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln \hat{n}_{\vec{p}} - \delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln (1 - \hat{n}_{\vec{p}})) - \lambda_1 \sum_{\vec{p}} \text{Tr} \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} \delta \hat{n}_{\vec{p}} - \lambda_2 \sum_{\vec{p}} \text{Tr} \delta \hat{n}_{\vec{p}} \\ &= \sum_{\vec{p}} \text{Tr} (-k \delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln \hat{n}_{\vec{p}} + k \delta \hat{n}_{\vec{p}} \ln (1 - \hat{n}_{\vec{p}}) - \lambda_1 \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} \delta \hat{n}_{\vec{p}} - \lambda_2 \delta \hat{n}_{\vec{p}}) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow \quad \ln(1 - \hat{n}_{\vec{p}}) &= \frac{1}{k} (\lambda_1 \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} + \lambda_2) + \ln \hat{n}_{\vec{p}} \\ \Leftrightarrow \quad 1 - \hat{n}_{\vec{p}} &= \hat{n}_{\vec{p}} e^{(\lambda_1 \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} + \lambda_2)/k} \\ \Leftrightarrow \quad \hat{n}_{\vec{p}} &= \frac{1}{\exp(\lambda_1 \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} + \lambda_2)/k + 1}. \end{aligned}$$

Aus den thermodynamischen Relationen $T^{-1} = \delta S / \delta E$ und $\mu = \delta E / \delta N$ ergibt sich mit folgender Händewedelnder Rechnung

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= \frac{\delta S}{\delta E} = \frac{\delta}{\delta E} (\tilde{S} + \lambda_1 E + \lambda_2 N) = \lambda_1 & \Leftrightarrow & \lambda_1 = \frac{1}{T}, \\ \mu &= \frac{\delta E}{\delta N} = \frac{1}{\lambda_1} \frac{\delta}{\delta N} (S - \tilde{S} - \lambda_2 N) = \frac{-\lambda_2}{\lambda_1} & \Leftrightarrow & \lambda_2 = -\mu \lambda_1 = -\frac{\mu}{T}. \end{aligned}$$

Somit folgt

$$\hat{n}_{\vec{p}} = \frac{1}{\exp \beta (\hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} - \mu) + 1}, \quad \beta := \frac{1}{kT}.$$

9.14 Boltzmann-Gleichung für den Nullten Schall

Wenn wir in der Boltzmann-Gleichung aus 7.1 $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ durch $n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ und die Lorentz-Kraft durch $-\nabla_{\vec{r}} \delta \mathcal{E}_{\vec{p}}$ ersetzen, erhalten wir

$$\frac{\partial n_{\vec{p}}}{\partial t} - (\nabla_{\vec{r}} \delta \mathcal{E}_{\vec{p}}) \cdot (\nabla_{\vec{p}} n_{\vec{p}}) + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{r}} n_{\vec{p}} = I[n].$$

Als erstes nutzen wir aus, dass $n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = n_{0\vec{p}} + \delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ erst in der Korrektur von Ort und Zeit abhängt. Außerdem werden wir das Stoßintegral vernachlässigen, $I[n] \approx 0$.¹ Aus der Formel, die uns Landaus Postulat aus Abschnitt 9.4 geliefert hat, erhalten wir

$$\nabla_{\vec{r}} \delta \mathcal{E}_{\vec{p}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}'}$$

¹ Eine mögliche Begründung dafür ist, dass wir nachher für das gesuchte $\delta n_{\vec{p}}$ eine „Schallwelle“ $\sim e^{i\omega t}$ ansetzen wollen, der erste Term in der Boltzmann-Gleichung also $\sim \omega$ ist. Typischerweise ist dann $\omega \gg \tau^{-1}$, sodass wir das Stoßintegral $I[n] \sim \tau^{-1}$ (in der Relaxationszeitznäherung) vernachlässigen können.

Zudem liefert uns die Hamiltonsche Bewegungsgleichung $\dot{\vec{r}} = \nabla_{\vec{p}} H$ für $H \rightarrow \mathcal{E}_{\vec{p}}$

$$\dot{\vec{r}} = \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}} + \dots = \nabla_{\vec{p}} v_F (p - p_F) + \dots = v_F \hat{p}, \quad \hat{p} := \vec{p}/|\vec{p}|,$$

wobei wir Korrekturterme nicht zu berücksichtigen brauchen, da $\dot{\vec{r}}$ mit $\nabla_{\vec{r}} n_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}}$, also einer kleinen Korrektur, multipliziert wird. $\mathcal{E}_{\vec{p}} \approx E_F + v_F (p - p_F)$ war uns aus Abschnitt 9.4 bekannt.

Die Boltzmann-Gleichung lautet also in diesem Fall

$$\frac{\partial \delta n_{\vec{p}}}{\partial t} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') (\nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}'}) \cdot (\nabla_{\vec{p}} n_{0\vec{p}}) + v_F \hat{p} \cdot \nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}} = 0.$$

Dabei haben wir auch $\nabla_{\vec{p}} n_{\vec{p}} \rightarrow \nabla_{\vec{p}} n_{0\vec{p}}$ ersetzt, da der Vorfaktor bereits klein ist.

9.15 Ansatz für den Nullten Schall

Für $\delta n_{\vec{p}}$ wählen wir nun den Ansatz einer ebenen (Schall-)Welle

$$\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = X(\hat{p}) \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad \mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} := v_F (p - p_F), \quad \hat{p} := \vec{p}/|\vec{p}|.$$

Die Funktion $X(\hat{p})$ ist dabei beliebig; sie gilt es zu bestimmen. Wir betrachten zunächst kurz

$$\nabla_{\vec{p}} n_{0\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}} \frac{1}{\exp \beta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - \mu \right) + 1} = -\delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} = -\delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) v_F \hat{p},$$

wobei wir verwendet haben, dass die Ableitung der Fermi-Verteilung nach dem Impuls gemäß Kettenregeln die Ableitung nach der Energie ist – dies ist bei $T = 0$ eine $-\delta$ -Peak bei E_F – mal die Ableitung der Energie nach dem Impuls.

Die einzelnen Terme der Boltzmann-Gleichung aus (>9.14) ergeben sich mit diesem Ansatz zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta n_{\vec{p}}}{\partial t} &= -i\omega X(\hat{p}) \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \\ -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') (\nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}'}) \cdot (\nabla_{\vec{p}} n_{0\vec{p}}) &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') (i\vec{q} \delta n_{\vec{p}'}) \cdot \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) v_F \hat{p} \\ &= i \frac{v_F}{V} \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) \vec{q} \cdot \hat{p} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}') \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)} - E_F \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \\ v_F \hat{p} \cdot \nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}} &= i v_F \hat{p} \cdot \vec{q} X(\hat{p}) \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \end{aligned}$$

Die Summe dieser drei Terme ergibt laut Boltzmann-Gleichung null; in jedem Term gibt es eine Exponentialfunktion sowie eine δ -Funktion, die entsprechend verschwinden. Bevor wir die drei Terme wieder in die Boltzmann-Gleichung einsetzen, wollen wir noch die Summe über \vec{p}' als Integral umschreiben. Dazu verwenden wir auch den allgemeinen Trick aus (>7.9), dass wir nämlich $d^3 \vec{p} = g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} d\Omega_p / 4\pi$ mit Zustandsdichte $g(\mathcal{E})$ schreiben können, wobei \mathcal{E} die zum Impuls p gehörige Energie war, ohne jeden Einfluss von Wechselwirkungen; hier also $\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}') \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)} - E_F \right) &= \int d^3 \vec{p}' f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}') \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)} - E_F \right) \\ &= \int \frac{d\Omega_{p'}}{4\pi} g \left(\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)} \right) d\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)} f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}') \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}'}^{(0)} - E_F \right) = g(E_F) \int \frac{d\Omega_{p'}}{4\pi} f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}'). \end{aligned}$$

Nun haben alles soweit zusammen, dass es an der Zeit ist, die Zwischenresultate in die Boltzmann-Gleichung einzusetzen – wie gesagt kürzen sich dabei die übrigen Exponential- und δ -Funktionen raus:

$$-i\omega X(\hat{p}) + i\frac{v_F}{V}\vec{q} \cdot \hat{p} g(E_F) \int \frac{d\Omega_{p'}}{4\pi} f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}') + i v_F \hat{p} \cdot \vec{q} X(\hat{p}) = 0$$

$$\Leftrightarrow (\omega - v_F \hat{p} \cdot \vec{q}) X(\hat{p}) = v_F \vec{q} \cdot \hat{p} \frac{g(E_F)}{V} \int \frac{d\Omega_{p'}}{4\pi} f(\vec{p}, \vec{p}') X(\hat{p}').$$

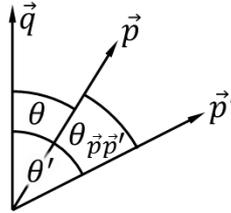
Nun können wir Landaus Postulat einsetzen, dass wir ganz am Ende von Abschnitt 9.4 kennen gelernt haben:

$$V^{-1} g(E_F) f(\vec{p}, \vec{p}') = F(\theta_{\vec{p}\vec{p}'}).$$

Da wir hier keine Spins berücksichtigen, fallen sämtliche Spin-Indizes (und σ -Matrizen) weg und in diesem Fall können wir uns offensichtlich auch den G -Term aus Landaus Postulat sparen, da F und G ohnehin beliebige Funktionen sind. Wenn wir dies einsetzen, erhalten wir

$$(\omega - v_F \hat{p} \cdot \vec{q}) X(\hat{p}) = v_F \vec{q} \cdot \hat{p} \int \frac{d\Omega_{p'}}{4\pi} F(\theta_{\vec{p}\vec{p}'}) X(\hat{p}')$$

Wir wählen nun unser Koordinatensystem so, dass $\vec{q} \parallel \hat{z}$ und nennen die Winkel entsprechend der Abbildung.

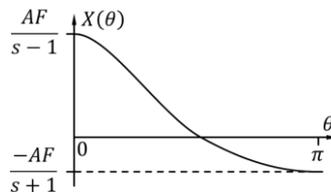


Dann folgt $\hat{p} \cdot \vec{q} = q \cos \theta$ und wir können $X(\theta, \varphi)$ statt $X(\hat{p})$ schreiben. Zudem führen wir $s := \omega/v_F q$ ein, sodass

$$(s - \cos \theta) X(\theta, \varphi) = \cos \theta \int \frac{d\Omega'}{4\pi} F(\theta_{\vec{p}\vec{p}'}) X(\theta', \varphi').$$

Da wir nun ohne Weiteres nicht weiterkommen, da die Funktion F unbekannt ist, sind wir mal wieder gezwungen, eine Annahme zu treffen – die einfachste ist offensichtlich $F = \text{const}$. In diesem Fall können wir das F vor das Integral ziehen. Das Integral das übrig bleibt hängt nun vom unbekanntem X ab, ist aber sicherlich eine Konstante, die wir A nennen können:

$$(s - \cos \theta) X(\theta, \varphi) = \cos \theta FA \quad \Leftrightarrow \quad X(\theta, \varphi) = \frac{FA \cos \theta}{s - \cos \theta}.$$



Da X auf beiden Seiten der obigen Gleichung mit dem Integral auftaucht, lässt sich A anhand dieser Gleichung offensichtlich ohnehin nicht bestimmen. Aber F lässt sich bestimmen: Wenn wir diese Lösung für X wieder in die obige Gleichung einsetzen, erhalten wir

$$(s - \cos \theta) \frac{FA \cos \theta}{s - \cos \theta} = \cos \theta \int \frac{d\Omega'}{4\pi} F \frac{FA \cos \theta'}{s - \cos \theta'}$$

$$\Leftrightarrow 1 = F \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \frac{\cos \theta'}{s - \cos \theta'} = F \left(\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 \right).$$

(Will man das Integral analytisch lösen, hilft eine Substitution $y = -\cos \theta$ weiter.) Es existiert also ein analytischer Zusammenhang zwischen s und F .

10 PHONONEN

10.1 Eigenschaften der Koeffizienten und Bewegungsgleichung

Die Taylor-Entwicklung von V am Ort $u_{ni\mu} = 0$ lautet

$$V(\{r_{ni\mu}\}) = \frac{1}{2} \sum_{nmij\mu\nu} \frac{\partial V}{\partial r_{ni\mu}} \frac{\partial V}{\partial r_{mj\nu}} \Big|_{u=0} u_{ni\mu} u_{mj\nu},$$

wobei wir

$$\phi_{ij\mu\nu}^{nm} := \frac{\partial V}{\partial r_{ni\mu}} \frac{\partial V}{\partial r_{mj\nu}} \Big|_{u=0}$$

definieren.

Rein physikalisch ist klar, dass sich die Periodizität des Gitters auf diese Koeffizienten überträgt. Schließlich beschreibt $\phi_{ij\mu\nu}^{nm}$ die Wechselwirkung der Atome mit Indizes ni und mj ; diese Wechselwirkung sollte nur von der relativen Position der Atome im Gitter abhängen, nicht von deren absoluter Position. Also leuchtet ein, dass die Koeffizienten eine Funktion von diesem Abstand sein müssen, also

$$\phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \phi_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m).$$

Aus obiger mathematischer Definition von $\phi_{ij\mu\nu}^{nm}$ folgt direkt

$$\phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \frac{\partial V}{\partial r_{ni\mu}} \frac{\partial V}{\partial r_{mj\nu}} \Big|_{u=0} = \frac{\partial V}{\partial r_{mj\nu}} \frac{\partial V}{\partial r_{ni\mu}} \Big|_{u=0} = \phi_{jiv\mu}^{mn}.$$

Die dritte Eigenschaft ist einleuchtender, wenn man zunächst die Bewegungsgleichung berechnet. Aus der Lagrange-Funktion unseres Systems

$$L = \sum_{ni\mu} \frac{m_i}{2} \dot{u}_{ni\mu}^2 - \frac{1}{2} \sum_{nmij\mu\nu} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{ni\mu} u_{mj\nu}$$

folgen die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$m_i \ddot{u}_{ni\mu} = - \sum_{mj\nu} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{mj\nu}.$$

Wir betrachten nun eine Situation, in der sich unser System in einem Zustand befindet, wo sämtliche Atome um dieselbe Auslenkung $u_{ni\mu}$ aus der Gleichgewichtslage verschoben sind. Das heißt u_{ni1} hat für alle n, i den gleichen Wert, u_{ni2} hat für alle n, i den gleichen Wert und u_{ni3} hat für alle n, i den gleichen Wert. Wir betrachten also eine Situation, in der $u_{ni\mu} =: u_\mu$ gilt. Da dies einer Translation des gesamten im Gleichgewicht befindlichen Systems entspricht, sollte hier keine Kraft wirken. Für die Bewegungsgleichungen erwarten wir also

$$\begin{aligned} 0 &= - \sum_{mj\nu} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{mj\nu} = - \sum_{mj} \phi_{ij\mu 1}^{nm} u_{mj1} - \sum_{mj} \phi_{ij\mu 2}^{nm} u_{mj2} - \sum_{mj} \phi_{ij\mu 3}^{nm} u_{mj3} \\ &= -u_1 \sum_{mj} \phi_{ij\mu 1}^{nm} - u_2 \sum_{mj} \phi_{ij\mu 2}^{nm} - u_3 \sum_{mj} \phi_{ij\mu 3}^{nm}. \end{aligned}$$

Da dies für beliebige Translationen, also beliebige Werte von u_μ , gelten soll, müssen die Summen individuell verschwinden:

$$\sum_{mj} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} = 0.$$

10.2 Vererbung der Eigenschaften auf die neuen Koeffizienten

Wir haben

$$D_{ij\mu\nu}^{nm} := \frac{1}{\sqrt{m_i m_j}} \phi_{ij\mu\nu}^{nm}$$

definiert. Da die Massen m_i und m_j symmetrisch im Vorfaktor auftauchen, gilt sofort

$$\phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \phi_{jiv\mu}^{mn} \quad \Rightarrow \quad D_{ij\mu\nu}^{nm} = D_{jiv\mu}^{mn}.$$

Außerdem erbt D die Eigenschaft

$$\phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \phi_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) \quad \Rightarrow \quad D_{ij\mu\nu}^{nm} = D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m).$$

Allein die letzte in (>10.1) hergeleitete Eigenschaft von ϕ muss modifiziert werden:

$$\sum_{mj} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{mj} \sqrt{m_i m_j} D_{ij\mu\nu}^{nm} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{mj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}^{nm} = 0.$$

10.3 Bewegungsgleichungen in neuen Koordinaten

Bereits in (>10.1) haben wir die Bewegungsgleichungen/Euler-Lagrange-Gleichungen für die $u_{ni\mu}$'s hergeleitet:

$$m_i \ddot{u}_{ni\mu} = - \sum_{mjv} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{mjv}.$$

Wenn wir nun

$$u_{ni\mu} = \frac{1}{\sqrt{m_i}} A_{ni\mu}, \quad \phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \sqrt{m_i m_j} D_{ij\mu\nu}^{nm}$$

einsetzen, erhalten wir

$$\frac{m_i}{\sqrt{m_i}} \ddot{A}_{ni\mu} = - \sum_{mjv} \sqrt{m_i m_j} D_{ij\mu\nu}^{nm} \frac{1}{\sqrt{m_j}} A_{mjv} \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{A}_{ni\mu} = - \sum_{mjv} D_{ij\mu\nu}^{nm} A_{mjv}.$$

Der Vorteil hier ist in erster Linie, dass man sich nicht mit Massen m_i herumschlagen muss.

10.4 Fouriertransformation der Bewegungsgleichung

Wir wollen nun unsere Bewegungsgleichung

$$\ddot{A}_{ni\mu} = - \sum_{mjv} D_{ij\mu\nu}^{nm} A_{mjv}$$

mittels Fouriertransformation umschreiben. Dabei ist $A_{ni\mu}$ eine Funktion von \vec{R} , man könnte etwa $A_{ni\mu} = A_{i\mu}(\vec{R}_n)$ schreiben. Wir verwenden also die Fouriertransformation für Funktionen von \vec{R} aus Abschnitt 1.5. Statt über \vec{R} können wir dann genauso gut über n summieren:

$$A_{i\mu}(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}} A_{i\mu}(\vec{R}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} = \sum_n A_{ni\mu} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}.$$

Wir multiplizieren unsere Gleichung also mit $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}$ und summieren über n :

$$\begin{aligned} \sum_n \ddot{A}_{ni\mu} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} &= - \sum_{mj\nu} D_{ij\mu\nu}^{nm} A_{mj\nu} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \underbrace{e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_m} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_m}}_{=1, \text{eingefügt}} \\ \Leftrightarrow \ddot{A}_{i\mu}(\vec{q}) &= - \sum_{mj\nu} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_m)} A_{mj\nu} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_m} \\ \Leftrightarrow \ddot{A}_{i\mu}(\vec{q}) &= - \sum_{mj\nu} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} A_{mj\nu} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_m} \\ \Leftrightarrow \ddot{A}_{i\mu}(\vec{q}) &= - \sum_{j\nu} D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) A_{j\nu}(\vec{q}). \end{aligned}$$

Dabei haben wir in der ersten Zeile eine 1 eingefügt und von der zweiten auf die dritte Zeile die Summe über n bzw. \vec{R}_n um den bzgl. n konstanten Vektor \vec{R}_m geschiftet.

Wenn wir die Indizes $i\mu$ zu X zusammenfassen, $X = \{i\mu\}$, können wir diese Gleichung wieder als Matrixgleichung schreiben:

$$\ddot{A}_X(\vec{q}) = - \sum_{XY} D_{XY}(\vec{q}) A_Y(\vec{q}) \quad \text{bzw.} \quad \ddot{A}(\vec{q}) = -D(\vec{q}) A(\vec{q}).$$

$D(\vec{q})$ ist nunmehr nur eine $3M \times 3M$ -Matrix. Im Gegensatz zur vorherigen $3NM \times 3NM$ ist dies nun numerisch machbar. Diese Matrix-Gleichung müssen wir nun für jedes \vec{q} einzeln lösen. Zwar gibt es in der ersten Brillouin-Zone auch N verschiedene \vec{q} -Vektoren (zumindest unter Born-van-Kármán-Randbedingungen, siehe Abschnitt 1.3), insofern spielt der große Faktor N doch wieder eine Rolle. Aber erstens sind zum Beispiel die Dispersionsrelation $\omega_\alpha^2(\vec{q})$, also die Eigenwerte von $D(\vec{q})$, kontinuierliche Funktionen von \vec{q} , sodass wir das Problem nur für einige \vec{q} lösen müssen und dann kontinuierlich fortsetzen können. Und zum anderen war das alte Problem mit der $3NM \times 3NM$ -Matrix ein *gekoppeltes* Problem von $3NM$ Gleichungen. Unsere neue, fouriertransformierte Matrixgleichung ist hingegen für jedes \vec{q} *entkoppelt* und lässt sich völlig separat von den anderen lösen.

10.5 Die Matrix ist hermitesch

Wir sind nun bei einer Matrix-Gleichung

$$\ddot{A}(\vec{q}) = -D(\vec{q}) A(\vec{q})$$

angelangt, deren Matrix die Komponenten $D_{XY}(\vec{q})$ mit $X = \{i\mu\}$ hat, oder, in anderer Notation, $D_{ij\mu\nu}(\vec{q})$. Aus (>10.2) wissen wir, dass

$$D_{ij\mu\nu}^{nm} = D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) = D_{jiv\mu}(\vec{R}_m - \vec{R}_n) = D_{jiv\mu}^{mn}.$$

Also gilt für die Fouriertransformierte

$$D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}_n - \vec{R}_m} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_m)} = \sum_{\vec{R}_n - \vec{R}_m} D_{jiv\mu}(\vec{R}_m - \vec{R}_n) e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_m - \vec{R}_n)} = D_{jiv\mu}^*(\vec{q}).$$

Da die Summe über alle möglichen Paare $\vec{R}_n - \vec{R}_m$ für alle möglichen n, m geht, spielt es keine Rolle, ob man über $\vec{R}_n - \vec{R}_m$ oder $\vec{R}_m - \vec{R}_n$ summiert. Somit haben wir gefunden, dass die Matrix D hermitesch ist, denn

$$D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) = D_{jiv\mu}^*(\vec{q}) \quad \Leftrightarrow \quad D_{XY} = D_{YX}^* \quad \Leftrightarrow \quad D = D^\dagger.$$

Die Matrix $D(\vec{q})$ hat also $3M$ reelle Eigenwerte $\omega_\alpha^2(\vec{q})$; wir unterscheiden sie mit einem Index $\alpha = 1, \dots, 3M$. Ebenso gibt es natürlich $3M$ zugehörige Eigenvektoren $e_{\alpha X}(\vec{q}) = e_{\alpha i\mu}(\vec{q})$ (bzw. hier nur als Eigenvektoren-Komponenten angegeben).

10.6 Eigenschaften der Eigenwerte und -vektoren

Direkt aus der Fouriertransformation folgt

$$D_{ij\mu\nu}(-\vec{q}) = \sum_{\vec{R}_n - \vec{R}_m} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)} = D_{ij\mu\nu}^*(\vec{q}) = D_{jiv\mu}(\vec{q}),$$

also in Matrix-Schreibweise

$$D(-\vec{q}) = D^T(\vec{q}).$$

Nutzt man diese Relation, so folgt

$$\det(D(-\vec{q}) - \omega^2) = \det(D^T(\vec{q}) - \omega^2) = \det(D(\vec{q}) - \omega^2)^T = \det(D(\vec{q}) - \omega^2).$$

Da $\omega(\vec{q})$ die Lösung von $\det(D - \omega^2) = 0$ ist, folgt daraus $\omega(\vec{q}) = \omega(-\vec{q})$.

Aus (>10.5) wissen wir, dass $D_{XY} = D_{YX}^* \Leftrightarrow D^* = D^T$. Somit folgt

$$D^*(\vec{q}) = D^T(\vec{q}) = D(-\vec{q}).$$

Für die Eigenwertgleichung gilt also, da ω^2 reell ist,¹

$$D(\vec{q})e_\alpha(\vec{q}) = \omega_\alpha^2(\vec{q})e_\alpha(\vec{q}) \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{D^*(\vec{q})}_{=D(-\vec{q})}e_\alpha^*(\vec{q}) = \omega_\alpha^2(\vec{q})e_\alpha^*(\vec{q})$$

$$\Leftrightarrow \quad D(\vec{q})e_\alpha^*(-\vec{q}) = \omega_\alpha^2(\vec{q})e_\alpha^*(-\vec{q}).$$

Somit folgt $e_\alpha^*(-\vec{q}) = e_\alpha(\vec{q}) \Leftrightarrow e_\alpha(-\vec{q}) = e_\alpha^*(\vec{q})$.

10.7 Grenzfall kleiner Wellenvektoren – Akustische Moden

Aus (>10.2) wissen wir, dass

$$\sum_{mj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}^{nm} = \sum_{mj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) = 0.$$

Wir wollen diese Relation nun in eine Relation für die Fourierkomponente $D_{ij\mu\nu}(\vec{q})$ umschreiben. Dazu multiplizieren wir mit $e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}$ und summieren über n :

$$\sum_{nmj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \underbrace{e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_m}}_{=1} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \sum_{nmj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \sum_{nmj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \sum_j \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) \sum_m e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} = 0$$

¹ Da e_α kein drei-, sondern ein $3M$ -komponentiger Vektor ist, schreiben wir ihn ohne Vektorpfeil. Also: e_α ist der α -te Eigenvektor von D mit Komponenten $e_{\alpha X} = e_{\alpha i\mu}$.

Genauso wie in (>10.4) haben wir hier eine 1 eingefügt und die Summe über n bzw. \vec{R}_n um ein bzgl. n konstantes \vec{R}_m geschiftet. Für $\vec{q} \neq 0$ verschwindet die Summe über m , da hier alle möglichen Zahlen auf dem Einheitskreis der komplexen Zahlenebene aufsummiert werden. Für $\vec{q} = 0$ hingegen ist die Summe über m endlich (nämlich N). Somit folgt für $\vec{q} = 0$, dass

$$\sum_j \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(0) = 0.$$

Aus dieser Gleichung folgt, dass die Matrix $D(0)$ (unter anderem) null als Eigenwert hat und dass die zugehörigen Eigenvektoren die Form $e_{\alpha j\nu} = \sqrt{m_j} \xi_{\alpha\nu}$ für beliebige $\xi_{\alpha\nu}$ haben. Denn für solche Vektoren folgt

$$\begin{aligned} D(0) e_\alpha(0) &= \sum_Y D_{XY}(0) e_{\alpha Y}(0) = \sum_{j\nu} D_{ij\mu\nu}(0) e_{\alpha j\nu}(0) = \sum_{j\nu} D_{ij\mu\nu}(0) \sqrt{m_j} \xi_{\alpha\nu} \\ &= \sum_\nu \xi_{\alpha\nu} \underbrace{\sum_j \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(0)}_{=0} = 0. \end{aligned}$$

Eigenvektoren von hermiteschen Matrizen sind orthogonal, das heißt es gilt

$$\delta_{\alpha\beta} \sim e_\alpha \cdot e_\beta^* = \sum_X e_{\alpha X} e_{\beta X}^* = \sum_{i\mu} e_{\alpha i\mu} e_{\beta i\mu}^* = \sum_{i\mu} m_i \xi_{\alpha\mu} \xi_{\beta\mu}^* \Leftrightarrow \delta_{\alpha\beta} \sim \sum_\mu \xi_{\alpha\mu} \xi_{\beta\mu}^* = \xi_\alpha \cdot \xi_\beta^*.$$

Im letzten Schritt haben wir $\xi_{\alpha\mu}$ als μ -te Komponente eines Vektors ξ_α aufgefasst und die Summe als Skalarprodukt solcher Vektoren geschrieben. Offensichtlich müssen diese – im Gegensatz zu e_α nun dreikomponentigen – Vektoren also ebenfalls orthogonal sein. Eine Menge von \mathbb{C}^3 -Vektoren, die paarweise orthogonal sind, kann maximal drei Vektoren enthalten. Also gibt es auch maximal drei verschiedene Basisvektoren der Form $e_{\alpha j\nu}(0) = \sqrt{m_j} \xi_{\alpha\nu}$. Wir ordnen diesen dreien die Indizes $\alpha = 1, 2, 3$ zu. Diese drei Moden nennt man *akustische Moden*. Die übrigen Basisvektoren ($\alpha = 4, 5, \dots, 3M$) haben nicht diese Form und ihre Eigenwerte sind ungleich null. Diese $3M - 3$ Moden nennt man *optische Moden*.

10.8 Schwingungsbild akustischer Moden

Unser fouriertransformiertes Differentialgleichungssystem $\vec{A}(\vec{q}) = -D(\vec{q})A(\vec{q})$ lässt sich entkoppeln durch eine Matrix S , die als Spalten die Eigenvektoren enthält: $S_{X\alpha} = e_{\alpha X}$ mit $X = \{i\mu\}$. Man beachte, dass es genauso viele verschiedene Eigenvektoren wie Vektorkomponenten gibt, es gibt also genauso viele verschiedene Werte α wie $X = \{i\mu\}$ (nämlich $3M$ Stück). Durch das Entkoppeln entstehen $3M$ unabhängige Differentialgleichungen der Form¹ $\ddot{B}_\alpha = -\omega_\alpha^2 B_\alpha$. Die Funktionen B_α sind also einfache harmonische Schwingungen mit Frequenz ω_α , also

$$B_\alpha(\vec{q}) = c_{\alpha 1}(\vec{q}) e^{i\omega_\alpha t} + c_{\alpha 2}(\vec{q}) e^{-i\omega_\alpha t},$$

¹ Eine hermitesche Matrix D erfüllt zusammen mit einer Matrix S , die als Spalten die Eigenvektoren von D enthält, stets die Beziehung

$$S^\dagger D S = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix} =: D_D,$$

wobei D_D die Diagonalmatrix zu D ist, die auf der Diagonalen die Eigenwerte ω_α^2 von D enthält. Somit folgt

$$\vec{A} = -D A \Leftrightarrow S^\dagger \vec{A} = -S^\dagger D S \underbrace{S^\dagger A}_{=: B} \Leftrightarrow \vec{B} = -D_D B.$$

Da D_D diagonal ist, liest sich diese Gleichung in Komponentenschreibweise $\ddot{B}_\alpha = -\omega_\alpha^2 B_\alpha$. Ferner gilt offensichtlich $A = S B$ bzw. $A_X = \sum_\alpha S_{X\alpha} B_\alpha$.

deren Koeffizienten $c_{\alpha 1}(\vec{q}), c_{\alpha 2}(\vec{q})$ sich aus den Anfangsbedingungen ergeben. Die Lösungen für A ergeben sich nun durch

$$A_X = \sum_{\alpha} S_{X\alpha} B_{\alpha} \quad \Leftrightarrow \quad A_{i\mu} = \sum_{\alpha} e_{\alpha i\mu} B_{\alpha}.$$

Falls die Randbedingungen derart sind, dass nur eine Mode β schwingt, also nur $B_{\alpha=\beta} \neq 0$ ist, gilt entsprechend $A_{i\mu} = e_{\beta i\mu} B_{\beta}$ (ohne Summe). Für unsere eigentlichen (fouriertransformierten) Koordinaten $u_{i\mu}(\vec{q})$ folgt daraus

$$u_{i\mu}(\vec{q}) = \frac{A_{i\mu}(\vec{q})}{\sqrt{m_i}} = \frac{e_{\beta i\mu}(\vec{q})}{\sqrt{m_i}} B_{\beta}(\vec{q}).$$

Für die akustischen Moden $\beta = 1, 2, 3$ haben wir gefunden, dass wir bei $\vec{q} = 0$ die Eigenvektoren schreiben können als $e_{\beta i\mu}(0) = \sqrt{m_i} \xi_{\beta\mu}$. Also folgt

$$u_{i\mu}(0) = \xi_{\beta\mu} B_{\beta}(0).$$

Die Auslenkungen sind in diesem Fall offensichtlich unabhängig von dem Basisatom i . Es schwingen also stets alle Atome einer Elementarzelle in Phase.

10.9 Grenzfall kleiner Wellenvektoren – Optische Moden

Wir haben in (>10.7) festgestellt, dass die Matrix $D(\vec{q} = 0)$ drei Eigenvektoren $e_{\alpha j\nu}(0)$ mit Eigenwerten 0 hat, die die Form $e_{\alpha j\nu}(0) = \sqrt{m_j} \xi_{\alpha\nu}$ haben. Die übrigen $3M - 3$ Eigenvektoren $e_{\alpha j\nu}(0)$ haben somit *nicht* die Form $\sqrt{m_j} \xi_{\alpha\nu}$ und Eigenwerte größer null.

Bei $\vec{q} = 0$ gilt ganz allgemein die Eigenwertgleichung

$$D(0) e_{\alpha}(0) = \omega_{\alpha}^2(0) e_{\alpha}(0) \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{j\nu} D_{ij\mu\nu}(0) e_{\alpha j\nu}(0) = \omega_{\alpha}^2(0) e_{\alpha i\mu}(0).$$

Wir multiplizieren diese nun mit $\sqrt{m_i}$ und summieren über i :

$$\underbrace{\sum_{j\nu} \sqrt{m_i} D_{ij\mu\nu}(0) e_{\alpha j\nu}(0)}_{=0} = \omega_{\alpha}^2(0) \sum_i \sqrt{m_i} e_{\alpha i\mu}(0).$$

Aus (>10.7) wissen wir, dass $\sum_j \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}(0) = 0$, und aus (>10.6) $D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) = D_{jiv\mu}(-\vec{q})$. Somit verschwindet stets die linke Seite dieser Gleichung. Wir wollen nun die $3M - 3$ sogenannten *optischen Moden* betrachten, für die $\omega_{\alpha}^2(0) \neq 0$ gilt. In diesem Fall muss nun – damit auch die rechte Seite verschwindet – offensichtlich

$$\sum_i \sqrt{m_i} e_{\alpha i\mu}(0) = 0$$

gelten. Wenn wir uns wie in (>10.8) auf eine bestimmte optische Moden β beschränken (alle anderen verschwinden aufgrund entsprechend gewählter Anfangsbedingungen), folgt (ohne Summe)

$$u_{i\mu}(\vec{q}) = \frac{e_{\beta i\mu}(\vec{q})}{\sqrt{m_i}} B_{\beta}(\vec{q}) \quad \Rightarrow \quad B_{\beta}(0) e_{\beta i\mu}(0) = \sqrt{m_i} u_{i\mu}(0).$$

Wir können also unsere obige Gleichung mit B_{β} multiplizieren und einsetzen:

$$0 = B_{\beta}(0) \sum_i \sqrt{m_i} e_{\alpha i\mu}(0) = \sum_i m_i u_{i\mu}(0).$$

Somit ist der Schwerpunkt der Atome innerhalb einer Elementarzelle konstant: Die Schwingung der Atome innerhalb einer Elementarzelle ist also in diesem Sinne gegenphasig.

10.10 Kinetische Energie

Zuletzt haben wir unsere Lösungen bei $\vec{q} = 0$ untersucht. Nun wollen wir zur allgemeinen Lösung von Abschnitt 10.2 bzw. (>10.5) und (>10.6) zurückkehren. Dort hatten wir herausgefunden, dass die Matrix $D_{ij\mu\nu}(\vec{q})$ im Fourierraum orthonormale Eigenvektoren $e_{\alpha i\mu}(\vec{q})$ und Eigenvektoren $\omega_\alpha^2(\vec{q})$ hat. Daraus wollen wir nun wieder allgemeine Lösungen für $u_{ni\mu}$ bzw. $A_{ni\mu}$ rekonstruieren.

Zunächst haben wir bereits in (>10.8) erläutert, dass wir $A_{ni}(\vec{q})$ durch die Gleichung

$$A_{i\mu}(\vec{q}) = \sqrt{N} \sum_{\alpha} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) B_{\alpha}(\vec{q})$$

erhalten. Dabei war B_{α} eine einfache harmonische Schwingung. Der zusätzliche Faktor \sqrt{N} , den wir hier schreiben, vereinfacht lediglich die Notation. Da B_{α} beliebige Integrationskonstanten enthält, könnte \sqrt{N} auch einfach in B_{α} absorbiert werden.

Um aus $A_{i\mu}(\vec{q})$ wieder $A_{ni\mu}$ zu erhalten, müssen wir wieder fouriertransformieren. Gemäß Abschnitt 1.5 benötigen wir für die Rücktransformationen einen Vorfaktor $1/N$:

$$A_{ni\mu} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} A_{i\mu}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}\alpha} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) B_{\alpha}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}.$$

Diese Formel setzen wir nun in die kinetische Energie ein. Dabei nutzen wir aus,

- dass die Auslenkung $A_{ni\mu} = \sqrt{m_i} u_{ni\mu}$ aus der Gleichgewichtslage sicherlich reell ist, sodass $A_{ni\mu} = A_{ni\mu}^*$ bzw. $A_{ni\mu}^2 = A_{ni\mu} A_{ni\mu}^*$ gilt,
- dass die ganze Zeitabhängigkeit, wie wir aus (>10.8) wissen, in B_{α} steckt, sich die Zeitableitung also nur auf diese überträgt,
- dass die Eigenvektoren hermitescher Matrizen orthogonal sind, $\sum_{i\mu} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) e_{\beta i\mu}^*(\vec{q}) = \delta_{\alpha\beta}$, wie wir es bereits (>10.7) benutzt haben, sowie
- dass $\sum_n e^{i(\vec{q}-\vec{p}) \cdot \vec{R}_n} = N \delta_{\vec{q}\vec{p}}$ gilt.

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{ni\mu} m_i \dot{u}_{ni\mu}^2 = \frac{1}{2} \sum_{ni\mu} \dot{A}_{ni\mu}^2 = \frac{1}{2} \sum_{ni\mu} \dot{A}_{ni\mu} \dot{A}_{ni\mu}^* \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{ni\mu} \sum_{\vec{q}\alpha} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) \dot{B}_{\alpha}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \sum_{\vec{p}\beta} e_{\beta i\mu}^*(\vec{p}) \dot{B}_{\beta}^*(\vec{p}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{R}_n} \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i\mu} \sum_{\vec{q}\vec{p}\alpha\beta} \underbrace{\sum_n e^{i(\vec{q}-\vec{p}) \cdot \vec{R}_n}}_{=N\delta_{\vec{q}\vec{p}}} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) e_{\beta i\mu}^*(\vec{p}) \dot{B}_{\alpha}(\vec{q}) \dot{B}_{\beta}^*(\vec{p}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} \underbrace{\sum_{i\mu} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) e_{\beta i\mu}^*(\vec{q})}_{=\delta_{\alpha\beta}} \dot{B}_{\alpha}(\vec{q}) \dot{B}_{\beta}^*(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \dot{B}_{\alpha}(\vec{q}) \dot{B}_{\alpha}^*(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \dot{B}_{\alpha}(\vec{q}) \dot{B}_{\alpha}(-\vec{q}). \end{aligned}$$

Die zuletzt genutzte Identität $B_{\alpha}^*(\vec{q}) = B_{\alpha}(-\vec{q})$ folgt aus der Tatsache, dass die Auslenkungen $A_{ni\mu}$ reell sind.¹

¹ Aus $A_{ni\mu} \in \mathbb{R}$ folgt $A_{ni\mu}^* = A_{ni\mu}$ und somit

10.11 Potentielle Energie

Für die potentielle Energie benötigen wir zusätzlich noch die Rücktransformation der Matrix (siehe auch Abschnitt 1.5)

$$D_{ij\mu\nu}^{nm} = D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)}.$$

Unter Verwendung derselben Identitäten wie bei der kinetischen Energie in (>10.10) erhalten wir

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{nmij\mu\nu} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{ni\mu}^* u_{mj\nu} = \frac{1}{2} \sum_{nmij\mu\nu} D_{ij\mu\nu}^{nm} A_{ni\mu}^* A_{mj\nu} \\ &= \frac{1}{2N^2} \sum_{nmij\mu\nu} \sum_{\vec{k}} D_{ij\mu\nu}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)} \sum_{\vec{q}\alpha} e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \sum_{\vec{p}\beta} e_{\beta j\nu}(\vec{p}) B_{\beta}(\vec{p}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_m} \\ &= \frac{1}{2N^2} \sum_{ij\mu\nu} \sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{p}\alpha\beta} \underbrace{\sum_{nm} e^{i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{R}_n} e^{-i(\vec{k}-\vec{p}) \cdot \vec{R}_m}}_{=N\delta_{\vec{k}\vec{q}} N\delta_{\vec{k}\vec{p}}} e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) D_{ij\mu\nu}(\vec{k}) e_{\beta j\nu}(\vec{p}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{p}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij\mu\nu} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) e_{\beta j\nu}(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{q}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{XY} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} e_{\alpha X}^*(\vec{q}) D_{XY}(\vec{q}) e_{\beta Y}(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{q}) \end{aligned}$$

Hierbei haben wir wie üblich den zusammenfassenden Index $X = \{i\mu\}$ benutzt. Sei S eine Matrix, deren Spalten die Eigenvektoren von D sind, sodass $S_{X\alpha} := e_{\alpha X}$. Dann ist $S^\dagger D S$ die zu D diagonale Matrix mit den Eigenwerten $\omega_{\alpha}^2(\vec{q})$ auf der Diagonalen:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{XY} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} S_{X\alpha}^*(\vec{q}) D_{XY}(\vec{q}) S_{Y\beta}(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{XY} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} S_{\alpha X}^\dagger(\vec{q}) D_{XY}(\vec{q}) S_{Y\beta}(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{q}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} \left(S^\dagger(\vec{q}) D(\vec{q}) S(\vec{q}) \right)_{\alpha\beta} B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha\beta} \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) \delta_{\alpha\beta} B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\beta}(\vec{q}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) B_{\alpha}(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) B_{\alpha}(-\vec{q}) B_{\alpha}(\vec{q}). \end{aligned}$$

Für den letzten Schritt siehe die Fußnote auf Seite 88.

10.12 Kanonischer Impuls

Da nur die kinetische Energie von \dot{B} abhängt, folgt mit $H = T + V$

$$A_{ni\mu}^* = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} A_{i\mu}^*(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} A_{i\mu}^*(-\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \stackrel{!}{=} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} A_{i\mu}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} = A_{ni\mu}.$$

Dabei wurde beim zweiten Gleichheitszeichen das Vorzeichen des Summationsindex \vec{q} umgedreht. Aus dieser Gleichung lässt sich $A_{i\mu}^*(\vec{q}) = A_{i\mu}(-\vec{q})$ ablesen. Diese Beziehung pflanzt sich auf die B_{α} fort:

$$A_{i\mu}^*(\vec{q}) = \sqrt{N} \sum_{\alpha} e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) B_{\alpha}^*(\vec{q}) \stackrel{!}{=} \sqrt{N} \sum_{\alpha} e_{\alpha i\mu}(-\vec{q}) B_{\alpha}(-\vec{q}) = A_{i\mu}(-\vec{q}).$$

Da wir $e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) = e_{\alpha i\mu}(-\vec{q})$ bereits in (>10.6) gezeigt haben, folgt direkt $B_{\alpha}^*(\vec{q}) = B_{\alpha}(-\vec{q})$.

$$\begin{aligned}
P(\vec{q}) &:= \frac{\partial H}{\partial \dot{B}_\alpha(\vec{q})} = \frac{\partial T}{\partial \dot{B}_\alpha(\vec{q})} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \dot{B}_\alpha(\vec{q})} \sum_{\vec{p}\beta} \dot{B}_\beta(\vec{p}) \dot{B}_\beta(-\vec{p}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\beta} \left(\frac{\partial \dot{B}_\beta(\vec{p})}{\partial \dot{B}_\alpha(\vec{q})} \dot{B}_\beta(-\vec{p}) + \dot{B}_\beta(\vec{p}) \frac{\partial \dot{B}_\beta(-\vec{p})}{\partial \dot{B}_\alpha(\vec{q})} \right) \stackrel{\vec{p} \rightarrow -\vec{p}}{=} \sum_{\vec{q}\beta} \frac{\partial \dot{B}_\beta(\vec{p})}{\partial \dot{B}_\alpha(\vec{q})} \dot{B}_\beta(-\vec{p}) = \sum_{\vec{q}\beta} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\vec{q}\vec{p}} \dot{B}_\beta(-\vec{p}) \\
&= \dot{B}_\alpha(-\vec{q}).
\end{aligned}$$

Die Ersetzung $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ wurde dabei nur im zweiten Term durchgeführt.

10.13 Leiteroperatoren

Die Definitionen der Leiteroperatoren (hier mit \vec{q} als Index statt als Argument) lauten

$$a_{\vec{q}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (\omega_{\vec{q}\alpha} B_{\vec{q}\alpha} + iP_{-\vec{q}\alpha}), \quad a_{\vec{q}\alpha}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (\omega_{\vec{q}\alpha} B_{-\vec{q}\alpha} - iP_{\vec{q}\alpha}).$$

Daraus folgt mit $\omega_{\vec{q}\alpha} = \omega_{-\vec{q}\alpha}$ aus (>10.6) sofort

$$\begin{aligned}
a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} \cdot 2\omega_{\vec{q}\alpha} B_{\vec{q}\alpha} \quad \Leftrightarrow \quad B_{\vec{q}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{\vec{q}\alpha}), \\
a_{\vec{q}\alpha}^\dagger - a_{-\vec{q}\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} \cdot (-2iP_{\vec{q}\alpha}) \quad \Leftrightarrow \quad P_{\vec{q}\alpha} = \frac{i\omega_{\vec{q}\alpha}}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger - a_{-\vec{q}\alpha}).
\end{aligned}$$

10.14 Hamilton-Operator mit Leiteroperatoren

Für den Hamilton-Operator folgt

$$\begin{aligned}
H = T + V &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \dot{B}_{\vec{q}\alpha} \dot{B}_{-\vec{q}\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha}^2 B_{\vec{q}\alpha} B_{-\vec{q}\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} (P_{\vec{q}\alpha} P_{-\vec{q}\alpha} + \omega_{\vec{q}\alpha}^2 B_{\vec{q}\alpha} B_{-\vec{q}\alpha}) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\omega_{\vec{q}\alpha}} \left(-\omega_{\vec{q}\alpha}^2 (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger - a_{-\vec{q}\alpha}) (a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger - a_{\vec{q}\alpha}) + \omega_{\vec{q}\alpha}^2 (a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{\vec{q}\alpha}) (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{-\vec{q}\alpha}) \right) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} \left((-a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha} a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger - a_{-\vec{q}\alpha} a_{\vec{q}\alpha}) \right. \\
&\quad \left. + (a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger a_{-\vec{q}\alpha} + a_{\vec{q}\alpha} a_{\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{\vec{q}\alpha} a_{-\vec{q}\alpha}) \right) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha} a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger a_{-\vec{q}\alpha} + a_{\vec{q}\alpha} a_{\vec{q}\alpha}^\dagger) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + a_{\vec{q}\alpha} a_{\vec{q}\alpha}^\dagger) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + [a_{\vec{q}\alpha}, a_{\vec{q}\alpha}^\dagger]) = \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} \left(a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + \frac{1}{2} \right).
\end{aligned}$$

10.15 Quantisierung der physikalischen Auslenkungen

Für die physikalische Auslenkung aus der Gleichgewichtslage folgt

$$\begin{aligned}
u_{ni\mu} &= \frac{1}{\sqrt{m_i}} A_{ni\mu} \stackrel{(>10.10)}{=} \frac{1}{\sqrt{Nm_i}} \sum_{\vec{q}\alpha} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) B_{\vec{q}\alpha} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2Nm_i}} \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}\alpha}}} e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) (a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{\vec{q}\alpha}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2Nm_i}} \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}\alpha}}} (e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} + e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2Nm_i}} \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}\alpha}}} (e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} + e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha}^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}).
\end{aligned}$$

10.16 Zustandsdichte von Phononen

Per Definition ist die Zustandsdichte von Phononen mit Dispersionsrelationen $\omega_\alpha(\vec{q})$ in Mode α gegeben durch

$$g(\omega) = \sum_{\alpha} \int d^3\vec{q} \delta(\omega - \omega_\alpha(\vec{q})).$$

Es gilt die Identität der δ -Funktion $\delta(f(x)) = \sum_n \delta(x - x_n)/|f'(x_n)|$, wobei x_n die Nullstellen von $f(x)$ sind. Die Nullstellen von $\omega - \omega_\alpha(\vec{q})$ liegen für ein festes ω auf einer Oberfläche, quasi der „Äquienergie“-Oberfläche S_ω mit Energie ω . Das Integral reduziert sich somit durch die δ -Funktion auf ein Integral auf dieser Oberfläche. Der Faktor $1/|f'(x_n)|$ wird in diesem Fall zu einem $1/|\nabla_{\vec{q}}\omega_\alpha(\vec{q})|$, wobei dieser Faktor unter dem Oberflächenintegral steht, sodass er nur an solchen \vec{q} ausgewertet wird, die Nullstellen von $\omega - \omega_\alpha(\vec{q})$ sind:

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{S_\omega} d^2q \frac{1}{|\nabla_{\vec{q}}\omega_\alpha(\vec{q})|}.$$

Der Faktor $V/(2\pi)^3$ folgt aus der Definition von $d^3\vec{q}$, siehe Abschnitt 1.4.

10.17 Zustandsdichte von akustischen Phononen niedriger Impulse

Für die akustischen Moden (wenn wir nur von akustischen Moden sprechen, benutzen wir hier den Index s) gilt bei $\vec{q} \rightarrow 0$ die Dispersionsrelation

$$\omega_s(\vec{q}) = c_s(\vec{n}_{\vec{q}})|\vec{q}|.$$

Zumindest $\omega_s(0) = 0$ haben wir in 10.5 bzw. (>10.7) gezeigt. Wir nehmen nun an, dass ω_s nahe dem Ursprung linear in $|\vec{q}|$ wächst, dass die Steigung $c_s(\vec{n}_{\vec{q}})$ aber von der Richtung $\vec{n}_{\vec{q}} := \vec{q}/|\vec{q}|$ abhängen kann, in die man sich vom Ursprung entfernt.

Das Integral aus der allgemeinen Zustandsdichte $g(\omega)$ aus (>10.16) über die Oberfläche S_ω können wir schreiben als $d^2q = d\Omega_{\vec{q}} q^2$ (ebenso wie in Kugelkoordinaten: $d^3q = dq d^2q = dq d\Omega_{\vec{q}} q^2$) und es folgt

$$g_{\text{ak}}(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{S_\omega} d\Omega_{\vec{q}} \frac{q^2}{|\nabla_{\vec{q}}\omega_s(\vec{q})|}.$$

Mit unserer Näherung für $\omega_s(\vec{q})$ können wir den Nenner schreiben als

$$\begin{aligned}
\nabla_{\vec{q}}\omega_s(\vec{q}) &= \nabla_{\vec{q}} c_s(\vec{n}_{\vec{q}})|\vec{q}| = c_s'(\vec{n}_{\vec{q}})|\vec{q}| \nabla_{\vec{q}}\vec{n}_{\vec{q}} + c_s(\vec{n}_{\vec{q}}) \nabla_{\vec{q}}|\vec{q}| = 2c_s'(\vec{n}_{\vec{q}}) + c_s(\vec{n}_{\vec{q}}) \vec{n}_{\vec{q}} \approx c_s(\vec{n}_{\vec{q}}) \vec{n}_{\vec{q}} \\
\Rightarrow \quad |\nabla_{\vec{q}}\omega_s(\vec{q})| &= c_s(\vec{n}_{\vec{q}}),
\end{aligned}$$

wobei wir annehmen mussten, dass $c'_s \ll c_s$, dass die Abhängigkeit der Schallgeschwindigkeit von der Richtung von \vec{q} also klein ist. Somit folgt

$$g_{\text{ak}}(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{S_\omega} d\Omega_{\vec{q}} \frac{\omega_s^2(\vec{q})/c_s^2(\vec{n}_{\vec{q}})}{c_s(\vec{n}_{\vec{q}})} = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{S_\omega} d\Omega_{\vec{q}} \frac{1}{c_s^3(\vec{n}_{\vec{q}})} =: \frac{3V\omega^2}{2\pi^2} \left\langle \frac{1}{c_s^3} \right\rangle =: \gamma\omega^2,$$

wobei wir beim zweiten Gleichheitszeichen ausgenutzt haben, dass im Integrationsbereich S_ω $\omega_s(\vec{q}) = \omega$ gilt; so haben wir den Integrationsbereich schließlich definiert. Zuletzt haben wir die Abkürzungen

$$\left\langle \frac{1}{c_s^3} \right\rangle := \frac{1}{3} \sum_s \int_{S_\omega} \frac{d\Omega_{\vec{q}}}{4\pi} \frac{1}{c_s^3(\vec{n}_{\vec{q}})}, \quad \gamma := \frac{3V}{2\pi^2} \left\langle \frac{1}{c_s^3} \right\rangle$$

eingeführt.

10.18 Wärmekapazität bei hohen Temperaturen

Für $x_{\vec{q}\alpha} := \beta\omega_{\vec{q}\alpha} \ll 1$ lässt sich die Bose-Einstein-Verteilung wie folgt entwickeln:

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x + x^2/2 + x^3/6 + \mathcal{O}(x^4)} = \frac{1}{x} \cdot \frac{1}{1 + x/2 + x^2/6 + \mathcal{O}(x^3)} \\ &= \frac{1}{x} \left(1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{12}x^2 + \mathcal{O}(x^3) \right). \end{aligned}$$

Mit $kT = \beta^{-1} \Rightarrow k \partial T = -\beta^{-2} \partial \beta$ folgt

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{\partial E}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{e^{\beta\omega_{\vec{q}\alpha}} - 1} \\ &= -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\beta\omega_{\vec{q}\alpha}} \left(1 - \frac{1}{2}\beta\omega_{\vec{q}\alpha} + \frac{1}{12}(\beta\omega_{\vec{q}\alpha})^2 + \mathcal{O}(x^3) \right) \\ &= -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\vec{q}\alpha} \left(\frac{1}{\beta} - \frac{1}{2}\omega_{\vec{q}\alpha} + \frac{1}{12}\beta\omega_{\vec{q}\alpha}^2 + \mathcal{O}(x^3) \right) = -k\beta^2 \sum_{\vec{q}\alpha} \left(-\frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{12}\omega_{\vec{q}\alpha}^2 + \mathcal{O}(x^3) \right) \\ &= k \sum_{\vec{q}\alpha} \left(1 - \frac{1}{12} \frac{\omega_{\vec{q}\alpha}^2}{(kT)^2} + \mathcal{O}(x^3) \right) = 3MNk \left(1 - \frac{1}{12} \frac{1}{(kT)^2} \frac{1}{3MN} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha}^2 + \mathcal{O}(x^3) \right) \\ &= 3MNk \left(1 - \frac{1}{12} \frac{\langle \omega_{\vec{q}\alpha}^2 \rangle}{(kT)^2} + \mathcal{O}(x^3) \right), \end{aligned}$$

wobei wir die Abkürzung

$$\langle \omega_{\vec{q}\alpha}^2 \rangle := \frac{1}{3MN} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha}^2$$

definiert haben. Es gilt $\sum_{\vec{q}\alpha} 1 = 3MN$, da wir aus Abschnitt 10.5 wissen, dass es (in drei Dimensionen) $3M$ Moden α gibt. Außerdem kann \vec{q} so viele verschiedene Werte annehmen, wie es Elementarzellen gibt, also N .

Für Temperaturen kT , die zwar deutlich größer sind, als die Energien $\omega_{\vec{q}s}$ der akustischen Moden, aber deutlich kleiner als die Energien der optischen Moden, werden die optischen Moden nur in vernachlässigbarem Maße angeregt. Somit bleiben dann nur die genau drei akustischen Moden s übrig und man kann $\alpha \rightarrow s$ bzw. $3M \rightarrow 3$ ersetzen.

10.19 Wärmekapazität bei niedrigen Temperaturen

Bei niedrigen Temperaturen werden die hochfrequenten optischen Moden kaum angeregt. Wir können diese also in jedem Fall vernachlässigen. Somit folgt mit $k \partial T = -\beta^{-2} \partial \beta$ aus (>10.18) sowie mit Abschnitt 1.4 (in unserem Fall mit ω statt \mathcal{E})

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{\partial E}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\vec{q}s} \omega_{\vec{q}s} n_{\vec{q}s} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s \int d^3\vec{q} \frac{\omega_{\vec{q}s}}{e^{\beta\omega_{\vec{q}s}} - 1} \\ &= -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty g_{\text{ak}}(\omega) d\omega \frac{\omega}{e^{\beta\omega} - 1} = -\gamma k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\omega} - 1} \end{aligned}$$

Man beachte: Die Summe über s ist verschwunden, weil $g_{\text{ak}}(\omega)$ die Zustandsdichte für alle akustischen Moden zusammen ist.

Man beachte außerdem: Zwar integrieren wir hier bis $\omega \rightarrow \infty$ und somit weit über den Bereich hinaus, indem unsere Näherung der Zustandsdichte $g_{\text{ak}}(\omega) = \gamma\omega^2$ für kleine ω gültig ist. In dem hier betrachteten Grenzfall $\beta\omega \gg 1$ ist dies jedoch kein Problem, da die Beiträge des Integrals für große ω durch die Exponentialfunktion im Nenner stark unterdrückt werden.

Mit der Substitution $x = \beta\omega$ folgt

$$c_V = -\gamma k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{\beta^4} \underbrace{\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{=\frac{\pi^4}{15}} = \gamma k\beta^2 \frac{4}{\beta^5} \frac{\pi^4}{15} = \frac{4\pi^4}{15} \gamma k(kT)^3.$$

10.20 Die Debye-Frequenz

Die Debye-Frequenz ω_D , bei der die Zustandsdichte $g_{\text{ak}}(\omega) = \gamma\omega^2$ abgebrochen wird, das heißt eigentlich

$$g_{\text{ak}}(\omega) = \gamma\omega^2 \theta(\omega_D - \omega),$$

soll so gewählt werden, dass $\sum_{\vec{q}s} 1 = 3N$ gilt (da es immer drei akustische Moden s gibt und N erlaubte Impulse \vec{q} pro Elementarzelle). Die Bedingung ist also, mit Abschnitt 1.4

$$\begin{aligned} 3N &\stackrel{!}{=} \sum_{\vec{q}s} 1 = \sum_s \int d^3\vec{q} = \int_0^\infty d\omega g_{\text{ak}}(\omega) = \gamma \int_0^\infty d\omega \omega^2 \theta(\omega_D - \omega) = \gamma \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 = \frac{1}{3} \gamma \omega_D^3 \\ \Leftrightarrow \quad \omega_D^3 &= \frac{9N}{\gamma} = \frac{6\pi^2 N}{V} \frac{1}{\left(\frac{1}{c_s^3}\right)}, \end{aligned}$$

wobei wir γ aus (>10.17) eingesetzt haben. Man beachte, dass die Summe über s in der Zustandsdichte für alle drei akustischen Moden zusammen g_{ak} aufgeht.

10.21 Wärmekapazität im Debye-Modell

In (>10.19) haben wir die Zustandsdichte $g_{\text{ak}}(\omega) = \gamma\omega^2$ verwendet, um den Grenzfall der Wärmekapazität für kleine Temperaturen zu berechnen. Im Debye-Modell postulieren wir nun $g_D(\omega) = \gamma\omega^2 \theta(\omega_D - \omega)$ für die akustischen Phononen und hoffen damit, die Wärmekapazität über alle Temperaturbereiche gut beschreiben zu können. Die Vorgehensweise ist gleichwohl analog zu (>10.19). Wir müssen nach dem vierten Gleichheitszeichen der Rechnung in (>10.19) lediglich g_{ak} durch g_D ersetzen und im nächsten Schritt mit der θ -Funktion aus g_D die Integrationsgrenzen anpassen:

$$c_V = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^{\omega_D} g_D(\omega) d\omega \underbrace{\frac{d\Omega_{\vec{q}}}{4\pi}}_{=1} \frac{\omega}{e^{\beta\omega} - 1} = -\gamma k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\omega} - 1}.$$

Wenn wir nun, wie in (>10.19), $x := \beta\omega$ substituieren würden, würden wir in der oberen Integralgrenze $\beta\omega_D$ enthalten; wir müssen die Ableitung $\partial/\partial\beta$ also unter anderem auf die Integralgrenze anwenden. Um dies zu vermeiden leiten wir *erst* ab und substituieren *anschließend*:

$$c_V = \gamma k\beta^2 \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3 \omega e^{\beta\omega}}{(e^{\beta\omega} - 1)^2} = \gamma k\beta^2 \frac{1}{\beta^5} \int_0^{\beta\omega_D} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}.$$

Mit der Debye-Temperatur $\Theta_D := \omega_D/k$, sodass $\beta\omega_D = \Theta_D/T$, können wir unser Resultat wie folgt schreiben:

$$c_V = \gamma k(kT)^3 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} = 9Nk \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 f(\Theta_D/T), \quad f(z) := \int_0^z dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2},$$

wobei wir im letzten Schritt $k = \omega_D/\Theta_D$ und $\omega_D^3 = 9N/\gamma$ eingesetzt haben.

Das Debye-Modell schließt die beiden allgemeinen Grenzfälle mit ein; für hohe Temperaturen $T \gg \Theta_D$ folgt ist die obere Integralgrenze in f nahe an der null; es wird also nur über sehr kleine x integriert, sodass wir im Zähler $e^x \approx 1$ und im Nenner $e^x - 1 \approx x$ nähern können:

$$c_V \approx 9Nk \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^4}{x^2} = 3Nk.$$

Dies ist exakt der Beitrag der akustischen Moden zur exakten Wärmekapazität (bis zur nullten Ordnung) bei hohen Temperaturen, wie wir sie in (>10.18) berechnet haben.

Für niedrige Temperaturen $T \ll \Theta_D$ folgt ebenso unser exaktes Resultat für diesen Temperaturbereich aus (>10.19)

$$c_V \approx \gamma k(kT)^3 \underbrace{f(\infty)}_{=4\pi^4/15} = \frac{4\pi^4}{15} \gamma k(kT)^3.$$

10.22 Wärmekapazität im Einstein-Modell

Für Einsteins Postulat $\omega_{\vec{q}\alpha}(\vec{q}) = \omega_E = \text{const}$ folgt mit $k \partial T = -\beta^{-2} \partial \beta$ aus (>10.18)

$$c_V = \frac{\partial E}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{\omega_{\vec{q}\alpha}}{e^{\beta\omega_{\vec{q}\alpha}} - 1} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{\omega_E}{e^{\beta\omega_E} - 1}.$$

Der Summand ist nun von \vec{q}, α unabhängig. Die Summe über \vec{q} hat N Glieder, die über α hat $3M - 3$ Glieder (wobei M die Anzahl an Basisatomen pro Elementarzelle ist); schließlich gilt das Einstein-Modell nur für die $3M - 3$ optischen Moden. Somit folgt

$$c_V = -3(M - 1)Nk\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\omega_E}{e^{\beta\omega_E} - 1} = 3(M - 1)Nk\beta^2 \frac{\omega_E^2 e^{\beta\omega_E}}{(e^{\beta\omega_E} - 1)^2},$$

wobei wir im letzten Schritt die Einstein-Temperatur $\Theta_E := k/\omega_E$ eingeführt haben, sodass wir $\beta\omega_E = \Theta_E/T$ schreiben können:

$$c_V = 3(M - 1)Nk \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2}.$$

Für hohe Temperaturen $T \gg \Theta_E$ können wir die Exponentialfunktion im Nenner als $e^{\Theta_E/T} \approx 1$ und die im Zähler als $e^{\Theta_E/T} - 1 \approx \Theta_E/T$ nähern. Damit finden wir

$$c_V \approx 3(M-1)Nk \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{1}{(\Theta_E/T)^2} = 3(M-1)Nk.$$

Dies ist wiederum genau der Beitrag der akustischen Phononen zur (nullten Ordnung der) exakten Wärmekapazität für hohe Temperaturen aus (>10.18).

Für niedrige Temperaturen können wir die -1 im Nenner vernachlässigen und finden

$$c_V \approx 3(M-1)Nk \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 e^{-\Theta_E/T}.$$

Für $T \rightarrow 0$ dominiert die Exponentialfunktion den Faktor $(\Theta_E/T)^2$; somit fällt c_V hier für $T \rightarrow 0$ mit $\sim e^{-\Theta_E/T}$ ab – deutlich schneller als die akustischen Phononen, für die $c_V \sim T^3$ gilt. Der Beitrag der optischen Phononen ist für kleine Temperaturen gegenüber dem der akustischen Phononen also zu vernachlässigen. Insofern stimmt auch in diesem Grenzfall niedriger Temperaturen das Einstein-Modell mit unserer exakten Rechnung in diesem Temperaturbereich aus (>10.19) überein.

10.23 Differentieller Wirkungsquerschnitt bei Neutronenstreuung

Der Wirkungsquerschnitt lässt sich angeben als

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{d^2}{d\Omega d\omega} \frac{N_f(\Omega, \omega)}{N_i}.$$

Dabei ist $N_f(\Omega, \omega)$ die *Rate* finaler Neutronen und N_i die *Rate* initialer Neutronen. ω ist der Energieübertrag

$$\omega := -(E_f - E_i) = \frac{1}{2M}(p_f^2 - p_i^2)$$

mit Neutronenmasse M und -impulsen p_f, p_i und Kristallenergien E_f, E_i (*nicht* die Neutronenenergien, daher das relative Minus).

Die differentielle *Rate* $d^2N_f(\Omega, \omega)$ der finalen Neutronen, die bei einem bestimmten Energieübertrag ω in einen bestimmten Raumwinkel Ω gestreut werden, hängt nur vom initialen und finalen Zustand bzw. Impuls der Neutronen ab, also $N_f(\Omega, \omega) = N_f(\vec{p}_f, \vec{p}_i)$. Nun kann man Folgendes schreiben:

$$d^2N_f(\Omega, \omega) = d^2N_f(\vec{p}_f, \vec{p}_i) = \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f) V n_i d^3\vec{p}_f.$$

Man beachte dabei Folgendes:

- Die Summe geht über alle initialen und finalen Zustände des Festkörpers.
- $e^{-\beta E_i}/Z$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich der Kristall zu Beginn im Zustand i befindet.
- $W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Festkörper seinen Zustand von i nach f ändert und gleichzeitig der Neutronenimpuls von \vec{p}_i nach \vec{p}_f übergeht.
- n_i ist die initiale Neutronendichte, sodass für die einfallende Rate $N_i = n_i v_i = n_i p_i / M \Leftrightarrow n_i = M N_i / p_i$ gilt.
- $d^3\vec{p}_f$ ist der finale Phasenraum der Neutronen.

Da der initiale Neutronenimpuls fest ist, gilt

$$\omega = \frac{1}{2M}(p_f^2 - p_i^2) \quad \Rightarrow \quad d\omega = \frac{p_f dp_f}{M} \quad \Leftrightarrow \quad dp_f = \frac{M}{p_f} d\omega$$

und somit

$$d^3\vec{p}_f = \frac{d^3p_f}{(2\pi)^3/V} = \frac{p_f^2 dp_f d\Omega}{(2\pi)^3/V} = \frac{Mp_f d\omega d\Omega}{(2\pi)^3/V}.$$

Also folgt

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} &= \frac{1}{N_i} \frac{d^2N_f(\Omega, \omega)}{d\Omega d\omega} = \frac{1}{N_i} \frac{1}{d\Omega d\omega} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f) V n_i \frac{Mp_f d\omega d\Omega}{(2\pi)^3/V} \\ &= \frac{1}{N_i} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f) \frac{VMN_i}{p_i} \frac{Mp_f}{(2\pi)^3/V} = \frac{M^2V^2}{(2\pi)^3} \frac{p_f}{p_i} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f). \end{aligned}$$

10.24 Neutronen-Ionen-Wechselwirkung mit Fermis Goldener Regel

Für ein Wechselwirkungspotential $U(\vec{r}) = U_0 \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$ folgt aus Fermis Goldener Regel

$$W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f) = 2\pi |\langle i, \vec{p}_i | U(\vec{r}) | f, \vec{p}_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \omega).$$

Verwendet man für die Neutronenzustände ebene Wellen, $|\vec{p}_{i,f}\rangle = V^{-1/2} e^{i\vec{p}_{i,f}\vec{r}}$ folgt für das Matrixelement mit $\vec{q} := \vec{p}_f - \vec{p}_i$

$$\langle i, \vec{p}_i | U(\vec{r}) | f, \vec{p}_f \rangle = \frac{U_0}{V} \int d^3r \langle i | e^{i(\vec{p}_f - \vec{p}_i)\cdot\vec{r}} \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n) | f \rangle = \frac{U_0}{V} \sum_n \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} | f \rangle.$$

Setzt man dies in Fermis Goldene Regel ein, erhält man

$$\begin{aligned} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f) &= \frac{2\pi U_0^2}{V^2} \sum_{nm} \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} | f \rangle \langle f | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m} | i \rangle \delta(E_f - E_i + \omega) \\ &= \frac{2\pi U_0^2}{V^2} \sum_{nm} \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} | f \rangle \langle f | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m} | i \rangle \int \frac{dt}{2\pi} e^{i(E_f - E_i + \omega)t} \\ &= \frac{2\pi U_0^2}{V^2} \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} | f \rangle \langle f | e^{iE_f t} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m} e^{-iE_i t} | i \rangle e^{i\omega t} \\ &= \frac{2\pi U_0^2}{V^2} \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} | f \rangle \langle f | e^{iHt} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m} e^{-iHt} | i \rangle e^{i\omega t} \\ &= \frac{2\pi U_0^2}{V^2} \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} | f \rangle \langle f | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m(t)} | i \rangle e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Dabei ist H der Hamilton-Operator mit den Eigenzuständen $|i\rangle$ und $|f\rangle$ und $\vec{r}_m(t)$ ist der Operator \vec{r}_m im Heisenbergbild. In der Formel für den Wirkungsquerschnitt gibt es eine Summe über f und wir können $\sum_f |f\rangle\langle f| = 1$ verwenden:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} &= \frac{M^2V^2}{(2\pi)^3} \frac{p_f}{p_i} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f) \\ &= \left(\frac{MU_0}{2\pi}\right)^2 \frac{p_f}{p_i} \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle i | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m(t)} | i \rangle e^{i\omega t} \\ &= \left(\frac{MU_0}{2\pi}\right)^2 \frac{p_f}{p_i} \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m(t)} \rangle e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Dabei wurde die Definition

$$\langle O \rangle := \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \langle i | O | i \rangle$$

verwendet. $\langle O \rangle$ beschreibt also sowohl das thermodynamische wie auch das quantenmechanische Mittel.

10.25 Strukturfaktor als Korrelationsfunktion der Ionendichte

Für die Ionendichte $\rho(\vec{r}) = \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$ folgt durch Fouriertransformation

$$\rho_{\vec{q}} = \frac{1}{V} \int d^3r \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \sum_n \int d^3r \delta(\vec{r} - \vec{r}_n) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_n}.$$

Also können wir den Strukturfaktor als Integral über eine Korrelationsfunktion solcher Ionendichtefunktionen schreiben:

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m(t)} \rangle e^{i\omega t} = V^2 \int \frac{dt}{2\pi} \langle \rho_{-\vec{q}}(0) \rho_{\vec{q}}(t) \rangle e^{i\omega t}.$$

10.26 Strukturfaktor für ein Atom pro Elementarzelle

Für ein Atom pro Elementarzelle können wir die Ionenposition als $\vec{r}_n = \vec{R}_n + \vec{u}_n$ schreiben. Da wir Phononen betrachten wollen, müssen wir die Auslenkungen \vec{u}_n aus der Ruhelage mitberücksichtigen. Es folgt

$$\begin{aligned} S(\vec{q}, \omega) &= \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n + \vec{u}_n(0))} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_m + \vec{u}_m(t))} \rangle e^{i\omega t} \\ &= \sum_{nm} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_m)} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(0)} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_m(t)} \rangle e^{i\omega t} \\ &= \sum_{nm} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_{n+m})} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(0)} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_{n+m}(t)} \rangle e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt der Summationsindex $m \rightarrow m + n$ verschoben. Aufgrund der Translationsinvarianz des Gitters, hängt $\vec{R}_n - \vec{R}_{n+m}$ nur von m ab, genauso wie der Mittelwert im Integral. Alles ist also n -unabhängig, wir wählen der Einfachheit halber $n = 0$, die Summe über n ergibt uns einen Faktor N (Anzahl der Ionen/Elementarzellen). Mit der Wahl $\vec{R}_0 = 0$ folgt

$$S(\vec{q}, \omega) = N \sum_m e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_m} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_0(0)} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_m(t)} \rangle e^{i\omega t}.$$

10.27 Exponentialrelation aus Wick-Theorem

Die Relation

$$\langle e^{i\varphi_1} e^{-i\varphi_2} \rangle = e^{-2W} e^{\langle \varphi_1 \varphi_2 \rangle}, \quad W := \langle \varphi_1 \varphi_1 + \varphi_2 \varphi_2 \rangle / 4$$

für zwei Feldoperatoren φ_1, φ_2 wird hier ohne Beweis gegeben. Grundsätzlich lässt sich sie aber als Folge des Wick-Theorems verstehen: Eine Entwicklung der Exponentialfunktionen liefert

$$\langle e^{i\varphi_1} e^{-i\varphi_2} \rangle = \sum_{nm} \frac{i^n (-i)^m}{n! m!} \langle \varphi_1^n \varphi_2^m \rangle.$$

Erwartungswerte der Form $\langle \varphi_1^n \varphi_2^m \rangle$ lassen sich gemäß Wick-Theorem immer als Summe von Produkten von Faktoren $\langle \varphi_1 \varphi_1 \rangle$, $\langle \varphi_2 \varphi_2 \rangle$ und $\langle \varphi_1 \varphi_2 \rangle$ schreiben:

$$\langle \varphi_1^n \varphi_2^m \rangle = \sum_l c_{nml} \langle \varphi_1 \varphi_1 \rangle^{\alpha nml} \langle \varphi_2 \varphi_2 \rangle^{\beta nml} \langle \varphi_1 \varphi_2 \rangle^{\gamma nml}.$$

Ein ordentlicher Beweis liefert die Parameter c, α, β, γ derart, dass

$$\langle e^{i\varphi_1} e^{-i\varphi_2} \rangle = e^{-(\varphi_1\varphi_1)/2} e^{-(\varphi_2\varphi_2)/2} e^{\langle\varphi_1\varphi_2\rangle}$$

gilt.

10.28 Berechnung des Debye-Waller-Faktors

Wir wollen nun das W im Debye-Waller-Faktor e^{-2W} berechnen. Da wir hier nur ein Atom pro Elementarzelle haben, fällt der Index über die Basisatome i aus der Formel in Abschnitt 10.3 weg. Sie liest sich in diesem Fall also

$$u_{n\mu} = \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{1}{\sqrt{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}}} \left(e_{\alpha\mu}(\vec{k}) a_{\vec{k}\alpha} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} + e_{\alpha\mu}^*(\vec{k}) a_{\vec{k}\alpha}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \right) =: \sum_{\vec{k}\alpha} \left(c_{n\alpha\mu\vec{k}} a_{\vec{k}\alpha} + c_{n\alpha\mu\vec{k}}^* a_{\vec{k}\alpha}^\dagger \right).$$

Zuletzt haben wir die Koeffizienten der Leiteroperatoren als

$$c_{n\alpha\mu\vec{k}} := \frac{1}{\sqrt{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}}} e_{\alpha\mu}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$$

abgekürzt. Erwartungswerte der Form $\langle aa \rangle$ oder $\langle a^\dagger a^\dagger \rangle$ (mit beliebigen Indizes der Leiteroperatoren) verschwinden. Erwartungswerte der Form $\langle a^\dagger a \rangle$ ergeben die mittlere Anzahl an Teilchen in einem Zustand, der durch die Indizes charakterisiert ist. Dies ist genau die Bose-Einstein-Verteilung n_B . Konkret bedeutet das

$$\langle a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{l}\beta} \rangle = n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \delta_{\vec{k}\vec{l}} \delta_{\alpha\beta}.$$

Wegen der Translationsinvarianz erwarten wir $\langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_n(t))^2 \rangle = \langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_0(0))^2 \rangle$. Wir berechnen also mit $\vec{R}_0 = 0$

$$\begin{aligned} \langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_0)^2 \rangle &= \sum_{\mu\nu} q_\mu q_\nu \langle u_{0\mu} u_{0\nu} \rangle = \sum_{\mu\nu\vec{k}\alpha\vec{l}\beta} q_\mu q_\nu \left((c_{0\alpha\mu\vec{k}} a_{\vec{k}\alpha} + c_{0\alpha\mu\vec{k}}^* a_{\vec{k}\alpha}^\dagger) (c_{0\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{l}\beta} + c_{0\beta\nu\vec{l}}^* a_{\vec{l}\beta}^\dagger) \right) \\ &= \sum_{\mu\nu\vec{k}\alpha\vec{l}\beta} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{0\beta\nu\vec{l}}^* a_{\vec{k}\alpha} a_{\vec{l}\beta}^\dagger + c_{0\alpha\mu\vec{k}}^* c_{0\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{l}\beta} \right) \\ &= \sum_{\mu\nu\vec{k}\alpha\vec{l}\beta} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{0\beta\nu\vec{l}}^* (a_{\vec{l}\beta}^\dagger a_{\vec{k}\alpha} + [a_{\vec{k}\alpha}, a_{\vec{l}\beta}^\dagger]) \right) + c_{0\alpha\mu\vec{k}}^* c_{0\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{l}\beta} \\ &= \sum_{\mu\nu\vec{k}\alpha\vec{l}\beta} q_\mu q_\nu \delta_{\vec{k}\vec{l}} \delta_{\alpha\beta} \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{0\beta\nu\vec{l}}^* (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) + c_{0\alpha\mu\vec{k}}^* c_{0\beta\nu\vec{l}} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \right) \\ &= \sum_{\mu\nu\vec{k}\alpha} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{0\alpha\nu\vec{k}}^* (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) + c_{0\alpha\mu\vec{k}}^* c_{0\alpha\nu\vec{k}} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \right) \\ &= \sum_{\mu\nu\vec{k}\alpha} \frac{q_\mu q_\nu}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \left(e_{\alpha\mu}(\vec{k}) e_{\alpha\nu}^*(\vec{k}) (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) + e_{\alpha\mu}^*(\vec{k}) e_{\alpha\nu}(\vec{k}) n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \right) \\ &= \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \left((n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) + n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \right) = \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} (2n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1). \end{aligned}$$

Mit $\langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_n)^2 \rangle = \langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_0)^2 \rangle$ folgt nun

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{4} \langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_0)(\vec{q} \cdot \vec{u}_0) + (\vec{q} \cdot \vec{u}_n)(\vec{q} \cdot \vec{u}_n) \rangle = \frac{1}{4} \langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_0)^2 + (\vec{q} \cdot \vec{u}_n)^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle (\vec{q} \cdot \vec{u}_n)^2 \rangle \\ &= \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{4Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} (2n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1). \end{aligned}$$

10.29 Nullte Ordnung des Strukturfaktors

Der Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$ enthält den Erwartungswert $\langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_0} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)} \rangle = e^{-2W} e^{\langle (\vec{q}\cdot\vec{u}_0(0))(\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)) \rangle}$. Das W wurde in (>10.28) exakt berechnet. Die zweite Exponentialfunktion entwickelt man nach kleinen Auslenkungen \vec{u}_n . In nullter Ordnung gilt $e^{\dots} = 1$. Somit folgt für die nullte Ordnung des Strukturfaktors

$$S_0(\vec{q}, \omega) = N \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \int \frac{dt}{2\pi} e^{-2W} e^{i\omega t} = N\delta(\omega) e^{-2W} \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}.$$

Wenn \vec{q} irgendeinem reziproken Gittervektor \vec{K} entspricht, gilt $\sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} = \sum_n 1 = N$, ansonsten verschwindet die Summe über n . Also können wir

$$S_0(\vec{q}, \omega) = N^2 \delta(\omega) e^{-2W} \sum_{\vec{K}} \delta_{\vec{q}\vec{K}}$$

schreiben.

10.30 Erste Ordnung des Strukturfaktors

Die erste Ordnung des Strukturfaktor enthält die erste Ordnung der Exponentialfunktion $e^{\langle (\vec{q}\cdot\vec{u}_0(0))(\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)) \rangle}$, also $\langle (\vec{q}\cdot\vec{u}_0(0))(\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)) \rangle$. Da $\vec{u}_n(t)$ ein Heisenberg-Operator ist, sind auch die Leiteroperatoren Heisenberg-Operatoren. Es gilt also

$$\begin{aligned} u_{n\mu}(t) &= \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{1}{\sqrt{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}}} \left(e_{\alpha\mu}(\vec{k}) a_{\vec{k}\alpha}(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} + e_{\alpha\mu}^*(\vec{k}) a_{\vec{k}\alpha}^\dagger(t) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \right) \\ &= \sum_{\vec{k}\alpha} \left(c_{n\alpha\mu\vec{k}} a_{\vec{k}\alpha}(t) + c_{n\alpha\mu\vec{k}}^* a_{\vec{k}\alpha}^\dagger(t) \right), \end{aligned}$$

mit denselben Koeffizienten wie in (>10.28). Über

$$a_{\vec{k}\alpha}(t) = a_{\vec{k}\alpha} e^{-i\omega_{\vec{k}\alpha} t}$$

können wir die Heisenberg-Operatoren wieder durch die Schrödinger-Bild-Operatoren ausdrücken.¹ Damit bekommen wir nun völlig analog zu (>10.28)

¹ Ich verstehe nicht wirklich, warum dies die korrekte Umformung des Operators vom Heisenberg- ins Schrödinger-Bild ist; eigentlich hätte ich eher etwas derart

$$a_{\vec{k}\alpha}(t) = e^{iHt} a_{\vec{k}\alpha} e^{-iHt}$$

mit irgendeinem Hamilton-Operator H erwartet.

$$\begin{aligned}
((\vec{q} \cdot \vec{u}_0(0))(\vec{q} \cdot \vec{u}_n(t))) &= \sum_{\mu\nu} q_\mu q_\nu \langle u_{0\mu} u_{n\nu}(t) \rangle \\
&= \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{\alpha}\vec{\beta}} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} a_{\vec{k}\alpha} + c_{0\alpha\mu\vec{k}} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger \right) \left(c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{l}\beta}(t) + c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{l}\beta}^\dagger(t) \right) \\
&= \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{\alpha}\vec{\beta}} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha} a_{\vec{l}\beta}^\dagger(t) + c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{l}\beta}(t) \right) \\
&= \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{\alpha}\vec{\beta}} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha} a_{\vec{l}\beta}^\dagger e^{i\omega_{\vec{l}\beta}t} + c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{l}\beta} e^{-i\omega_{\vec{l}\beta}t} \right) \\
&= \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{\alpha}\vec{\beta}} q_\mu q_\nu \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}} \left(a_{\vec{l}\beta}^\dagger a_{\vec{k}\alpha} + [a_{\vec{k}\alpha}, a_{\vec{l}\beta}^\dagger] \right) e^{i\omega_{\vec{l}\beta}t} + c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{l}\beta} e^{-i\omega_{\vec{l}\beta}t} \right) \\
&= \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{\alpha}\vec{\beta}} q_\mu q_\nu \delta_{\vec{k}\vec{l}} \delta_{\alpha\beta} \left(c_{0\alpha\mu\vec{k}} c_{n\beta\nu\vec{l}}^* (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) e^{i\omega_{\vec{l}\beta}t} + c_{0\alpha\mu\vec{k}}^* c_{n\beta\nu\vec{l}} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) e^{-i\omega_{\vec{l}\beta}t} \right) \\
&= \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{\alpha}} \frac{q_\mu q_\nu}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \left(e_{\alpha\mu}(\vec{k}) e_{\alpha\nu}^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) e^{i\omega_{\vec{k}\alpha}t} \right. \\
&\quad \left. + e_{\alpha\mu}^*(\vec{k}) e_{\alpha\nu}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) e^{-i\omega_{\vec{k}\alpha}t} \right) \\
&= \sum_{\vec{k}\vec{\alpha}} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) e^{i\omega_{\vec{k}\alpha}t} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) e^{-i\omega_{\vec{k}\alpha}t} \right).
\end{aligned}$$

Für die erste Ordnung des Strukturfaktors bedeutet das

$$\begin{aligned}
S_1 &= N \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \int \frac{dt}{2\pi} e^{-2W} ((\vec{q} \cdot \vec{u}_0(0))(\vec{q} \cdot \vec{u}_n(t))) e^{i\omega t} \\
&= N e^{-2W} \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \int \frac{dt}{2\pi} \sum_{\vec{k}\vec{\alpha}} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \\
&\quad \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) e^{i\omega_{\vec{k}\alpha}t} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) e^{-i\omega_{\vec{k}\alpha}t} \right) e^{i\omega t} \\
&= N e^{-2W} \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \sum_{\vec{k}\vec{\alpha}} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \\
&\quad \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) \delta(\omega + \omega_{\vec{k}\alpha}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \delta(\omega - \omega_{\vec{k}\alpha}) \right).
\end{aligned}$$

Wir können nun die Summe über n in die große Klammer reinziehen und erhalten $\sum_n e^{-i(\vec{q}\pm\vec{k})\cdot\vec{R}_n} = \sum_{\vec{K}} \delta_{\vec{q}\pm\vec{k},\vec{K}}$, da $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} = 1$ für reziproke Gittervektoren \vec{K} gilt. Also folgt

$$\begin{aligned}
S_1 &= N e^{-2W} \sum_{\vec{k}\vec{\alpha}} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{2Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} \\
&\quad \sum_{\vec{K}} \left(\delta_{\vec{q}+\vec{k},\vec{K}} (n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1) \delta(\omega + \omega_{\vec{k}\alpha}) + \delta_{\vec{q}-\vec{k},\vec{K}} n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) \delta(\omega - \omega_{\vec{k}\alpha}) \right).
\end{aligned}$$

Mit den Kronecker-Deltas können wir nun die Summe über \vec{k} auflösen, wir ersetzen also $\vec{k} \rightarrow \mp\vec{q} \pm \vec{K}$. Allerdings sind sämtliche Funktionen von \vec{k} periodisch in den reziproken Elementarzellen. Das $\pm\vec{K}$ spielt daher keine Rolle. Wegen $\omega_{-\vec{q}\alpha} = \omega_{\vec{q}\alpha}$ und $\vec{e}_\alpha(-\vec{q}) = \vec{e}_\alpha^*(-\vec{q})$ (siehe (>10.6)) spielt auch das Voreichen von \vec{q} keine Rolle (man beachte, dass $\vec{e}_\alpha(\pm\vec{q})$ nur im Betrag vorkommt). Die Summe über \vec{K} liefert nun einfach einen Faktor N und wir bekommen

$$S_1 = N e^{-2W} \sum_{\alpha} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{q})|^2}{2m\omega_{\vec{q}\alpha}} \left((n_B(\omega_{\vec{q}\alpha}) + 1) \delta(\omega + \omega_{\vec{q}\alpha}) + n_B(\omega_{\vec{q}\alpha}) \delta(\omega - \omega_{\vec{q}\alpha}) \right).$$

11 ELEKTRON-PHONON-WECHSELWIRKUNGEN

11.1 Dielektrizität als Proportionalitätsfaktor der Potentiale

Einer Fouriertransformation von $\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla\varphi(\vec{r})$ liefert

$$\vec{E}(\vec{q}) = -i\vec{q} \varphi(\vec{q}) \quad \text{und genauso} \quad \vec{D}(\vec{q}) = -i\vec{q} \varphi_{\text{ext}}(\vec{q}).$$

Mit $\vec{D}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) \Rightarrow \vec{D}(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q})\vec{E}(\vec{q})$ folgt also

$$-i\vec{q} \varphi_{\text{ext}}(\vec{q}) = \vec{D}(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q})\vec{E}(\vec{q}) = -i\vec{q} \varepsilon(\vec{q})\varphi(\vec{q}) \quad \Leftrightarrow \quad \varphi_{\text{ext}}(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q}) \varphi(\vec{q}).$$

11.2 Zusammenhang zwischen Dielektrizität und Suszeptibilität

Fouriertransformation von $-\nabla^2\varphi(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r})$ liefert

$$\vec{q}^2 \varphi(\vec{q}) = 4\pi\rho(\vec{q}) \quad \text{und genauso} \quad \vec{q}^2 \varphi_{\text{ext}}(\vec{q}) = 4\pi\rho_{\text{ext}}(\vec{q}).$$

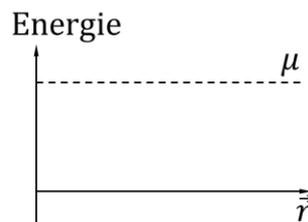
Mit $\rho_{\text{ind}} =: \chi\varphi$ und $\rho := \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}$ folgt somit (im Fourierraum)

$$4\pi\chi\varphi := 4\pi\rho_{\text{ind}} = 4\pi(\rho - \rho_{\text{ext}}) = q^2(\varphi - \varphi_{\text{ext}}) = q^2\varphi(1 - \varepsilon)$$

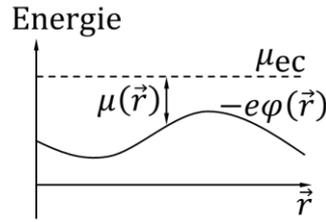
$$\Leftrightarrow \quad \varepsilon = 1 - \frac{4\pi}{q^2}\chi.$$

11.3 Thomas-Fermi-Abschirmung mit elektrochemischem Potential

Man betrachte zunächst ein System ohne externe Ladungen und somit auch ohne induzierte Ladungen. Dann gilt $\varphi(\vec{r}) = 0$. Im Gleichgewicht ist die Elektronendichte in diesem Fall räumlich konstant; sie (genauer: die Anzahl der besetzten Zustände) wird bestimmt vom chemischen Potential μ . Alle Zustände mit Energien $E < \mu$ sind besetzt. Im Gleichgewicht ist μ somit immer räumlich konstant; anderenfalls würden Elektronen an Orte geringeren μ 's abfließen, die dortigen freien Zustände mit $E > \mu$ besetzen und damit μ an diesem Ort anheben, bis μ überall den gleichen Wert hat.



Fügt man nun externe Ladungen ρ_{ext} hinzu, erzeugen diese ein Potential $\varphi(\vec{r})$ bzw. aus Sicht der internen Elektronen mit Ladung $-e$ eine potentielle Energielandschaft $-e\varphi(\vec{r})$. Man beachte, dass für negative externe Ladungen $\varphi < 0$ gilt. Das chemische Potential μ wird nun durch das elektrochemische Potential μ_{ec} ersetzt: Alle Zustände unterhalb von μ_{ec} sind besetzt. Im Gleichgewicht muss also auch μ_{ec} konstant sein. μ_{ec} setzt sich zusammen aus dem Potential $-e\varphi$ der externen Ladungen sowie μ der internen Elektronen: $\mu_{\text{ec}} = \mu - e\varphi$ (siehe Abschnitt 7.6). Die Gesamtanzahl an Elektronen an einem Ort \vec{r} wird nun also durch $\mu(\vec{r})$ bestimmt. Falls *negative* externe Ladungen hinzugefügt wurden ($-e\varphi > 0$), ist das neue μ kleiner als das alte bzw. kleiner als μ_{ec} , denn die neuen negativen Ladungen haben die internen Elektronen verdrängt.



Die Dichte der internen Elektronen am Ort \vec{r} ist nun gegeben durch $n(\mu(\vec{r}))$ mit

$$n(\mu) = \frac{1}{V} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{g(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}.$$

Zuvor lag sich noch bei $n(\mu_{\text{alt}}) = n(\mu_{\text{ec}})$. Die *induzierte interne* Ladung ρ_{ind} durch das Hinzufügen der externen Ladungen ist gegeben durch die Ladungsdichte interner Elektronen vor dem Hintergrund externer Ladungen – also $-e n(\mu)$ – abzüglich der internen Elektronen, die ohne externe Ladungen da wären, also $-e n(\mu_{\text{alt}}) = -e n(\mu_{\text{ec}})$:

$$\rho_{\text{ind}} = -e (n(\mu) - n(\mu_{\text{ec}})).$$

11.4 Berechnung der zusätzlich induzierten Ladungsdichte

Mit $\mu_{\text{ec}} = \mu - e\varphi \Leftrightarrow \mu = \mu_{\text{ec}} + e\varphi$ folgt

$$\rho_{\text{ind}} = -e (n(\mu_{\text{ec}} + e\varphi) - n(\mu_{\text{ec}})) = -e^2 \varphi \frac{n(\mu_{\text{ec}} + e\varphi) - n(\mu_{\text{ec}})}{e\varphi} \approx -e^2 \varphi \frac{\partial n(\mu_{\text{ec}})}{\partial \mu_{\text{ec}}},$$

für $|e\varphi| \ll |\mu_{\text{ec}}|$. Bei $T = 0$ ist die Fermi-Dirac-Verteilung eine Stufenfunktion und es folgt mit $\delta(\mu - \varepsilon) = \delta(\varepsilon - \mu)$

$$\frac{\partial n(\mu_{\text{ec}})}{\partial \mu_{\text{ec}}} = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \mu_{\text{ec}}} \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \theta(\mu_{\text{ec}} - \varepsilon) = \frac{1}{V} \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \mu_{\text{ec}}) = \frac{g(\mu_{\text{ec}})}{V}.$$

11.5 Korrektur des Hamilton-Operators

Etwas konkreter: Mit $U(\vec{r}) = V_{\text{ion}}^{(0)} + \delta V_{\text{ion}}$ folgt

$$\delta H = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma} | \delta V_{\text{ion}} | \psi_{\sigma} \rangle = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \delta V_{\text{ion}}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}),$$

wobei mit δV_{ion}

$$\delta V_{\text{ion}}(\vec{r}) = - \sum_n \vec{u}_n \cdot \nabla V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

gemeint ist.

11.6 Zweite Quantisierung der Korrektur des Hamilton-Operators

In der Formel für δH aus (>11.5) müssen wir nun $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})$, $\psi_{\sigma}(\vec{r})$ und \vec{u}_n durch deren Entwicklung in Leiteroperatoren ersetzen, nämlich

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \phi_{\vec{p}}(\vec{r}) c_{\vec{p}\sigma}$$

mit Vernichtungsoperator $c_{\vec{p}\sigma}$ sowie die Formel aus Abschnitt 10.3 für \vec{u}_n . Beginnen wir zunächst nur mit den elektronischen Feldoperatoren und setzen anschließend die Formel für δV_{ion} ein:

$$\begin{aligned}\delta H &= \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma} | \delta V_{\text{ion}} | \psi_{\sigma} \rangle = \sum_{\sigma \vec{p}_1 \vec{p}_2} \langle \phi_{\vec{p}_2} | \delta V_{\text{ion}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle c_{\vec{p}_2 \sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}_1 \sigma} \\ &= - \sum_{n \sigma \vec{p}_1 \vec{p}_2} \vec{u}_n \cdot \langle \phi_{\vec{p}_2} | \nabla V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) | \phi_{\vec{p}_1} \rangle c_{\vec{p}_2 \sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}_1 \sigma}.\end{aligned}$$

Nun verwenden wir die Formel aus Abschnitt 10.3 für \vec{u}_n . Da wir nur hier ein Atom pro Elementarzelle betrachten, entfällt der Index i aus der dortigen Formel. Statt des Vektor-Indices μ schreiben wir hier Vektorpfeile:

$$\begin{aligned}\vec{u}_n &= \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} \left(\vec{e}_{\alpha}(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} + \vec{e}_{\alpha}^*(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha}^{\dagger} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \right) \\ &= \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} \vec{e}_{\alpha}(\vec{q}) \left(a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha}^{\dagger} \right) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}.\end{aligned}$$

M ist die Ionenmasse, α die Nummer der Mode. Im letzten Schritt haben wir im \dagger -Term den Summationsindex $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ verändert, um die Formel zu vereinfachen, unter Verwendung von $\vec{e}_{\alpha}^*(-\vec{q}) = \vec{e}_{\alpha}(\vec{q})$ aus (>10.6). Einsetzen dieser Formel liefert

$$\begin{aligned}\delta H &= - \sum_{n \sigma \vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \vec{e}_{\alpha}(\vec{q}) \cdot \langle \phi_{\vec{p}_2} | \nabla V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) | \phi_{\vec{p}_1} \rangle \left(a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha}^{\dagger} \right) c_{\vec{p}_2 \sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}_1 \sigma} \\ &= \sum_{\sigma \vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}\alpha} M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}\alpha} \left(a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha}^{\dagger} \right) c_{\vec{p}_2 \sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}_1 \sigma}\end{aligned}$$

mit

$$M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}\alpha} = - \sum_n \frac{1}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \vec{e}_{\alpha}(\vec{q}) \cdot \langle \phi_{\vec{p}_2} | \nabla V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) | \phi_{\vec{p}_1} \rangle$$

Das Matricelement entspricht dabei wie üblich einfach einer Integration über den Raum.

11.7 Fouriertransformation des Potentials

Wir schreiben nun das Potential als Fouriertransformation

$$V_{\text{ion}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} V_{\text{ion}}(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \quad \Rightarrow \quad \nabla V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) = \sum_{\vec{p}} i\vec{p} V_{\text{ion}}(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r} - \vec{R}_n)}.$$

Einsetzen in die Formel für δH aus (>11.6) liefert

$$M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}\alpha} = - \sum_{n \vec{p}} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{p}) e^{i(\vec{q} - \vec{p})\cdot\vec{R}_n}}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} \vec{e}_{\alpha}(\vec{q}) \cdot i\vec{p} \langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle.$$

Den Faktor $e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R}_n}$ aus der Fouriertransformation des Potentials haben wir aus dem Matricelement herausgezogen und mit dem Faktor $e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}$ vereinigt. Nur in diesen beiden Faktoren kommt nun der Index n vor. Wir betrachten daher die Summe

$$\sum_n e^{i(\vec{q} - \vec{p})\cdot\vec{R}_n} = N \sum_{\vec{G} \in \text{rez. Gitt.}} \delta_{\vec{q} - \vec{p}, \vec{G}}.$$

Wegen $\vec{G} \cdot \vec{R}_n = 0$, falls \vec{G} ein reziproker Gittervektor ist, verschwindet diese Summe nur dann nicht, falls $\vec{q} - \vec{p} = \vec{G}$ für einen beliebigen reziproken Gittervektor gilt. Wir nutzen das Kronecker-Delta, um die Summe über \vec{p} zu eliminieren – wir ersetzen also $\vec{p} = \vec{q} - \vec{G} \rightarrow \vec{q} + \vec{G}$ (Umdrehen des Vorzeichens des Summationsindex \vec{G}) – und erhalten

$$M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q} \alpha} = -iN \sum_{\vec{G}} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q} + \vec{G})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} \vec{e}_{\alpha}(\vec{q}) \cdot (\vec{q} + \vec{G}) \langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle.$$

11.8 Matricelement – Umklapp-Prozesse

Schließlich betrachten wir das Matricelement. Wir setzen $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = V^{-1/2} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} u_{\vec{p}}(\vec{r})$ ein¹

$$\langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r u_{\vec{p}_2}^{\dagger}(\vec{r}) u_{\vec{p}_1}(\vec{r}) e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}.$$

Da die Bloch-Funktionen $u_{\vec{p}}(\vec{r})$ periodisch in den Elementarzellen sind, können wir auch über jede Elementarzelle separat integrieren. Mit anderen Worten: Wir schreiben $\vec{r} \rightarrow \vec{R}_n + \vec{r}$, summieren über n und integrieren über \vec{r} . Jeder Summand der n -Summe enthält somit das Integral über eine andere Elementarzelle:

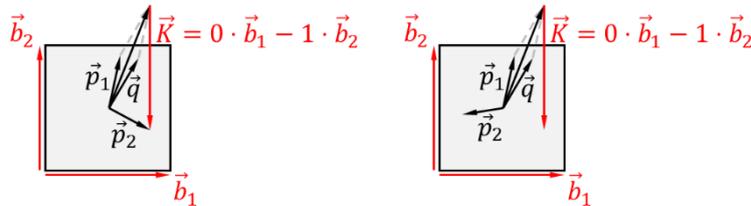
$$\begin{aligned} \langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle &= \frac{1}{V} \sum_n \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\vec{p}_2}^{\dagger}(\vec{R}_n + \vec{r}) u_{\vec{p}_1}(\vec{R}_n + \vec{r}) e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot (\vec{R}_n + \vec{r})} \\ &= \frac{1}{V} \sum_n e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{R}_n} \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\vec{p}_2}^{\dagger}(\vec{r}) u_{\vec{p}_1}(\vec{r}) e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}. \end{aligned}$$

Wie bereits in (>11.7) liefert die Summe

$$\sum_n e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{R}_n} = N \sum_{\vec{K} \in \text{rez.Gitt.}} \delta_{\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}, \vec{K}} = N \sum_{\vec{K} \in \text{rez.Gitt.}} \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}},$$

wobei wir den Summationsindex $\vec{G} - \vec{K} \rightarrow \vec{K}$ geshiftet haben. Dieses Kroncker-Delta liefert Impulserhaltung beim Stoß eines Elektrons mit Impuls \vec{p}_2 (nachher) bzw. \vec{p}_1 (vorher) mit einem Phonon mit Impuls \vec{q} : Also $\vec{p}_2 = \vec{p}_1 + \vec{q}$. Allerdings bis auf einen reziproken Gittervektor \vec{K} .

Die Quasiimpulse \vec{p}_1 , \vec{p}_2 und \vec{q} sind alle drei auf die erste Brillouin-Zone beschränkt. Die Summe $\vec{p}_1 + \vec{q}$ kann allerdings außerhalb der ersten Brillouin-Zone liegen – in diesem Fall muss ein reziproker Gittervektor \vec{K} zu $\vec{p}_1 + \vec{q}$ hinzuaddiert werden, um zurück in die erste Brillouin-Zone zu gelangen (linke Grafik).



Es gibt natürlich immer einen Vektor \vec{K} derart, dass $\vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}$ in der ersten Brillouin-Zone liegt. \vec{K} dieses \vec{K} kann also als Funktion von \vec{p}_1, \vec{q} betrachtet werden.² Natürlich ist es (mathematisch) möglich, dass \vec{p}_2 irgendwo anders in der ersten Brillouin-Zone liegt, also $\vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}(\vec{p}_1, \vec{q})$; dieser Prozess erfüllt dann eben nicht diese quasi-Impulserhaltung und wird vom Kronecker-Delta gerade ausgeschlossen. Streuprozesse mit $\vec{K} \neq 0$ heißen (auch im Englischen) *Umklapp-Prozesse*.

¹ Der Faktor $1/\sqrt{V}$ sorgt dafür, dass die Bloch-Zustände $\phi_{\vec{p}}$ auf 1 normiert sind und nicht auf das Volumen. Siehe dazu auch Abschnitt 1.9.

² Oder als Funktion von \vec{p}_1, \vec{p}_2 sodass $\vec{p}_2 - \vec{p}_1 - \vec{K}$ in der ersten Brillouin-Zone liegt. Oder als Funktion von \vec{p}_2, \vec{q} , sodass $\vec{p}_2 - \vec{q} - \vec{K}$ in der ersten Brillouin-Zone liegt.

Durch die Beschränkung der Quasiimpulse auf die erste Brillouin-Zone kommt also immer nur genau ein \vec{K} in Frage; die Summe $\sum_{\vec{K}} \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}}$ hat also nur ein Glied, das von Null verschieden ist. Wir können also schreiben:

$$N \sum_{\vec{K} \in \text{Erez.Gitt.}} \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}} = N \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}(\vec{p}_1, \vec{q})}.$$

Das Matrixelement hat nun also die Form

$$\langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle = \frac{N}{V} \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}(\vec{p}_1, \vec{q})} \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\vec{p}_2}^\dagger(\vec{r}) u_{\vec{p}_1}(\vec{r}) e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}.$$

11.9 Vereinfachende Annahmen

Wenn wir

- die Umklapp-Prozesse mit $\vec{K} \neq 0$ vernachlässigen (also $\vec{K} = 0$ setzen) und ebenso $\vec{G} = 0$ setzen,
- nur longitudinale Moden mit $\vec{e}_\alpha(\vec{q}) \parallel \vec{q}$ betrachten, sodass der α -Index verschwindet,
- ebene Wellen statt Bloch-Funktionen verwenden, also $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = V^{-1/2} u_{\vec{p}}(\vec{r}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \rightarrow V^{-1/2} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}}$,

erhalten wir nach einsetzen der Formel für das Matrixelement

$$\begin{aligned} M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q} \alpha} &= -\frac{iN^2}{V} \sum_{\vec{G}} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} \vec{e}_\alpha(\vec{q}) \cdot (\vec{q} + \vec{G}) \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}} \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\vec{p}_2}^\dagger(\vec{r}) u_{\vec{p}_1}(\vec{r}) e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \\ &\rightarrow -\frac{iN^2}{V} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}} q \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q}} \int_{\text{EZ}} d^3r e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q}) \cdot \vec{r}} =: M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}}. \end{aligned}$$

Wegen des Kronecker-Deltas können wir im Integral $\vec{p}_2 = \vec{p}_1 + \vec{q}$ einsetzen, wodurch die Exponentialfunktion verschwindet (also zu einem Faktor 1 wird). Dann folgt $\int_{\text{EZ}} d^3r = V_{\text{EZ}} = V/N$ und wir erhalten

$$M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}} = -iN \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}} q \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q}}.$$

Wenn wir dies nun in δH einsetzen, erhalten wir

$$\begin{aligned} \delta H &= \sum_{\substack{\sigma \\ \vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}}} M_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{p}_2 \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1 \sigma} = -iN \sum_{\substack{\sigma \\ \vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}}} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}} q \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{p}_2 \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1 \sigma} \\ &= -iN \sum_{\substack{\sigma \\ \vec{p} \vec{q}}} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}} q (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{p} + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p} \sigma} = \sum_{\substack{\sigma \vec{q} \vec{p}}} M_{\vec{q}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{p} + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p} \sigma} \end{aligned}$$

mit

$$M_{\vec{q}} = -iN \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}} |\vec{q}|.$$

11.10 Zweite Ordnung Störungstheorie

Mit

$$E_0 = \mathcal{E}_{\vec{p}_1} + \mathcal{E}_{\vec{p}_2} = \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}} + \mathcal{E}_{\vec{p}_2 + \vec{q}} = E_2 \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{E}_{\vec{p}_2} - \mathcal{E}_{\vec{p}_2 + \vec{q}} = -(\mathcal{E}_{\vec{p}_1} - \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}}),$$

$$E_1 = \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}} + \mathcal{E}_{\vec{p}_2} + \omega_{\vec{q}}, \quad E'_1 = \mathcal{E}_{\vec{p}_1} + \mathcal{E}_{\vec{p}_2 + \vec{q}} + \omega_{-\vec{q}}$$

folgt

$$\begin{aligned} \frac{|M_{\vec{q}}|^2}{E_0 - E_1} + \frac{|M_{\vec{q}}|^2}{E_0 - E'_1} &= \frac{|M_{\vec{q}}|^2}{\mathcal{E}_{\vec{p}_1} - \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}} - \omega_{\vec{q}}} + \frac{|M_{\vec{q}}|^2}{\mathcal{E}_{\vec{p}_2} - \mathcal{E}_{\vec{p}_2 + \vec{q}} - \omega_{-\vec{q}}} \\ &= |M_{\vec{q}}|^2 \left(\frac{1}{\mathcal{E}_{\vec{p}_1} - \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}} - \omega_{\vec{q}}} + \frac{1}{-(\mathcal{E}_{\vec{p}_1} - \mathcal{E}_{\vec{p}_1 + \vec{q}}) - \omega_{-\vec{q}}} \right) = |M_{\vec{q}}|^2 \frac{2\hbar\omega_{\vec{q}}}{(\mathcal{E}_{\vec{p}_1} - \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}})^2 - \omega_{\vec{q}}^2}, \end{aligned}$$

wobei $\omega_{-\vec{q}} = \omega_{\vec{q}}$ verwendet wurde.

11.11 Elektron-Elektron-Wechselwirkungen auf dem Fermi-See

Für eine Phononen-Dispersionsrelation $\omega_{\vec{q}} = c|\vec{q}|$ mit Schallgeschwindigkeit c folgt die Phononen-Zustandsdichte $g_{\text{ph}}(\omega_{\vec{q}}) \sim \omega_{\vec{q}}^2$, die im Debye-Modell bei $\omega_{\vec{q}} \leq \omega_D$ abgebrochen wird. Wegen der quadratischen Abhängigkeit der Zustandsdichte ist $\omega_{\vec{q}}$ bzw. $|\vec{q}|$ typischerweise nahe an der Debye-Frequenz ω_D bzw. am Debye-Impuls $|\vec{q}_D| = \omega_D/c$. Der Debye-Impuls seinerseits liegt in der Größenordnung von $1/\text{Gitterkonstante}$, ebenso wie der Fermi-Impuls p_F , also gilt

$$|\vec{q}| \sim |\vec{q}_D| \sim p_F.$$

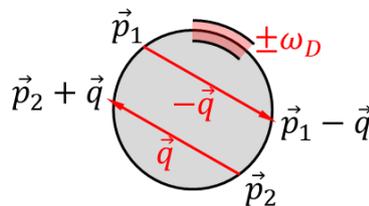
Aus Abschnitt 9.3 bzw. (>9.10) ist bekannt, dass die Elektronenenergie an der Fermi-Oberfläche durch $\mathcal{E}_{\vec{p}} \approx v_F|\vec{p}| \Rightarrow E_F = v_F p_F$ mit Fermi-Geschwindigkeit v_F genähert werden kann. Da für typische Metalle $c \ll v_F$ gilt, folgt

$$\omega_D = c|\vec{q}_D| \sim c p_F \ll v_F p_F = E_F \quad \Leftrightarrow \quad E_F \gg \omega_D > \omega_{\vec{q}}.$$

Die Amplitude für die Phononen-induzierte Wechselwirkung zweier Elektronen ist negativ – also anziehend –, falls

$$|\mathcal{E}_{\vec{p}_1} - \mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}}| < \omega_{\vec{q}} \ll E_F.$$

In einem gefüllten Fermi-See können nur solche Elektronen an Prozessen mit geringen Energiedifferenzen mitwirken, die an der Oberfläche sitzen (um ein Elektron im Inneren des Sees auf den nächstbesten freien Zustand – der außerhalb des Sees liegt – zu heben, ist schließlich eine große Energiedifferenz nötig). Also gilt stets $\mathcal{E}_{\vec{p}_1} \approx E_F$ und wegen obiger Bedingung dann auch $\mathcal{E}_{\vec{p}_1 - \vec{q}} \approx E_F$. Initialer und finaler Zustand liegen also stets in der Nähe der Fermi-Oberfläche. Die Impulsdifferenz $|\vec{q}|$ hingegen ist von der Größenordnung des Fermi-Impulses; typischerweise befördert ein Stoß ein Elektron also von der einen auf ungefähr genau die andere Seite der Fermi-Kugel, wobei die Kugelschale der Dicke $\pm\omega_D$ nicht verlassen wird.



Man beachte, dass die Vektoren \vec{q} und $-\vec{q}$, die die jeweils neuen und alten Impuls der beiden Stoßpartner miteinander verbinden, offensichtlich stets (anti-)parallel sein müssen. Die Stoßpartner sitzen also typischerweise – vorher wie nachher – auf ungefähr entgegengesetzten Seiten des Fermi-Sees.

11.12 Berechnung vom ungestörten Teil des Hamilton-Operators

Berechnen wir zunächst, was der ungestörte Hamilton-Operator H_0 liefert, wenn er auf den Zustand $|\phi\rangle$ angewendet wird:

$$H_0|\phi\rangle = \sum_{\vec{p}'\sigma} \varepsilon_{\vec{p}'} c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma} \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle.$$

Wir wollen die Leiteroperatoren aus H_0 durch jene aus $|\phi\rangle$ durchkommutieren. Beim durchkommutieren von $c_{\vec{p}'\sigma}$ durch $c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger$ ergeben sich drei Terme:

$$\begin{aligned} c_{\vec{p}'\sigma} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger &= \left(\{c_{\vec{p}'\sigma}, c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger\} - c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma} \right) c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger = \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger \\ &= \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger \left(\{c_{\vec{p}'\sigma}, c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger\} - c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma} \right) \\ &= \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \delta_{-\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\sigma\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger + c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma}. \end{aligned}$$

$c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger$ antikommutiert mit jedem anderen Erzeugungsoperator, hier bekommen wir für jedes Durchkommutieren also einfach nur einen Faktor -1 . Wir betrachten zunächst nur den Beitrag vom letzten der drei Terme:

$$\begin{aligned} &\sum_{\vec{p}'\sigma} \varepsilon_{\vec{p}'} c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma} |\phi_0\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger \sum_{\vec{p}'\sigma} \varepsilon_{\vec{p}'} c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma} |\phi_0\rangle = \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger E_{\text{FS}} |\phi_0\rangle \\ &= E_{\text{FS}} |\phi\rangle. \end{aligned}$$

Die ersten beiden Terme liefern

$$\begin{aligned} &\sum_{\vec{p}'\sigma} \varepsilon_{\vec{p}'} c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(\delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \delta_{-\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\sigma\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger \right) |\phi_0\rangle \\ &= \sum_{\vec{p}'\sigma} \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(\varepsilon_{\vec{p}'} \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_1} c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \varepsilon_{\vec{p}'} \delta_{-\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\sigma\sigma_2} c_{\vec{p}'\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger \right) |\phi_0\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(\varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \varepsilon_{-\vec{p}} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger \right) |\phi_0\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(\varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger + \varepsilon_{-\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger \right) |\phi_0\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} 2\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle, \end{aligned}$$

wobei $\varepsilon_{-\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}$ verwendet wurde. Also folgt insgesamt

$$H_0|\phi\rangle = E_{\text{FS}}|\phi\rangle + \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p}\in B} 2\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle.$$

11.13 Berechnung des Wechselwirkungsteils des Hamilton-Operators

Berechnen wir nun, was der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator H_{ee} liefert, wenn er auf den Zustand $|\phi\rangle$ angewendet wird. Wir haben angenommen, dass die Amplitude von der einfachen Form

$$\Lambda_{\vec{p}_1\vec{p}_2\vec{q}} = \begin{cases} -\Lambda, & \text{falls } |\varepsilon_{\vec{p}_{1,2}} - E_{\text{F}}| \ll \omega_D \wedge |\varepsilon_{\vec{p}_{1,2}\pm\vec{q}} - E_{\text{F}}| \ll \omega_D \wedge \text{Energieerhaltung} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

ist. $\Lambda_{\vec{p}_1\vec{p}_2\vec{q}}$ verschwindet also, wenn sich die initialen und finalen Energien nicht innerhalb des Bandes $\pm\omega_D$ um die Fermi-Energie herum befinden. Da wir nur unsere beiden zusätzlichen Elektronen

betrachten wollen – also keine Prozesse von Elektronen aus dem Fermi-See berücksichtigen – müssen die Energien also im Bereich

$$\mathcal{B}: \quad E_F < \mathcal{E}_{\vec{p}} < E_F + \omega_D$$

liegen, damit $\Lambda_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}} \neq 0$ ist. Außerdem haben wir $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2 =: \vec{p}$ angenommen, damit der Impuls des Gesamtsystems verschwindet. Dann folgt

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}\sigma_1\sigma_2\vec{q}} \Lambda_{\vec{p},-\vec{p},\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1} = -\frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{q}\sigma_1\sigma_2\vec{p} \in \mathcal{B}} c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}.$$

Mit diesem Hamilton-Operator bekommen wir

$$H_{ee}|\phi\rangle = -\frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{q}\sigma_1\sigma_2\vec{p}' \in \mathcal{B}} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}'-\vec{q},\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} c_{\vec{p}'\sigma_1} \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle.$$

Erneut wollen wir die Vernichtungsoperatoren aus H_{ee} durch die Erzeugungsoperatoren aus $|\phi\rangle$ durchkommutieren. Dazu benutzen wir zweimal die Formel

$$c_{\vec{p}'\sigma} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger = \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger + c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma},$$

die wir in (>11.12) hergeleitet haben. Damit folgt

$$\begin{aligned} c_{-\vec{p}'\sigma_2} c_{\vec{p}'\sigma_1} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger &= c_{-\vec{p}'\sigma_2} \left(\delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger + c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma_1} \right) \\ &= \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_1} \left(\{c_{-\vec{p}'\sigma_2}, c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger\} - c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} \right) - \delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \left(\{c_{-\vec{p}'\sigma_2}, c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger\} - c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} \right) \\ &\quad + \left(\delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_2\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \delta_{-\vec{p},-\vec{p}'} \delta_{\sigma_2\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger + c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} \right) c_{\vec{p}'\sigma_1} \\ &= \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_1} \left(\delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_2\sigma_2} - c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} \right) - \delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \left(\delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_2\sigma_1} - c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} \right) \\ &\quad + \left(\delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_2\sigma_1} c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger - \delta_{-\vec{p},-\vec{p}'} \delta_{\sigma_2\sigma_2} c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger + c_{\vec{p}\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}\sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}'\sigma_2} \right) c_{\vec{p}'\sigma_1}. \end{aligned}$$

Wenn wir diesen Ausdruck vollständig ausmultiplizieren würden, erhielten wir sieben Terme. Zwei davon enthalten nur je vier Kronecker-Deltas, aber keine Leiteroperatoren. Der Beitrag dieser beiden Terme – eingesetzt in $H_{ee}|\phi\rangle$ – ist gegeben durch

$$\begin{aligned} &-\frac{\Lambda}{2V} \sum_{\vec{q}\sigma_1\sigma_2\vec{p}' \in \mathcal{B}} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}'-\vec{q},\sigma_2}^\dagger \sum_{\sigma_1\sigma_2\vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(\delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_1} \delta_{\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_2\sigma_2} \right. \\ &\quad \left. - \delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{-\vec{p}'\vec{p}} \delta_{\sigma_2\sigma_1} \right) |\phi_0\rangle \\ &= -\frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{q}\sigma_1\sigma_2\vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger - c_{-\vec{p}+\vec{q},\sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}-\vec{q},\sigma_1}^\dagger \right) |\phi_0\rangle \\ &= -\frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{q}\sigma_1\sigma_2\vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \left(c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger + c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger \right) |\phi_0\rangle \\ &= -\Lambda \sum_{\vec{q}\sigma_1\sigma_2\vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle. \end{aligned}$$

Im vorletzten Schritt haben wir im rechten Summanden zunächst $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ gehen lassen und anschließend noch die dortigen Erzeugungsoperatoren (anti-)kommutiert.

Die übrigen fünf Terme haben alle einen Vernichtungsoperator ganz rechts stehen, der dann direkt auf $|\phi_0\rangle$ wirken kann. $|\phi_0\rangle$ beschreibt nur die Elektronen im Innern des Fermi-Sees und die Vernichtungsoperatoren, die ganz rechts stehen, sind entweder von der Form $c_{\vec{p}'\sigma_1}$ oder $c_{-\vec{p}'\sigma_1}$, wobei $\vec{p}', -\vec{p}' \in \mathcal{B}$ liegt – also außerhalb des Fermi-Sees. Somit ergibt $c_{\vec{p}'\sigma_1} |\phi_0\rangle = c_{-\vec{p}'\sigma_1} |\phi_0\rangle = 0$.

Aus der Energieerhaltung des Stoßes folgt, dass auch $\vec{p}' + \vec{q}$ (und aufgrund der Symmetrie damit automatisch auch $-(\vec{p}' + \vec{q})$) in \mathcal{B} liegen muss. In unserer Formel der einzigen beitragenden Terme zu $H_{ee}|\phi\rangle$ summieren wir am Ende sowohl über \vec{q} als auch über \vec{p} . Stattdessen können wir auch über $\vec{p}' := \vec{p} + \vec{q} \in \mathcal{B}$ summieren:

$$H_{ee}|\phi\rangle = -\Lambda \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \vec{p} \in \mathcal{B}, \vec{p}' \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}' \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}' \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle.$$

11.14 Lösen der Schrödinger-Gleichung

Setzen wir die Ergebnisse für $H_0|\phi\rangle$ und $H_{ee}|\phi\rangle$ die Formel für $|\phi\rangle$ bei $E|\phi\rangle$ in die Schrödinger-Gleichung

$$(H_0 + H_{ee})|\phi\rangle = (E_{FS} + E)|\phi\rangle$$

ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \vec{p} \in \mathcal{B}} 2\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \mathcal{E}_{\vec{p}} c_{\vec{p} \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p} \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle - \Lambda \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \vec{p}' \in \mathcal{B}, \vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}', \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p} \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p} \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle \\ & = E \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p} \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p} \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle, \end{aligned}$$

wobei wir die Bezeichnungen der Summationsindizes in der Formel für $H_{ee}|\phi\rangle$ getauscht haben: $\vec{p} \leftrightarrow \vec{p}'$. Wir machen nun den Ansatz $\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) = \alpha(\vec{p}) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$. Wenn wir diesen einsetzen, kommt in jedem der drei obigen Terme in identischer Weise die Summe über $\sigma_1, \sigma_2, \vec{p}$ vor, ebenso wie χ , die Leiteroperatoren und $|\phi_0\rangle$. Wenn man dies alles rausstreicht, bleibt nur

$$2 \alpha(\vec{p}) \mathcal{E}_{\vec{p}} - \Lambda \sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} \alpha(\vec{p}') = E \alpha(\vec{p}) \quad \Leftrightarrow \quad \alpha(\vec{p}) = \frac{\Lambda}{2\mathcal{E}_{\vec{p}} - E} \sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} \alpha(\vec{p}')$$

übrig.

11.15 Bindungsenergie von Cooper-Paar

Wir definieren folgende Konstante C und setzen die Formel für α in die Summe ein:

$$C := \sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} \alpha(\vec{p}') = \sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} \frac{\Lambda}{2\mathcal{E}_{\vec{p}} - E} \underbrace{\sum_{\vec{p}'' \in \mathcal{B}} \alpha(\vec{p}'')}_{=C} = \sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} \frac{\Lambda C}{2\mathcal{E}_{\vec{p}} - E}.$$

Die Summe schreiben wir als Integral (siehe Abschnitt 1.4) und wir erhalten

$$\begin{aligned} C &= \int_{\vec{p} \in \mathcal{B}} d^3\vec{p} \frac{\Lambda C}{2\mathcal{E}_{\vec{p}} - E} = \int_{E_F}^{E_F + \omega_D} d\mathcal{E} \underbrace{g(\mathcal{E})}_{\approx g(E_F)} \frac{\Lambda C}{2\mathcal{E} - E} = \Lambda C g(E_F) \left[\frac{1}{2} \ln(2\mathcal{E} - E) \right]_{E_F}^{E_F + \omega_D} \\ &= \frac{\Lambda C g(E_F)}{2} \ln \frac{2E_F + 2\omega_D - E}{2E_F - E} \\ \Leftrightarrow \quad E &= 2E_F - \frac{2\omega_D}{e^{2/\Lambda g(E_F)} - 1} \approx 2E_F - 2\omega_D e^{-2/\Lambda g(E_F)} =: 2E_F - 2\Delta, \end{aligned}$$

wobei verwendet wurde, dass typischerweise Λ sehr klein ist, also auch $\Lambda g(E_F) \ll 1$ gilt.

11.16 Spin-Singulett-Zustand

Aus der Gleichung für $\alpha(\vec{p})$, dem Ergebnis von (>11.14), folgt wegen $\mathcal{E}_{\vec{p}} = \mathcal{E}_{-\vec{p}}$, dass der Impulsanteil der Wellenfunktion symmetrisch ist:

$$\alpha(\vec{p}) = \alpha(-\vec{p}).$$

Die Symmetrie bzgl. $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ ist gerade dieselbe Symmetrie wie die Symmetrie des Vertauschens der beiden Elektronen des Cooper-Paares, die ja Impuls \vec{p} und $-\vec{p}$ haben. Da $\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2)$ zwei Fermionen beschreibt, ist ψ antisymmetrisch unter Vertauschung der beiden Teilchen:

$$\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) = -\psi(-\vec{p}, \sigma_2, \sigma_1) \quad \Leftrightarrow \quad \alpha(\vec{p}) \chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\alpha(-\vec{p}) \chi(\sigma_2, \sigma_1)$$

$$\Leftrightarrow \quad \chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1).$$

Also folgt, dass die beiden Elektronen einen Singulett-Zustand

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

bilden. Die Elektronen haben also in jedem Fall entgegengesetzte Spins.

12 BCS-THEORIE

12.1 Hamilton-Operator in BCS-Theorie

Wir nutzen im Prinzip den Hamilton-Operator der effektiven Phononen-induzierten Elektron-Elektron-Wechselwirkung aus Abschnitt 11.3,

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \sigma_1, \sigma_2, \vec{q}} \Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}} c_{\vec{p}_1 + \vec{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\vec{p}_2 - \vec{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma_2} c_{\vec{p}_1, \sigma_1}.$$

Wie beim Cooper-Problem in Abschnitt 11.4 bzw. (>11.13) nehmen wir eine vereinfachte Form von $\Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}}$ sowie $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2 =: \vec{p}$ an, sodass wir

$$H_{ee} = -\frac{\Lambda}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \vec{q}, \vec{p} \in \mathcal{B}} c_{\vec{p} + \vec{q}, \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p} - \vec{q}, \sigma_2}^\dagger c_{-\vec{p}, \sigma_2} c_{\vec{p}, \sigma_1}.$$

Wie in (>11.13) erläutert, ist mit \mathcal{B} der Bereich $E_F < \mathcal{E}_{\vec{p}} < E_F + \omega_D$ gemeint.

Zusätzlich nehmen wir nun in der BCS-Theorie noch $\sigma_1 = -\sigma_2 =: \sigma$ an (da die anderen Beiträge in Matrixelementen mit unserem späteren |BCS>-Zustand nicht beitragen würden) und erhalten

$$H_{ee} = -\frac{\Lambda}{2} \sum_{\sigma, \vec{q}, \vec{p} \in \mathcal{B}} c_{\vec{p} + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{-\vec{p} - \vec{q}, -\sigma}^\dagger c_{-\vec{p}, -\sigma} c_{\vec{p}, \sigma} = -\Lambda \sum_{\vec{q}, \vec{p} \in \mathcal{B}} c_{\vec{p} + \vec{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{p} - \vec{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}, \downarrow} c_{\vec{p}, \uparrow}.$$

Zuletzt führen wir noch den Impuls $\vec{p}' := \vec{p} + \vec{q}$ ein, der aufgrund der Energieerhaltung auch innerhalb von \mathcal{B} liegen muss (genauso, wie wir es bereits am Ende von (>11.13) getan haben):

$$H_{ee} = -\Lambda \sum_{\vec{p}, \vec{p}' \in \mathcal{B}} c_{\vec{p}', \uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}', \downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}, \downarrow} c_{\vec{p}, \uparrow}.$$

Dies ist der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator; zusätzlich müssen wir noch die Energie der Teilchen an sich (ohne Wechselwirkungen) berücksichtigen; sie beträgt im Großkanonischen Ensemble

$$H_0 = \sum_{\vec{p}, \sigma} \xi_{\vec{p}} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma}, \quad \xi_{\vec{p}} := \mathcal{E}_{\vec{p}} - \mu.$$

12.2 Normierung des BCS-Zustands

Um (die Eigenschaften von) $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ zu bestimmen, wollen wir zunächst die Bedingung benutzen, dass der |BCS>-Zustand normiert sein sollte. Man beachte, dass man beim <BCS|-Bra-Zustand, den Zustand daggern muss, was eine Vertauschung der Reihenfolge der Leiteroperatoren einschließt:

$$1 \stackrel{!}{=} \langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{\vec{p}_2} (u_{\vec{p}_2}^* + v_{\vec{p}_2}^* c_{-\vec{p}_2, \downarrow} c_{\vec{p}_2, \uparrow}) \prod_{\vec{p}_1} (u_{\vec{p}_1} + v_{\vec{p}_1} c_{\vec{p}_1, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1, \downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle.$$

Ein Paar Vernichtungsoperatoren kommutiert mit einem Paar Erzeugungsoperatoren, insofern die Impulse unterschiedliche sind (einzeln antikommutieren sie, sodass Paare kommutieren):

$$c_{-\vec{p}_2, \downarrow} c_{\vec{p}_2, \uparrow}^\dagger c_{\vec{p}_1, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1, \downarrow} = c_{\vec{p}_1, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1, \downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}_2, \downarrow} c_{\vec{p}_2, \uparrow} \quad \text{für} \quad \vec{p}_1 \neq \pm \vec{p}_2.$$

Da für $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2$ die Spins der beiden Paare mit gleichem Impuls unterschiedlich sind, gilt diese Formel auch für $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2$:

$$c_{-\vec{p}_2, \downarrow} c_{\vec{p}_2, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_2, \uparrow}^\dagger c_{\vec{p}_2, \downarrow} = c_{-\vec{p}_2, \uparrow}^\dagger c_{\vec{p}_2, \downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}_2, \downarrow} c_{\vec{p}_2, \uparrow}.$$

Die beiden runden Klammern in unserer obigen Formel für $\langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle$ vertauschen somit, insofern $\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2$ ist. Wir können nun aus den zwei Produkten der Art $1234 \dots 1234 \dots$ ein einziges der Form $11223344 \dots$ machen, ohne jemals zwei gleiche Zahlen aneinander vorbei zu tauschen:

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{\vec{p}} (u_{\vec{p}}^* + v_{\vec{p}}^* c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) (u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle \\ &= \left\langle 0 \left| \prod_{\vec{p}} (|u_{\vec{p}}|^2 + u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger + v_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} + |v_{\vec{p}}|^2 c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle. \end{aligned}$$

Die beiden mittleren Summanden der runden Klammer erzeugen bzw. vernichten zwei Teilchen mit Impuls \vec{p} und Spin \uparrow sowie mit Impuls $-\vec{p}$ und Spin \downarrow . Damit deren Beiträge nicht verschwinden, müssten diese Teilchen von Leiteroperatoren aus den anderen Faktoren wieder vernichtet werden bzw. bereits zuvor erzeugt worden sein. Da die anderen Faktoren aber nur Teilchen anderer Impulse (genauer: Impuls-Spin-Kombinationen) erzeugen, kann beispielsweise ein Teilchen, das von diesem Faktor erzeugt wurde, von keinem der anderen Faktoren wieder vernichtet werden. Die beiden mittleren Terme tragen somit nicht bei:

$$1 \stackrel{!}{=} \langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{\vec{p}} (|u_{\vec{p}}|^2 + |v_{\vec{p}}|^2 c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle.$$

Nun gilt $c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger |0\rangle = |0\rangle$. Im Faktor ganz rechts kann man also gleich die Leiteroperatoren durch eine 1 ersetzen. Anschließend kann man diesen Faktor aus dem Matrixelement rausziehen, da er keine Operatoren mehr enthält. Dann wiederholt man diese Prozedur mit dem nächst-rechtesten Faktor usw. Schließlich erhält man

$$1 \stackrel{!}{=} \langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle = \prod_{\vec{p}} (|u_{\vec{p}}|^2 + |v_{\vec{p}}|^2).$$

Da H_{ee} symmetrisch bzgl. verschiedener Impulse ist und da es einfach auch die einfachste Annahme ist, wollen wir diejenige Lösung für $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ weiterverfolgen, für die die Faktoren *einzel*n 1 ergeben. Zudem wollen wir annehmen, dass $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ reell sind, also

$$u_{\vec{p}}^2 + v_{\vec{p}}^2 = 1.$$

12.3 Matrixelement des ungestörten Hamilton-Operators

$c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}$ sind die Operatoren, die im ungestörten Teil des Hamilton-Operators auftauchen, also berechnen wir (man beachte, dass wir in (>12.2) zuletzt $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}} \in \mathbb{R}$ angenommen haben)

$$\langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} | \text{BCS} \rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{\vec{p}_2} (u_{\vec{p}_2} + v_{\vec{p}_2} c_{-\vec{p}_2\downarrow} c_{\vec{p}_2\uparrow}) (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}) \prod_{\vec{p}_1} (u_{\vec{p}_1} + v_{\vec{p}_1} c_{\vec{p}_1\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1\downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle.$$

Untersuchen wir wieder die Kommutationseigenschaften der Paare von Leiteroperatoren. Es gilt¹

$$c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}_1\uparrow}^{(\dagger)} c_{-\vec{p}_1\downarrow}^{(\dagger)} = c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}_1\uparrow}^{(\dagger)} c_{-\vec{p}_1\downarrow}^{(\dagger)} \quad \text{für} \quad \vec{p}_1 \neq \pm \vec{p}.$$

Im Fall von $\vec{p}_1 = \vec{p}$ gilt die Kommutation nur, falls der Spin der aus dem Hamilton-Operator stammenden Leiteroperatoren \downarrow ist. Im Fall $\vec{p}_1 = -\vec{p}$ gilt Kommutation nur, falls der aus dem Hamilton-Operator stammenden Leiteroperatoren \uparrow ist:

$$\begin{aligned} \vec{p}_1 = -\vec{p} & \quad \text{bzw.} \quad \vec{p}_1 \neq \vec{p}: & c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger &= c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} \\ \vec{p}_1 = \vec{p} & \quad \text{bzw.} \quad \vec{p}_1 \neq -\vec{p}: & c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger &= c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} \end{aligned}$$

Dies können wir zusammenfassen zu

¹ Mit der Notation (\dagger) ist gemeint, dass es unerheblich ist, ob an dieser Stelle ein \dagger steht oder nicht.

$$c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}_1\uparrow}^{(+)} c_{-\vec{p}_1\downarrow}^{(+)} = c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}_1\uparrow}^{(+)} c_{-\vec{p}_1\downarrow}^{(+)} \quad \text{für} \quad \vec{p}_1 \neq \pm\vec{p},$$

wobei das + -Zeichen zu Spin \uparrow und das - Zeichen zu Spin \downarrow gehört. Alle Faktoren im obigen Matrixelement mit Impulsen \vec{p}_1 und \vec{p}_2 , die nun ungleich $\pm\vec{p}$ sind, kommutieren mit $c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow}$. Wir können diese Faktoren daher komplett von den anderen trennen und in ein eigenes Matrix-Element schreiben:

$$\begin{aligned} & \langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle \\ &= \langle 0 | \prod_{\vec{p}_2 \neq \pm\vec{p}} (u_{\vec{p}_2} + v_{\vec{p}_2} c_{-\vec{p}_2\downarrow} c_{\vec{p}_2\uparrow}) \prod_{\vec{p}_1 = \pm\vec{p}} (u_{\vec{p}_1} + v_{\vec{p}_1} c_{\vec{p}_1\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle \\ & \cdot \langle 0 | (u_{\pm\vec{p}} + v_{\pm\vec{p}} c_{\mp\vec{p}\downarrow} c_{\pm\vec{p}\uparrow}) (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow}) (u_{\pm\vec{p}} + v_{\pm\vec{p}} c_{\pm\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\mp\vec{p}\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle. \end{aligned}$$

Mit exakt derselben Rechnung wie in (>12.2) erhalten wir für das erste dieser beiden Matrixelemente nun

$$\langle 0 | \prod_{\vec{p}_2 \neq \pm\vec{p}} (u_{\vec{p}_2} + v_{\vec{p}_2} c_{-\vec{p}_2\downarrow} c_{\vec{p}_2\uparrow}) \prod_{\vec{p}_1 = \pm\vec{p}} (u_{\vec{p}_1} + v_{\vec{p}_1} c_{\vec{p}_1\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = \prod_{\vec{p}' \neq \pm\vec{p}} \underbrace{(u_{\vec{p}'}^2 + v_{\vec{p}'}^2)}_{=1} = 1,$$

wobei wir uns zunutze machen, dass wir in (>12.2) angenommen haben, dass die Faktoren $|u_{\vec{p}'}|^2 + |v_{\vec{p}'}|^2$ individuell 1 ergeben und dass $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}} \in \mathbb{R}$ sind.

Im zweiten verbleibenden Matrixelement fallen die $u_{\pm\vec{p}}$ -Terme ebenfalls weg, da wir durch sie $c_{\vec{p}\uparrow}$ nach rechts und $c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger$ nach links durchkommutieren können, wo sie dann auf das Vakuum $|0\rangle$ bzw. $\langle 0|$ treffen und verschwinden. Also bleibt nur

$$\begin{aligned} & \langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle = \langle 0 | v_{\pm\vec{p}} c_{\mp\vec{p}\downarrow} c_{\pm\vec{p}\uparrow} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow}) v_{\pm\vec{p}} c_{\pm\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\mp\vec{p}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle \\ &= v_{\pm\vec{p}}^2 \langle 0 | c_{\mp\vec{p}\downarrow} c_{\pm\vec{p}\uparrow} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow}) c_{\pm\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\mp\vec{p}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle = v_{\pm\vec{p}}^2. \end{aligned}$$

Dass das Matrixelement hier 1 ergibt, sieht man am besten, indem man es sich für die beiden unterschiedlichen Spin-Konfigurationen $\uparrow\downarrow$ getrennt ansieht. Man beachte, dass im \uparrow -Fall jeweils das obere Vorzeichen und im \downarrow -Fall jeweils das untere zu wählen ist:

$$\text{Spin } \uparrow: \quad \langle 0 | c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow}) c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} | 0 \rangle = 1,$$

$$\text{Spin } \downarrow: \quad \langle 0 | c_{\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\uparrow} (c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}) c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} | 0 \rangle = 1.$$

Es ergeben sich drei Paare zu je einem Erzeugungs- und Vernichtungsoperator, die jeweils das gleiche Teilchen erzeugen bzw. vernichten.

12.4 Matrixelement des wechselwirkenden Hamilton-Operators

$c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}$ sind die Operatoren, die im Wechselwirkungsteil des Hamilton-Operators auftauchen, also berechnen wir (man beachte, dass wir in (>12.2) zuletzt $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}} \in \mathbb{R}$ angenommen haben)

$$\begin{aligned} & \langle \text{BCS} | c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle \\ &= \langle 0 | \prod_{\vec{p}_2} (u_{\vec{p}_2} + v_{\vec{p}_2} c_{-\vec{p}_2\downarrow} c_{\vec{p}_2\uparrow}) (c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) \prod_{\vec{p}_1} (u_{\vec{p}_1} + v_{\vec{p}_1} c_{\vec{p}_1\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}_1\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle. \end{aligned}$$

Wir nehmen bei der folgenden Rechnung stets $\vec{p} \neq \vec{p}'$ an, da $\vec{p} = \vec{p}'$ bedeuten würde, dass gar keine Wechselwirkung stattgefunden hat. Die Gruppe der Leiteroperatoren aus der mittleren Klammer

kommutiert nun mit den beiden Leiteroperatoren aus den beiden äußeren Klammern, insofern $\vec{p}_2, \vec{p}_1 \neq \vec{p}, \vec{p}'$ sind (mit derselben Argumentation wie in (>12.2) und (>12.3)). Aus den Produkten über \vec{p}_1 und \vec{p}_2 können wir also alle Impulse ungleich \vec{p}, \vec{p}' herausziehen und genauso wie in (>12.3) in ein eigenes Matrixelement stecken, dass aufgrund der Normierungsbedingung aus (>12.2) eine 1 ergibt. Somit bleibt nur

$$\begin{aligned} & \left\langle \text{BCS} \left| c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} \right| \text{BCS} \right\rangle \\ &= \left\langle 0 \left| (u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) (u_{\vec{p}'} + v_{\vec{p}'} c_{-\vec{p}'\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow}) (c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) (u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) (u_{\vec{p}'} + v_{\vec{p}'} c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle \end{aligned}$$

übrig. Wir kürzen die fünf Klammern im Matrixelement schematisch ein wenig ab und multiplizieren alle Klammern aus: Wir erhalten $2^4 = 16$ Terme:

$$\begin{aligned} & (a_u + a_v)(a'_u + a'_v)(m)(b_u + b_v)(b'_u + b'_v) \\ &= a_u a'_u(m) b_u b'_u + a_u a'_u(m) b_u b'_v + a_u a'_u(m) b_v b'_u + a_u a'_u(m) b_v b'_v + a_u a'_v(m) b_u b'_u \\ &+ a_u a'_v(m) b_u b'_v + a_u a'_v(m) b_v b'_u + a_u a'_v(m) b_v b'_v + a_v a'_u(m) b_u b'_u + a_v a'_u(m) b_u b'_v \\ &+ a_v a'_u(m) b_v b'_u + a_v a'_u(m) b_v b'_v + a_v a'_v(m) b_u b'_u + a_v a'_v(m) b_u b'_v + a_v a'_v(m) b_v b'_u \\ &+ a_v a'_v(m) b_v b'_v. \end{aligned}$$

Oben sind alle Terme **rot** markiert, in denen rechts zwei b 's (also b oder b') stehen, die beide den Index u haben. b 's mit Index u enthalten keine Leiteroperatoren, sodass in diesen Fällen die Vernichtungsoperatoren aus der mittleren Klammer (m) direkt auf das Vakuum treffen. Diese Terme verschwinden daher.

Es verschwinden ebenso alle **blauen** Terme, in denen die Anzahl an Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ungleich ist; solche Terme ergeben in einem Vakuum-Matrixelement sicherlich null. Das sind also all jene, bei denen die Anzahl der a 's mit Index v ungleich der Anzahl b 's mit Index v ist.

Die beiden **grünen** Terme verschwinden ebenso, denn sie enthalten rechts von (m) keine Erzeuger von ungestrichenen Impulsen \vec{p} ; sie enthalten also nur b'_v , aber kein b_v ohne Strich. Dies wäre aber nötig, da in (m) ungestrichene Vernichtungsoperatoren stehen.

Aus dem analogen Grund verschwindet der **violette** Term: Er enthält links von (m) keine Vernichter mit gestrichenen Impulsen \vec{p}' , also nur a_v , aber kein a'_v . Dies wäre aber nötig, da in (m) gestrichene Erzeugungsoperatoren stehen.

Somit bleiben zwei Terme übrig. In dem ersten finden sich drei Paare von passenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, sodass dieser Term nicht verschwindet:

$$a_u a'_v(m) b_v b'_u \hat{=} \left\langle 0 \left| (u_{\vec{p}}) (v_{\vec{p}'} c_{-\vec{p}'\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow}) (c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) (v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) (u_{\vec{p}'}) \right| 0 \right\rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'}$$

Der letzte Term verschwindet ebenso, denn hier gibt es zwei Erzeuger eines Teilchens mit Impuls $-\vec{p}'$ und Spin \downarrow , aber nur einen solchen vernichte:

$$a_v a'_v(m) b_v b'_v \hat{=} \left\langle 0 \left| (v_{\vec{p}} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) (v_{\vec{p}'} c_{-\vec{p}'\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow}) (c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) (v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) (v_{\vec{p}'} c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger) \right| 0 \right\rangle = 0.$$

Also gilt für $\vec{p} \neq \vec{p}'$

$$\left\langle \text{BCS} \left| c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} \right| \text{BCS} \right\rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'}$$

12.5 Energie des BCS-Zustands

Aus den zuvor in (>12.3) bzw. (>12.4) berechneten Matrixelementen

$$\langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle = v_{\pm\vec{p}}^2, \quad \langle \text{BCS} | c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'},$$

folgt für den Hamilton-Operator (man beachte, dass hier die Spin-Summe ausgeführt wurde)

$$H_G = \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} + c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}) - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}$$

das Matrixelement

$$\begin{aligned} \langle \text{BCS} | H_G | \text{BCS} \rangle &= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} \left(\langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle + \langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} | \text{BCS} \rangle \right) \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} \langle \text{BCS} | c_{\vec{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle \\ &= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (v_{\vec{p}}^2 + v_{-\vec{p}}^2) - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'} = 2 \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^2 - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'}, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt unter Ausnutzung von $\mathcal{E}_{\vec{p}} = \mathcal{E}_{-\vec{p}}$ der Summationsindex $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ vertauscht wurde.

12.6 Variationsprinzip

Gemäß dem Variationsprinzip wollen wir nun E_{BCS} bzgl. unseres Parameters $\phi_{\vec{p}}$ minimieren (man erinnere sich an $u_{\vec{p}} = \cos \phi_{\vec{p}}$, $v_{\vec{p}} = \sin \phi_{\vec{p}}$). Dazu lösen wir die Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial E_{\text{BCS}}}{\partial \phi_{\vec{p}}} = 2 \sum_{\vec{p}'} \xi_{\vec{p}} \frac{\partial}{\partial \phi_{\vec{p}}} v_{\vec{p}'}^2 - \Lambda \sum_{\vec{p}'\vec{p}'' \in \mathcal{B}} \frac{\partial}{\partial \phi_{\vec{p}}} (u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} u_{\vec{p}''} v_{\vec{p}''}) \\ &= 4 \sum_{\vec{p}'} \xi_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} \underbrace{\frac{\partial v_{\vec{p}'}}{\partial \phi_{\vec{p}}}}_{=\delta_{\vec{p}\vec{p}'} u_{\vec{p}}} \\ &\quad - \Lambda \sum_{\vec{p}'\vec{p}'' \in \mathcal{B}} \left(-v_{\vec{p}'} \delta_{\vec{p}\vec{p}'} v_{\vec{p}''} u_{\vec{p}''} v_{\vec{p}''} + u_{\vec{p}'} u_{\vec{p}''} \delta_{\vec{p}\vec{p}'} u_{\vec{p}''} v_{\vec{p}''} - u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}''} \delta_{\vec{p}\vec{p}''} v_{\vec{p}''} \right. \\ &\quad \left. + u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} u_{\vec{p}''} \delta_{\vec{p}\vec{p}''} v_{\vec{p}''} \right) \\ &= 4 \xi_{\vec{p}} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}} - \Lambda \sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} \left(-v_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} + u_{\vec{p}} u_{\vec{p}'} u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} - u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}} v_{\vec{p}} + u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} u_{\vec{p}} u_{\vec{p}} \right) \\ &= 4 \xi_{\vec{p}} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}} - 2(u_{\vec{p}}^2 - v_{\vec{p}}^2) \Lambda \underbrace{\sum_{\vec{p}' \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'}}_{=:\Delta}. \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Konstante $\Delta := \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}$ definiert. Diese Gleichung hat nun die trivialen Lösungen $u_{\vec{p}} = 0 \Rightarrow \Delta = 0$ oder $v_{\vec{p}} = 0 \Rightarrow \Delta = 0$; darunter ist auch einfach ein voller Fermi-See mit $u_{\vec{p}} = 0, v_{\vec{p}} = 1$ für $\xi_{\vec{p}} < 0$ und $u_{\vec{p}} = 1, v_{\vec{p}} = 0$ für $\xi_{\vec{p}} > 0$.

Da uns diese nicht interessieren, suchen wir nach weiteren Lösungen mit $\Delta \neq 0$. Wir erhalten unter Verwendung von

$$2v_{\vec{p}}u_{\vec{p}} = 2 \sin \phi_{\vec{p}} \cos \phi_{\vec{p}} = \sin 2\phi_{\vec{p}}, \quad u_{\vec{p}}^2 - v_{\vec{p}}^2 = \cos^2 \phi_{\vec{p}} - \sin^2 \phi_{\vec{p}} = \cos 2\phi_{\vec{p}}$$

die Gleichung

$$\Leftrightarrow 0 \stackrel{!}{=} 4 \xi_{\vec{p}} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}} - 2(u_{\vec{p}}^2 - v_{\vec{p}}^2) \Delta$$

$$\Leftrightarrow 2 \xi_{\vec{p}} \sin 2\phi_{\vec{p}} \stackrel{!}{=} 2 \Delta \cos 2\phi_{\vec{p}}$$

$$\Leftrightarrow \tan 2\phi_{\vec{p}} \stackrel{!}{=} \frac{\Delta}{\xi_{\vec{p}}} \quad \Rightarrow \quad \sin 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\Delta}{E_{\vec{p}}}, \quad \cos 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\xi_{\vec{p}}}{E_{\vec{p}}}, \quad E_{\vec{p}} := \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}.$$

Die expliziten Lösungen für $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ lauten

$$u_{\vec{p}}^2 = \frac{E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}, \quad v_{\vec{p}}^2 = \frac{E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}},$$

da diese Lösungen die obigen Gleichungen erfüllen:

$$2u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} = 2 \sqrt{\frac{E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}} \frac{E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}} = \frac{1}{E_{\vec{p}}} \sqrt{E_{\vec{p}}^2 - \xi_{\vec{p}}^2} = \frac{\Delta}{E_{\vec{p}}} = \sin 2\phi_{\vec{p}},$$

$$u_{\vec{p}}^2 - v_{\vec{p}}^2 = \frac{E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}} - \frac{E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}} = \frac{\xi_{\vec{p}}}{E_{\vec{p}}} = \cos 2\phi_{\vec{p}}.$$

Wir wählen beim Wurzelziehen auf beiden Seiten der Formeln für $u_{\vec{p}}^2, v_{\vec{p}}^2$ im Folgenden jeweils das positive Vorzeichen.

12.7 Selbstkonsistenz

Aus den Formeln aus (>12.6) folgt für die Konstante Δ

$$\Delta := \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} 2u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} = \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \sin 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}}$$

Wir können nun auf beiden Seiten durch Δ teilen und die Summe als Integral schreiben. Mit Abschnitt 1.4 folgt bei $T = 0$

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{\Lambda}{2} \int_{\mathcal{B}} d^3\vec{p} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}} = \frac{\Lambda}{2} \int_{E_F - \omega_D}^{E_F + \omega_D} \frac{g(\mathcal{E})}{\approx g(E_F)} d\mathcal{E} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}} \\ &= \frac{\Lambda g(E_F)}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \stackrel{x := \xi/\Delta}{=} \frac{\Lambda g(E_F)}{2} \int_{-\omega_D/\Delta}^{\omega_D/\Delta} dx \frac{1}{\sqrt{1 + x^2}} = \Lambda g(E_F) \int_0^{\omega_D/\Delta} dx \frac{1}{\sqrt{1 + x^2}} \\ &= \Lambda g(E_F) [\operatorname{arsinh} x]_0^{\omega_D/\Delta} = \Lambda g(E_F) \operatorname{arsinh} \omega_D/\Delta = \Lambda g(E_F) \ln \left(\omega_D/\Delta + \sqrt{(\omega_D/\Delta)^2 + 1} \right). \end{aligned}$$

Mit der Annahme $\Delta \ll \omega_D$ folgt

$$1 \approx \Lambda g(E_F) \ln(2\omega_D/\Delta) \quad \Leftrightarrow \quad \Delta \approx 2\omega_D e^{-1/\Lambda g(E_F)}.$$

Man beachte, dass dieses Ergebnis konsistent mit der Annahme $\Delta \ll \omega_D$ ist.

12.8 Vergleich mit dem Fermi-Flüssigkeit-Zustand

Es gilt bei $T = 0$

$$E_0 = \sum_{\vec{p}\sigma} (\mathcal{E}_{\vec{p}} - E_F) \left(\operatorname{Norm} \left| c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} \right| \operatorname{Norm} \right) = 2 \sum_{\vec{p}} \underbrace{(\mathcal{E}_{\vec{p}} - E_F)}_{=: \xi(\vec{p})} \theta(E_F - \mathcal{E}_{\vec{p}}) = 2 \sum_{\vec{p}} \xi(\vec{p}) \theta(-\xi(\vec{p}))$$

sowie, mit den Relationen

$$E_{\text{BCS}} = 2 \sum_{\vec{p}} (\mathcal{E}_{\vec{p}} - E_F) v_{\vec{p}}^2 - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} = 2 \sum_{\vec{p}} \xi(\vec{p}) v_{\vec{p}}^2 - \frac{\Delta}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} 2u_{\vec{p}}v_{\vec{p}}.$$

Wenn wir nun die Differenz bilden, erhalten wir¹

$$\Delta E = E_{\text{BCS}} - E_0 = 2 \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \xi(\vec{p}) \left(v_{\vec{p}}^2 - \theta(-\xi(\vec{p})) \right) - \frac{\Delta}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} 2u_{\vec{p}}v_{\vec{p}}.$$

Nun setzen wir die Relationen (siehe auch (>12.6))

$$v_{\vec{p}}^2 = \sin^2 \phi_{\vec{p}} = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\phi_{\vec{p}}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{\xi(\vec{p})}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2(\vec{p})}}$$

$$2v_{\vec{p}}u_{\vec{p}} = 2 \sin \phi_{\vec{p}} \cos \phi_{\vec{p}} = \sin 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2(\vec{p})}}$$

ein und schreiben die Summe wieder als Integral. Mit Abschnitt 1.4 folgt bei $T = 0$

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{\text{BCS}} - E_0 = \int_{\vec{p} \in \mathcal{B}} d^3\vec{p} \left(\xi(\vec{p}) \left(1 - \frac{\xi(\vec{p})}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2(\vec{p})}} - 2\theta(-\xi(\vec{p})) \right) - \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi^2(\vec{p})}} \right) \\ &= \int_{E_{\text{F}} - \omega_D}^{E_{\text{F}} + \omega_D} \underbrace{g(\mathcal{E})}_{\approx g(E_{\text{F}})} d\mathcal{E} \left(\xi(\mathcal{E}) \left(1 - \frac{\xi(\mathcal{E})}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2(\mathcal{E})}} - 2\theta(-\xi(\mathcal{E})) \right) - \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi^2(\mathcal{E})}} \right) \\ &= g(E_{\text{F}}) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} - 2\xi\theta(-\xi) - \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \right) \\ &= g(E_{\text{F}}) \int_0^{\omega_D} d\xi \left(-\frac{2\xi^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} + 2\xi - \frac{\Delta^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \right) \\ &= g(E_{\text{F}}) \int_0^{\omega_D} d\xi \left(-\frac{2\xi^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} + 2\xi - \frac{\Delta^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \right) \\ &= \Delta^2 g(E_{\text{F}}) \int_0^{\omega_D/\Delta} dx \left(-\frac{2x^2}{\sqrt{1+x^2}} + 2x - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \right) = \Delta^2 g(E_{\text{F}}) \int_0^{\omega_D/\Delta} dx \left(2x - \frac{1+2x^2}{\sqrt{1+x^2}} \right) \\ &\approx \Delta^2 g(E_{\text{F}}) \int_0^{\infty} dx \left(2x - \frac{1+2x^2}{\sqrt{1+x^2}} \right) = -\frac{1}{2} \Delta^2 g(E_{\text{F}}). \end{aligned}$$

Dabei haben wir zwischendurch $x := \xi/\Delta$ substituiert und am Ende $\omega_D/\Delta \approx \infty$ genähert.

12.9 Die neuen Leiteroperatoren erfüllen die Fermionen Kommutator-Algebra

Unter Verwendung der Tatsache, dass die $c_{\vec{p}\sigma}$'s die üblichen Fermionen-Antikommutator-Relationen erfüllen, folgt direkt

¹ Im Gegensatz zum vorherigen Schritt geht die erste Summe hier nur noch über $\vec{p} \in \mathcal{B}$ und nicht mehr über alle \vec{p} . Das hat folgenden Grund: Aus $\Delta = 2\omega_D e^{-1/\Lambda g(E_{\text{F}})}$ folgt $\Delta \ll \omega_D$ und daraus wieder folgt

$$\tan 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\Delta}{\mathcal{E}_{\vec{p}} - E_{\text{F}}} \ll 1 \quad \text{für} \quad |\mathcal{E}_{\vec{p}} - E_{\text{F}}| > \omega_D.$$

Also $\tan 2\phi_{\vec{p}} \approx 0$. Dies Gleichung hat die Lösung $\phi_{\vec{p}} \approx 0$ und dies wiederum liefert $v_{\vec{p}} = \sin \phi_{\vec{p}} \approx 0$ sowie $u_{\vec{p}} = \cos \phi_{\vec{p}} \approx 1$. Diese Lösung ist sinnvoll für $\mathcal{E}_{\vec{p}} - \mu > \omega_D$, also weit außerhalb des Fermi-Sees; hier gibt es keine Teilchen. Die Gleichung hat aber ebenfalls die Lösung $\phi_{\vec{p}} \approx \pi/2$, also $v_{\vec{p}} \approx 1$ und $u_{\vec{p}} \approx 0$. Diese Lösung ist sinnvoll für $\mathcal{E}_{\vec{p}} - \mu < -\omega_D$, also tief im Innern des Fermi-Sees, wo alle Zustände besetzt sind. Aus diesem Grund können wir die Summen über jene $\vec{p} \notin \mathcal{B}$ aus E_0 und E_{BCS} gerade wegstreichen. Die Summen von E_0 und E_{BCS} unterscheiden sich nur im Bereich \mathcal{B} wesentlich voneinander.

$$\begin{aligned}
\{\alpha_{\bar{p}\sigma}, \alpha_{\bar{p}'\sigma'}^\dagger\} &= \{u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger, u_{\bar{p}'}c_{\bar{p}'\sigma'}^\dagger - \tilde{\sigma}'v_{\bar{p}'}c_{-\bar{p}',-\sigma'}\} \\
&= u_{\bar{p}}u_{\bar{p}'}\{c_{\bar{p}\sigma}, c_{\bar{p}'\sigma'}^\dagger\} + \tilde{\sigma}\tilde{\sigma}'v_{\bar{p}}v_{\bar{p}'}\{c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger, c_{-\bar{p}',-\sigma'}\} = u_{\bar{p}}u_{\bar{p}'}\delta_{\bar{p}\bar{p}'}\delta_{\sigma\sigma'} + \tilde{\sigma}\tilde{\sigma}'v_{\bar{p}}v_{\bar{p}'}\delta_{\bar{p}\bar{p}'}\delta_{\sigma\sigma'} \\
&= (u_{\bar{p}}^2 + \tilde{\sigma}^2v_{\bar{p}}^2)\delta_{\bar{p}\bar{p}'}\delta_{\sigma\sigma'} = \delta_{\bar{p}\bar{p}'}\delta_{\sigma\sigma'},
\end{aligned}$$

wobei $\tilde{\sigma}^2 = 1$ sowie $u_{\bar{p}}^2 + v_{\bar{p}}^2 = 1$ aus Abschnitt 12.1 (Normierung) verwendet wurde. Ebenso folgt

$$\begin{aligned}
\{\alpha_{\bar{p}\sigma}, \alpha_{\bar{p}'\sigma'}\} &= \{u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger, u_{\bar{p}'}c_{\bar{p}'\sigma'} - \tilde{\sigma}'v_{\bar{p}'}c_{-\bar{p}',-\sigma'}^\dagger\} \\
&= -\tilde{\sigma}'u_{\bar{p}}v_{\bar{p}'}\{c_{\bar{p}\sigma}, c_{-\bar{p}',-\sigma'}^\dagger\} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}u_{\bar{p}'}\{c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger, c_{\bar{p}'\sigma'}\} \\
&= -\tilde{\sigma}'u_{\bar{p}}v_{\bar{p}'}\delta_{\bar{p},-\bar{p}'}\delta_{\sigma,-\sigma'} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}u_{\bar{p}'}\delta_{-\bar{p},\bar{p}'}\delta_{-\sigma,\sigma'} = \tilde{\sigma}u_{\bar{p}}v_{-\bar{p}}\delta_{\bar{p},-\bar{p}'}\delta_{\sigma,-\sigma'} - \tilde{\sigma}'v_{\bar{p}}u_{-\bar{p}'}\delta_{-\bar{p},\bar{p}'}\delta_{-\sigma,\sigma'} \\
&= \tilde{\sigma}(u_{\bar{p}}v_{-\bar{p}} - u_{-\bar{p}}v_{\bar{p}})\delta_{\bar{p},-\bar{p}'}\delta_{\sigma,-\sigma'} = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\{\alpha_{\bar{p}\sigma}^\dagger, \alpha_{\bar{p}'\sigma'}^\dagger\} &= \{u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma}^\dagger - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}, u_{\bar{p}'}c_{\bar{p}'\sigma'}^\dagger - \tilde{\sigma}'v_{\bar{p}'}c_{-\bar{p}',-\sigma'}\} \\
&= -\tilde{\sigma}'u_{\bar{p}}v_{\bar{p}'}\{c_{\bar{p}\sigma}^\dagger, c_{-\bar{p}',-\sigma'}\} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}u_{\bar{p}'}\{c_{-\bar{p},-\sigma}, c_{\bar{p}'\sigma'}^\dagger\} \\
&= -\tilde{\sigma}'u_{\bar{p}}v_{\bar{p}'}\delta_{\bar{p},-\bar{p}'}\delta_{\sigma,-\sigma'} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}u_{\bar{p}'}\delta_{-\bar{p},\bar{p}'}\delta_{-\sigma,\sigma'} = \tilde{\sigma}u_{\bar{p}}v_{-\bar{p}}\delta_{\bar{p},-\bar{p}'}\delta_{\sigma,-\sigma'} - \tilde{\sigma}'v_{\bar{p}}u_{-\bar{p}'}\delta_{-\bar{p},\bar{p}'}\delta_{-\sigma,\sigma'} \\
&= \tilde{\sigma}(u_{\bar{p}}v_{-\bar{p}} - u_{-\bar{p}}v_{\bar{p}})\delta_{\bar{p},-\bar{p}'}\delta_{\sigma,-\sigma'} = 0.
\end{aligned}$$

Hierbei wurde ausgenutzt, dass zumindest für die $u_{\bar{p}}, v_{\bar{p}}$ der |Norm)- und |BCS)-Zustände $u_{\bar{p}} = u_{-\bar{p}}, v_{\bar{p}} = v_{-\bar{p}}$ gilt.

12.10 Invertieren der neuen Leiteroperatoren

Wir haben

$$\alpha_{\bar{p}\sigma} := u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger, \quad \alpha_{\bar{p}\sigma}^\dagger = u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma}^\dagger - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}$$

definiert. Daraus folgt, mit $u_{\bar{p}} = u_{-\bar{p}}, v_{\bar{p}} = v_{-\bar{p}}$ sowie $\tilde{\sigma}^2 = 1$ und $u_{\bar{p}}^2 + v_{\bar{p}}^2 = 1$

$$\begin{aligned}
u_{\bar{p}}\alpha_{\bar{p}\sigma} + \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}\alpha_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger &= u_{\bar{p}}(u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger) + \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}(u_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger + \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma}) = (u_{\bar{p}}^2 + \tilde{\sigma}^2v_{\bar{p}}^2)c_{\bar{p}\sigma} \\
&= c_{\bar{p}\sigma},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_{\bar{p}}\alpha_{\bar{p}\sigma}^\dagger + \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}\alpha_{-\bar{p},-\sigma} &= u_{\bar{p}}(u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma}^\dagger - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}) + \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}(u_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma} + \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma}^\dagger) = (u_{\bar{p}}^2 + \tilde{\sigma}^2v_{\bar{p}}^2)c_{\bar{p}\sigma}^\dagger \\
&= c_{\bar{p}\sigma}^\dagger.
\end{aligned}$$

12.11 Der Norm-Zustand ist ein Vakuum bzgl. der neuen Leiteroperatoren

Wir betrachten die Wirkung von $\alpha_{\bar{p}\sigma}$ auf |Norm). Einsetzen der Definitionen dieser beiden Objekte liefert

$$\alpha_{\bar{p}\sigma}|Norm\rangle = (u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma} - \tilde{\sigma}v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger) \prod_{\bar{p}' \text{ mit } |\bar{p}'| < p_F} c_{\bar{p}'\uparrow}^\dagger c_{-\bar{p}'\downarrow} |0\rangle.$$

$u_{\bar{p}}$ ist ungleich null nur außerhalb des Fermi-Sees; $u_{\bar{p}}c_{\bar{p}\sigma}$ kommutiert daher mit dem Produkt über alle Impulse innerhalb des Fermi-Sees, trifft auf |0) und verschwindet. $v_{\bar{p}}$ ist ungleich null nur innerhalb des Fermi-Sees; $v_{\bar{p}}c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger$ kann daher nur Impulse innerhalb des Fermi-Sees enthalten, die bereits durch die Erzeugungsoperatoren aus dem Produkt bereits besetzt worden sind. Somit trifft der Erzeugungsoperator $c_{-\bar{p},-\sigma}^\dagger$ stets auf einen schon besetzten Zustand und verschwindet, da ein Zustand nur von einem einzigen Fermion besetzt sein kann.

12.12 Der BCS-Zustand ist ein Vakuum bzgl. der neuen Leiteroperatoren

Wir betrachten die Wirkung von $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ auf $|\text{BCS}\rangle$. Einsetzen der Definitionen dieser beiden Objekte liefert

$$\alpha_{\vec{p}\sigma}|\text{BCS}\rangle = \left(u_{\vec{p}}c_{\vec{p}\sigma} - \tilde{\sigma}v_{\vec{p}}c_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger\right) \prod_{\vec{q}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}c_{\vec{q}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle.$$

$\alpha_{\vec{p}\sigma}$ kommutiert mit allen Faktoren des Produkts, die Impulse $\vec{q} \neq \pm\vec{p}$ enthalten. Betrachten wir zunächst den Fall $\sigma = \uparrow$ (das bedeutet $\tilde{\sigma} = 1$; wir lassen $\tilde{\sigma}$ aber noch einen Moment allgemein stehen)

$$\begin{aligned} \alpha_{\vec{p}\uparrow}|\text{BCS}\rangle &= \prod_{\vec{q} \neq \pm\vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}c_{\vec{q}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger\right) \left(u_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow} - \tilde{\sigma}v_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) \left(u_{-\vec{p}} + v_{-\vec{p}}c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle. \end{aligned}$$

In diesem Fall kommutiert $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ (die zweite Klammer) zusätzlich auch noch mit der dritten Klammer:

$$\alpha_{\vec{p}\uparrow}|\text{BCS}\rangle = \prod_{\vec{q} \neq \vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}c_{\vec{q}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger\right) \left(u_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow} - \tilde{\sigma}v_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle.$$

Die beiden rechten Klammern liefern nun vier Terme: Der $u_{\vec{p}}^2$ -Term verschwindet, da in diesem Term der Vernichtungsoperator auf $|0\rangle$ trifft. Der $v_{\vec{p}}^2$ -Term verschwindet, da es in diesem Fall keine Vernichtungsoperatoren gibt, aber zweimal den Erzeugungsoperator $c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger$. Da es nur ein Fermion im Zustand $-\vec{p}, \downarrow$ geben kann, verschwindet auch dieser Beitrag. Somit bleiben nur die beiden Mischterme übrig:

$$\alpha_{\vec{p}\uparrow}|\text{BCS}\rangle = \prod_{\vec{q} \neq \vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}c_{\vec{q}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger\right) u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} \left(c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - \tilde{\sigma}c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle.$$

Mit $c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger |0\rangle = |0\rangle$ folgt, dass sich die beiden Terme in der Klammer gerade wegheben. Dies funktioniert allerdings nur, weil $\tilde{\sigma} = 1$ ist.

Betrachten wir nun genauso den Fall $\sigma = \downarrow$ (also $\tilde{\sigma} = -1$). Auch in diesem Fall kommutiert $\alpha_{\vec{p}\downarrow}$ mit allen Faktoren bis auf einen:

$$\alpha_{\vec{p}\downarrow}|\text{BCS}\rangle = \prod_{\vec{q} \neq -\vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}c_{\vec{q}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger\right) \left(u_{\vec{p}}c_{\vec{p}\downarrow} - \tilde{\sigma}v_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger\right) \left(u_{-\vec{p}} + v_{-\vec{p}}c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle.$$

Beim Ausmultiplizieren der beiden rechten Klammern überleben erneut nur die beiden Mischterme:

$$\alpha_{\vec{p}\downarrow}|\text{BCS}\rangle = \prod_{\vec{q} \neq -\vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}c_{\vec{q}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger\right) u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} \left(c_{\vec{p}\downarrow}c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger - \tilde{\sigma}c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger\right) |0\rangle,$$

wobei wir $u_{\vec{p}} = u_{-\vec{p}}, v_{\vec{p}} = v_{-\vec{p}}$ verwendet haben. Wir müssen im rechten Term nun die Erzeugungsoperatoren vertauschen $c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger$; da die Impulse verschieden sind, liefert uns dies nur einen Faktor -1 . Und da $\tilde{\sigma} = -1$ ist, kürzen sich die beiden Terme wieder weg. Es gilt also

$$\alpha_{\vec{p}\sigma}|\text{BCS}\rangle = 0,$$

aber nur wegen unserer Definition von $\tilde{\sigma}$. Dies ist der Grund, warum dieses $\tilde{\sigma}$ in der Definition von $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ eingeführt wurde.

12.13 Produkte von alten durch neue Leiteroperatoren ausdrücken

Mit den Formeln für die c -Leiteroperatoren in Abhängigkeit der α -Leiteroperatoren folgt

$$\begin{aligned}
c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger &= (u_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger + v_{\vec{p}} \alpha_{-\vec{p}\downarrow}) (u_{\vec{p}} \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\uparrow}) \\
&= u_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (-\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} + \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) \\
&= u_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (-\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} + (\{\alpha_{-\vec{p}\downarrow}, \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger\} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow})) \\
&= u_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}).
\end{aligned}$$

Die beiden Vernichtungsoperatoren lassen sich leicht durch die beiden Erzeugungsoperatoren ausdrücken, sodass wir das Ergebnis von oben wiederverwenden können:

$$\begin{aligned}
c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} &= (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger)^\dagger = (u_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}))^\dagger \\
&= u_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}).
\end{aligned}$$

12.14 Mean-Field-Hamilton-Operator

Mit $A := c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger$ und $B := c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}$ sowie

$$AB \approx \langle A \rangle B + \langle B \rangle A - \langle A \rangle \langle B \rangle,$$

wobei wir aus Abschnitt 12.2 wissen, dass $\langle A \rangle = \langle B \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}$ gilt, folgt für die Hamilton-Operator (mit $\xi_{\vec{p}} := \mathcal{E}_{\vec{p}} - \mu$ sowie $\Delta := \Lambda \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}$)

$$\begin{aligned}
H_G &= \sum_{\vec{p}\sigma} \xi_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} \underbrace{c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow}}_{=AB} \\
&\approx \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} + c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}) - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in \mathcal{B}} (u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow} + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger - u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}) \\
&= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} + 1 - c_{\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger) - \Delta \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} (c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} + c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) + \frac{\Delta^2}{\Lambda} \\
&= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow}) \underbrace{\begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix}}_{=: \mathcal{M}} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{\Delta^2}{\Lambda} =: H_G^{\text{MF}}.
\end{aligned}$$

Dabei musste im letzten Schritt an einer Stelle die Summationsvariable umgedreht werden: $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, um den $c_{\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger$ -Term in die Matrixschreibweise zu integrieren.

Man beachte, dass die Summe mit der Masse am Ende über alle \vec{p} geht, nicht nur über $\vec{p} \in \mathcal{B}$. Man kann dies entweder so verstehen, dass man Δ in der Matrix durch $\Delta \theta(\vec{p} \in \mathcal{B})$ ersetzt, wobei $\theta(\vec{p} \in \mathcal{B}) = 1$ für $\vec{p} \in \mathcal{B}$ und sonst 0 ist. Oder man nutzt aus, dass man die Summe über die Δ -Terme im Bereich $\vec{p} \notin \mathcal{B}$ wegen $\Delta \ll \xi_{\vec{p}}$ gegenüber den $\xi_{\vec{p}}$ -Termen vernachlässigen kann.

12.15 Diagonalisieren des Mean-Field-Hamilton-Operators

Die Matrix

$$\mathcal{M} := \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix}$$

aus dem Hamilton-Operators H_G^{MF} hat nun die Eigenwerte

$$\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2} = \pm E_{\vec{p}}.$$

Zugehörige Eigenvektoren sind gegeben durch $\vec{v}_{\pm} \sim (\xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}}, -\Delta)$, wie sich leicht zeigen lässt:

$$\begin{aligned}\mathcal{M}\vec{v}_{\pm} &= \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}}(\xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}}) + \Delta^2 \\ -\Delta(\xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}}) + \Delta\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{\vec{p}}^2 \pm \xi_{\vec{p}}E_{\vec{p}} \\ \mp\Delta E_{\vec{p}} \end{pmatrix} = \pm E_{\vec{p}} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix} \\ &= \pm E_{\vec{p}} \vec{v}_{\pm}.\end{aligned}$$

Normieren der Eigenvektoren liefert

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix} &\sim \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + (\xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}})^2}} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2 + E_{\vec{p}}^2 \pm 2\xi_{\vec{p}}E_{\vec{p}}}} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2E_{\vec{p}}^2 \pm 2\xi_{\vec{p}}E_{\vec{p}}}} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}\sqrt{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}} \\ -\Delta \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Für die x -Komponente gilt

$$\frac{\xi_{\vec{p}} \pm E_{\vec{p}}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}\sqrt{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}} = \pm \frac{\pm\xi_{\vec{p}} + E_{\vec{p}}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}\sqrt{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}} = \pm \frac{\sqrt{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} = \begin{cases} u_{\vec{p}} & \text{für } \pm = + \\ -v_{\vec{p}} & \text{für } \pm = - \end{cases}$$

Für die y -Komponente gilt

$$\begin{aligned}\frac{-\Delta}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}\sqrt{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}} &= \frac{-\sqrt{E_{\vec{p}}^2 - \xi_{\vec{p}}^2}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}\sqrt{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}} = -\frac{1}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} \sqrt{\frac{(E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}})(E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}})}{E_{\vec{p}} \pm \xi_{\vec{p}}}} \\ &= \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} \sqrt{E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}}} = -v_{\vec{p}} & \text{für } \pm = + \\ -\frac{1}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} \sqrt{E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}}} = -u_{\vec{p}} & \text{für } \pm = - \end{cases}.\end{aligned}$$

Die Eigenvektoren lauten also

$$\begin{pmatrix} u_{\vec{p}} \\ -v_{\vec{p}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -v_{\vec{p}} \\ -u_{\vec{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{\vec{p}} \\ u_{\vec{p}} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad S := \begin{pmatrix} u_{\vec{p}} & v_{\vec{p}} \\ -v_{\vec{p}} & u_{\vec{p}} \end{pmatrix}.$$

Die Mathematik diagonalisierbarer Matrizen sagt uns, dass

$$S^\dagger \mathcal{M} S = \begin{pmatrix} E_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{p}} \end{pmatrix}$$

sein muss. Außerdem finden wir

$$S^\dagger \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{p}} & -v_{\vec{p}} \\ v_{\vec{p}} & u_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow} - v_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \\ v_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow} + u_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{p}\uparrow} \\ \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow} \end{pmatrix} S = \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{p}} & v_{\vec{p}} \\ -v_{\vec{p}} & u_{\vec{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger - v_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\downarrow}, v_{\vec{p}}c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger + u_{\vec{p}}c_{-\vec{p}\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \end{pmatrix}.$$

Somit folgt für den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
H_G^{\text{MF}} &= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow}) \underbrace{SS^\dagger}_{=\mathcal{M}} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} SS^\dagger \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{\Delta^2}{\Lambda} \\
&= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}} (\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, \alpha_{-\vec{p}\downarrow}) \begin{pmatrix} E_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{p}\uparrow} \\ \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{\Delta^2}{\Lambda} \\
&= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} (\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) + \frac{\Delta^2}{\Lambda} \\
&= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} (\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - (1 - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow})) + \frac{\Delta^2}{\Lambda} = \sum_{\sigma\vec{p}} E_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger \alpha_{\vec{p}\sigma} + \sum_{\vec{p}} (\xi_{\vec{p}} - E_{\vec{p}}) + \frac{\Delta^2}{\Lambda}.
\end{aligned}$$

12.16 Alternative Darstellung des Hamilton-Operators

Nur die Summe mit der Matrix unterscheidet sich zwischen den beiden Schreibweisen mit 2×2 - oder 4×4 -Matrix. Wir betrachten also nur diesen einen Term:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow}, -c_{-\vec{p}\uparrow}) \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & \xi_{\vec{p}} & 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 & -\xi_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{\vec{p}\downarrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \\ -c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} + c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} - c_{-\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - c_{-\vec{p}\uparrow} c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \Delta (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger + c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} - c_{-\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\downarrow}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} + (1 - c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}) - c_{-\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - (1 - c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\uparrow})) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \Delta (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger + c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger + c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} + c_{\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\uparrow}) \\
&= \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} - c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow}) - \sum_{\vec{p}} \Delta (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger + c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}) = \sum_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow}) \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Beim zweiten Gleichheitszeichen haben wir (anti-)kommutiert, bei dritten haben wir dann bei einigen Termen den Summationsindex $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ ersetzt. Die Gleichheit der beiden Darstellungen ist somit gezeigt.

Nur die Summe mit der Matrix ist ein nicht-konstanter (also operatorwertiger) Term. Wir vernachlässigen nun die übrigen Terme und können die Summe mit der Matrix auch als Integral über Feldoperatoren schreiben:

$$H_G^{\text{MF}} = \frac{1}{2} \int dx \bar{\Psi} h_{\text{BdG}} \Psi.$$

Wir wollen nun sehen, warum diese Schreibweise auch äquivalent ist. Für den Hamilton-Operator gilt

$$\begin{aligned}
h_{\text{BdG}} &= \xi_{\vec{p}} (\sigma_3 \otimes \sigma_0) - \Delta (\sigma_1 \otimes \sigma_0) = \xi_{\vec{p}} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) - \Delta \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \\
&= \xi_{\vec{p}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \Delta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & \xi_{\vec{p}} & 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 & -\xi_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Die Spinoren sind definiert als

$$\Psi := (\psi_\uparrow, \psi_\downarrow, \psi_\downarrow^\dagger, -\psi_\uparrow^\dagger)^T, \quad \psi_\sigma(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}.$$

Siehe zur Gleichung von ψ_σ auch (>9.1). Nun können wir die Äquivalenz auch wieder „rückwärts“ zeigen:

$$\frac{1}{2} \int d^3r \bar{\Psi} h_{\text{BdG}} \Psi = \frac{1}{2} \int d^3r (\psi_\uparrow^\dagger, \psi_\downarrow^\dagger, \psi_\downarrow, -\psi_\uparrow) h_{\text{BdG}} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \\ \psi_\downarrow^\dagger \\ -\psi_\uparrow^\dagger \end{pmatrix}.$$

Die Komponenten von h_{BdG} enthalten keine Operatoren. Daher kommt es beim Ausmultiplizieren zum Aufeinandertreffen der verschiedenen Feldoperatoren, zum Beispiel

$$\int d^3r \psi_\sigma^\dagger \psi_{\sigma'} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\vec{p}'} \int d^3r e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\vec{p}'} V \delta_{\vec{p}\vec{p}'} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} = \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma'}.$$

(für den Vorfaktor V des Kronecker-Deltas siehe Abschnitt 1.5). Das Integral wird zur Summe, die Spins bleiben unverändert und das \dagger des Feldoperators pflanzt sich auf den Leiteroperator fort. Wenn allerdings *beide/keiner von beiden* Feldoperatoren ein \dagger tragen/trägt, erhält man stets eine Exponentialfunktion $e^{\pm i(\vec{p}+\vec{p}')\cdot\vec{r}}$, also ein Kronecker-Delta $\delta_{-\vec{p}\vec{p}'}$ und ein (beliebiger) Impuls ändert sein Vorzeichen. Betrachten wir alle Kombinationen:

$$\begin{aligned} \int d^3r \begin{pmatrix} \psi_\uparrow^\dagger \\ \psi_\downarrow^\dagger \\ \psi_\downarrow \\ -\psi_\uparrow \end{pmatrix} (\psi_\uparrow, \psi_\downarrow, \psi_\downarrow^\dagger, -\psi_\uparrow^\dagger) &= \int d^3r \begin{pmatrix} \psi_\uparrow^\dagger \psi_\uparrow & \psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow & \psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow^\dagger & -\psi_\uparrow^\dagger \psi_\uparrow^\dagger \\ \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow & \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow & \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow^\dagger & -\psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow^\dagger \\ \psi_\downarrow \psi_\uparrow & \psi_\downarrow \psi_\downarrow & \psi_\downarrow \psi_\downarrow^\dagger & -\psi_\downarrow \psi_\uparrow^\dagger \\ -\psi_\uparrow \psi_\uparrow & -\psi_\uparrow \psi_\downarrow & -\psi_\uparrow \psi_\downarrow^\dagger & \psi_\uparrow \psi_\uparrow^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\vec{p}} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} & c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} & c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger & -c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} & c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} & c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger & -c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\uparrow} & c_{\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow} & c_{\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger & -c_{\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ -c_{\vec{p}\uparrow} c_{-\vec{p}\uparrow} & -c_{\vec{p}\uparrow} c_{-\vec{p}\downarrow} & -c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger & c_{\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\vec{p}} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} & c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} & c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger & -c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} & c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}\downarrow} & c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger & -c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} & c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\downarrow} & c_{-\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger & -c_{-\vec{p}\downarrow} c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ -c_{-\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\uparrow} & -c_{-\vec{p}\uparrow} c_{\vec{p}\downarrow} & -c_{-\vec{p}\uparrow} c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger & c_{-\vec{p}\uparrow} c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\vec{p}} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger \\ c_{-\vec{p}\downarrow} \\ -c_{-\vec{p}\uparrow} \end{pmatrix} (c_{\vec{p}\uparrow}, c_{\vec{p}\downarrow}, c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger, -c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger). \end{aligned}$$

(Da wir hier keine Matrix zwischen die Spinoren geschrieben haben, ist der linke Vektor ein Zeilen- und der rechte ein Spaltenvektor – also genau umgekehrt). Beim dritten Gleichheitszeichen haben wir in der unteren Hälfte der Matrix den Summationsindex $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ umgedreht (man beachte, dass jede Matrixkomponente einer unabhängigen Summe entspricht). Da die Matrix keine Operatoren enthält, können wir nun einfach die Matrix einfügen, ohne, dass sich etwas ändert (außer eben dem Transponieren der Vektoren):

$$\frac{1}{2} \int d^3r \bar{\Psi} h_{\text{BdG}} \Psi = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \left(c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow}, -c_{-\vec{p}\uparrow} \right) h_{\text{BdG}} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{\vec{p}\downarrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \\ -c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Womit auch diese Gleichheit bewiesen wäre.

12.17 Kritische Temperatur durch Selbstkonsistenz

Wir betrachten wir die Selbstkonsistenz von Δ . Aus (>12.6) wissen wir, dass

$$2u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} = \sin 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\Delta}{E_{\vec{p}}} = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}}$$

ist. Außerdem gilt dank einer mathematischen Identität

$$1 - 2n(E_{\vec{p}}) = 1 - \frac{2}{e^{\beta E_{\vec{p}}} + 1} = \tanh \frac{\beta E_{\vec{p}}}{2}.$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \Delta &= \Lambda \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} (1 - 2n(E_{\vec{p}})) = \Lambda \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{p}}} \tanh \frac{\beta E_{\vec{p}}}{2} \\ \Leftrightarrow \quad 1 &= \Lambda \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \frac{\tanh \beta E_{\vec{p}}/2}{2E_{\vec{p}}}. \end{aligned}$$

Wir betrachten nun das System bei der kritischen Temperatur $T = T_c$; das ist dort, wo die Energielücke Δ des |BCS)-Zustands im Vergleich zum |Norm)-Zustand gerade verschwindet (siehe Abschnitt 12.1 und 12.3). Wir setzen also $T = T_c \Rightarrow \Delta = 0 \Rightarrow E_{\vec{p}} = \xi_{\vec{p}}$. Mit Abschnitt 1.4 folgt

$$\begin{aligned} 1 &= \Lambda \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \frac{\tanh \beta_c \xi_{\vec{p}}/2}{2\xi_{\vec{p}}} = \Lambda \int_{\vec{p} \in \mathcal{B}} d^3\vec{p} \frac{\tanh \beta_c \xi_{\vec{p}}/2}{2\xi_{\vec{p}}} = \Lambda \int_{E_F - \omega_D}^{E_F + \omega_D} \underbrace{g(\mathcal{E})}_{\approx g_F := g(E_F)} d\mathcal{E} \frac{\tanh \beta_c \xi_{\vec{p}}/2}{2\xi_{\vec{p}}} \\ &= \Lambda g_F \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh \beta_c \xi/2}{2\xi} = \Lambda g_F \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh \beta_c \xi/2}{\xi} \stackrel{x := \beta_c \omega_D/2}{=} \Lambda g_F \int_0^{\beta_c \omega_D/2} dx \frac{\tanh x}{x}. \end{aligned}$$

Mit der Annahme $\omega_D \gg kT_c \Leftrightarrow \beta_c \omega_D \gg 1$ folgt, dass von $x = 0$ bis hin zu $x \gg 1$ integriert wird. Für $x > 1$ gilt $\tanh x \approx 1$. Für $x \rightarrow 0$ geht $\tanh x \rightarrow 0$. Wir können also als grobe Näherung den Bereich $x \in [0, 1]$, in dem der Tangens Hyperbolicus klein ist, vernachlässigen und uns nur auf den viel größeren Bereich $x \in [1, \beta_c \omega_D/2]$ beschränken, wo $\tanh x \approx 1$ gilt:

$$1 \approx \Lambda g_F \int_1^{\beta_c \omega_D/2} dx \frac{1}{x} = \Lambda g_F \ln \frac{\beta_c \omega_D}{2} \quad \Leftrightarrow \quad 2kT_c \approx \omega_D e^{-1/\Lambda g_F}.$$

12.18 Wärmekapazität

Die Wärmekapazität ist gegeben durch

$$c_V = T \frac{\partial S}{\partial T}, \quad S = -2k \sum_{\vec{p}} \left(n(E_{\vec{p}}) \ln n(E_{\vec{p}}) + (1 - n(E_{\vec{p}})) \ln (1 - n(E_{\vec{p}})) \right),$$

mit Entropie S und Boltzmann-Konstante k . Der Faktor 2 trägt den Spins Rechnung. Wir wollen im Folgenden den Ableitungspunkt als Ableitung nach der Temperatur T verwenden:

$$\dot{S} := \frac{\partial S}{\partial T} = -2k \sum_{\vec{p}} \left(\dot{n} \ln n + n \frac{\dot{n}}{n} - \dot{n} \ln(1-n) - (1-n) \frac{\dot{n}}{1-n} \right) = -2k \sum_{\vec{p}} \dot{n} \ln \frac{n}{1-n}.$$

Wir nutzen

$$\frac{n}{1-n} = \frac{1}{1 - \frac{1}{e^{\beta E_{\vec{p}} + 1}}} = e^{-\beta E_{\vec{p}}}$$

und definieren als Abkürzung (es war $E_{\vec{p}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}$ und Δ war temperaturabhängig)

$$m(x) := \frac{1}{e^x + 1} \quad \Rightarrow \quad n(E_{\vec{p}}) = m(\beta E_{\vec{p}})$$

$$\Rightarrow \quad \dot{n}(E_{\vec{p}}) = m'(\beta E_{\vec{p}})(\dot{\beta} E_{\vec{p}} + \beta \dot{E}_{\vec{p}}) = \underbrace{\frac{1}{\beta} \frac{\partial n}{\partial E_{\vec{p}}}}_{=m'(\beta E_{\vec{p}})} \left(-\frac{\beta E_{\vec{p}}}{T} + \beta \frac{\Delta \dot{\Delta}}{E_{\vec{p}}} \right).$$

Damit erhalten wir

$$c_V = T \dot{S} = -2kT \sum_{\vec{p}} \dot{n} \ln e^{-\beta E_{\vec{p}}} = 2 \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\beta} \frac{\partial n}{\partial E_{\vec{p}}} \left(-\frac{\beta E_{\vec{p}}}{T} + \beta \frac{1}{E_{\vec{p}}} \right) E_{\vec{p}}$$

$$= 2 \sum_{\vec{p}} \frac{\partial n}{\partial E_{\vec{p}}} \left(-\frac{E_{\vec{p}}}{T} + \frac{1}{2E_{\vec{p}}} \frac{d\Delta^2}{dT} \right) E_{\vec{p}}.$$

Für $T \rightarrow T_c \Rightarrow \Delta \rightarrow 0 \Rightarrow E_{\vec{p}} \rightarrow \xi_{\vec{p}}$ folgt daher mit Abschnitt 1.4

$$c_V = \sum_{\vec{p}} \frac{\partial n}{\partial \xi_{\vec{p}}} \left(-2 \frac{\xi_{\vec{p}}^2}{T} + \frac{d\Delta^2}{dT} \right) = \int d^3 \vec{p} \frac{\partial n}{\partial \xi_{\vec{p}}} \left(-2 \frac{\xi_{\vec{p}}^2}{T} + \frac{d\Delta^2}{dT} \right)$$

$$= \int \underbrace{g(\xi)}_{\approx g(E_F)=:g_F} d\xi \frac{\partial n}{\partial \xi} \left(-2 \frac{\xi^2}{T} + \frac{d\Delta^2}{dT} \right) = g_F \int d\xi \frac{\partial n}{\partial \xi} \left(-2 \frac{\xi^2}{T} + \frac{d\Delta^2}{dT} \right)$$

$$= -2g_F \int d\xi \frac{\partial n}{\partial \xi} \frac{\xi^2}{T} + g_F \int d\xi \frac{\partial n}{\partial \xi} \frac{d\Delta^2}{dT}.$$

In der Nähe von T_c entspricht der |BCS>-Zustand fast dem |Norm>-Zustand, also einfach einer vollen Fermi-Kugel. Da typischerweise $T_c \ll E_F$ gilt, können wir die Fermi-Dirac-Verteilung bei T_c daher mit der Sommerfeld-Näherung nähern:

$$\frac{\partial n}{\partial \xi} \approx -\delta(\xi) - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \delta''(\xi).$$

Beim ersten Term verschwindet die erste Ordnung der Sommerfeld-Näherung; hier müssen wir die zweite Ordnung mitnehmen und erhalten mit partieller Integration

$$-2g_F \int d\xi \frac{\partial n}{\partial \xi} \frac{\xi^2}{T} \approx 2g_F \int d\xi \left(\delta(\xi) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \delta''(\xi) \right) \frac{\xi^2}{T} = \frac{\pi^2}{3} g_F k^2 T \int d\xi \delta''(\xi) \xi^2$$

$$= \frac{\pi^2}{3} g_F k^2 T \int d\xi \delta''(\xi) \xi^2 = -\frac{2\pi^2}{3} g_F k^2 T \int d\xi \delta'(\xi) \xi = \frac{2\pi^2}{3} g_F k^2 T \int d\xi \delta(\xi)$$

$$= \frac{2\pi^2}{3} g_F k^2 T.$$

Für den zweiten Term genügt die erste Ordnung der Sommerfeld-Näherung. Mit

$$\Delta^2 \approx (3,06)^2 k^2 T_c^2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \quad \Rightarrow \quad \frac{d\Delta^2}{dT} = -(3,06)^2 k^2 T_c$$

folgt

$$g_F \int d\xi \frac{\partial n}{\partial \xi} \frac{d\Delta^2}{dT} \approx -g_F \int d\xi \delta(\xi) (-(3,06)^2 k^2 T_c) = (3,06)^2 g_F k^2 T_c.$$

Für $T \rightarrow T_c$ folgt somit insgesamt

$$c_V \approx \frac{2\pi^2}{3} g_F k^2 T_c + (3,06)^2 g_F k^2 T_c.$$

Man beachte: Bei dieser REchnung haben wir uns T_c von *unten* genähert. Für $T > T_c$ gilt $\Delta = 0$ und daher auch $d\Delta^2/dT = 0$. Der zweite Term trägt dann nicht bei. Insgesamt folgt also

$$c_V = \frac{2\pi^2}{3} g_F k^2 T_c + \begin{cases} (3,06)^2 g_F k^2 T_c, & T \nearrow T_c \\ 0, & T \searrow T_c \end{cases}$$

13 ELEKTRODYNAMIK VON SUPRALEITERN

13.1 Weg zur London-Gleichung

Ersetzt man in der Bewegungsgleichung

$$m\dot{\vec{v}} = q\vec{E}$$

die Geschwindigkeit \vec{v} durch den Strom $\vec{j} = nq\vec{v}$, wendet auf beiden Seiten der Gleichung die Rotation $\nabla \times$ an und nutzt schließlich die Maxwell-Gleichung

$$\nabla \times \vec{E} = -\dot{\vec{B}},$$

erhält man

$$\begin{aligned} \frac{m}{nq}\dot{\vec{j}} = q\vec{E} &\Leftrightarrow \frac{m}{\underbrace{nq^2}_{=: \gamma}}\nabla \times \dot{\vec{j}} = \underbrace{\nabla \times \vec{E}}_{-\dot{\vec{B}}} &\Leftrightarrow \gamma\nabla \times \dot{\vec{j}} = -\dot{\vec{B}} \\ &\Leftrightarrow \frac{d}{dt}(\gamma\nabla \times \vec{j} + \vec{B}) = 0. \end{aligned}$$

13.2 Alternative Formen der London-Gleichung

Wir haben die Gleichung

$$\gamma\nabla \times \vec{j} + \dot{\vec{B}} = 0$$

wie die Maxwell-Gleichung und Rotationsidentität

$$\nabla \times \dot{\vec{B}} = 4\pi\dot{\vec{j}}, \quad \nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B}.$$

Wir setzen das $\dot{\vec{j}}$ aus der Maxwell-Gleichung oben ein und nutzen $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ aus:

$$\frac{\gamma}{4\pi} \underbrace{\nabla \times (\nabla \times \vec{B})}_{-\nabla^2 \vec{B}} + \dot{\vec{B}} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \nabla^2 \vec{B} = \frac{4\pi}{\gamma} \dot{\vec{B}}.$$

Außerdem können wir das $\dot{\vec{B}}$ in der Gleichung $\gamma\nabla \times \vec{j} + \dot{\vec{B}} = 0$ durch $\nabla \times \vec{A}$ ersetzen:

$$\gamma\nabla \times \vec{j} + \nabla \times \vec{A} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \nabla \times (\gamma\vec{j} + \vec{A}) = 0.$$

Jedes Vektorfeld $\vec{F} = \vec{F}_{\text{div}} + \vec{F}_{\text{rot}}$ lässt sich aufteilen in einen divergenten \vec{F}_{div} und einen rotierenden Teil \vec{F}_{rot} mit

$$\nabla \times \vec{F}_{\text{div}} = 0, \quad \nabla \cdot \vec{F}_{\text{rot}} = 0.$$

Aus $\nabla \times \vec{F} = 0$ folgt also nicht zwingend $\vec{F} = 0$, es folgt nur $\vec{F}_{\text{rot}} = 0$. Im statischen Fall folgt jedoch aus der Kontinuitätsgleichung $\nabla \cdot \vec{j} = -\dot{\rho} = 0$ und wenn wir die Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ annehmen, können wir also tatsächlich

$$\nabla \times (\gamma\vec{j} + \vec{A}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{j} = -\gamma^{-1}\vec{A}$$

folgern.

13.3 London-Eindringtiefe

In unserem Koordinatensystem befinde sich bei $x > 0$ ein Supraleiter und bei $x < 0$ Vakuum oder ein normales Metall, in dem ein konstantes Magnetfeld

$$\vec{B} = B\vec{e}_z$$

vorherrsche. Die z -Komponente der ersten London-Gleichung ist dann

$$\nabla^2 B_z(x) = \frac{4\pi}{\gamma} B_z(x).$$

Wenn wir aufgrund der Symmetrie annehmen, dass B_z nur eine Funktion von x ist, können wir $\nabla^2 \rightarrow d^2/dx^2$ ersetzen. Daraus folgt mit $\lambda_L := \sqrt{\gamma/4\pi}$

$$B_z''(x) = \frac{1}{\lambda_L^2} B_z(x) \quad \Rightarrow \quad B_z(x) \sim e^{\pm x/\lambda_L}.$$

Mit der Stetigkeitsbedingung zum äußeren Feld $B_z(0) = B$ sowie der experimentell begründeten Bedingung, dass im Inneren eines Supraleiters (im Prinzip) kein Magnetfeld vorherrscht, wir also $B_z(x \rightarrow \infty) = 0$ erwarten, folgt

$$B_z(x) = B e^{-x/\lambda_L}.$$

13.4 Nullte Ordnung Störungstheorie – Kinetische Energie freier Elektronen

Mit $\vec{p} = -i\nabla$ und $\psi_\sigma(\vec{r}) = V^{-1/2} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}$ folgt (zum Vorfaktor des Kronecker-Deltas siehe Abschnitt 1.5)

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{p}^2 \psi_{\sigma}(\vec{r}) = \frac{-1}{2mV} \sum_{\sigma\vec{p}\vec{q}} \int d^3r e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \nabla^2 e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}\sigma} \\ &= \frac{-1}{2mV} \sum_{\sigma\vec{p}\vec{q}} \int d^3r (-\vec{q}^2) e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}\sigma} = \frac{1}{2mV} \sum_{\sigma\vec{p}\vec{q}} \vec{q}^2 V \delta_{\vec{q}\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}\sigma} = \sum_{\sigma\vec{p}} \frac{\vec{p}^2}{2m} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma}. \end{aligned}$$

Wendet man H_0 nun auf irgendeinen Zustand an, erhält man direkt die Summe der kinetischen Energie der freien Elektronen.

13.5 Teilchendichte in zweiter Quantisierung und diamagnetischer Strom

Integriert man über $\sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma}$, erhält man den Teilchenzahloperator:

$$\int d^3r \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\sigma\vec{p}\vec{q}} \int d^3r e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}\sigma} = \sum_{\sigma\vec{p}\vec{q}} \delta_{\vec{p}\vec{q}} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}\sigma} = \sum_{\sigma\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma}.$$

Daraus kann man schließen, dass $\sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma}$ alleine die Teilchendichte ist. Da \vec{A} einfach eine Funktion ist, die mit ψ_{σ} bzw. $c_{\vec{p}\sigma}$ kommutiert, folgt

$$\vec{j}_d(\vec{r}) = \frac{q}{m} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) (-q\vec{A}(\vec{r})) \psi_{\sigma}(\vec{r}) = -\frac{q^2}{m} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}) = -\frac{nq^2}{m} \vec{A}(\vec{r}) = -\gamma^{-1} \vec{A}(\vec{r}),$$

mit $\gamma = m/nq^2$.

13.6 Erwartungswerte im korrigierten Zustand

Der Stromfluss \vec{j}_p kommt erst durch das Feld \vec{A} zustande; im Grundzustand $|\text{BCS}\rangle$ hingegen ist der \vec{p} -Raum symmetrisch besetzt ($u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ lassen sich durch $E_{\vec{p}}, \xi_{\vec{p}}$ ausdrücken, siehe Abschnitt 12.1, und das sind Funktion von $|\vec{p}|$) und es fließt kein Strom, also gilt

$$\langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \text{BCS} \rangle = 0.$$

Wenn wir die Störung anschalten, ändert sich allerdings auch der Zustand, und in unserer störungstheoretischen Entwicklung bekommen wir als neuen Zustand $|\Phi\rangle$ einen um eine Korrektur $|\phi_1\rangle$ korrigierten alten Zustand:

$$|\Phi\rangle = |\text{BCS}\rangle + |\phi_1\rangle.$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \vec{j}_p | \Phi \rangle &= (\langle \text{BCS} | + \langle \phi_1 |) \vec{j}_p (|\text{BCS}\rangle + |\phi_1\rangle) \\ &= \underbrace{\langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \text{BCS} \rangle}_{=0} + \langle \phi_1 | \vec{j}_p | \text{BCS} \rangle + \langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \phi_1 \rangle + \mathcal{O}(\phi_1^2). \end{aligned}$$

13.7 Matrixelement mit Störungs-Hamilton-Operator

Zunächst extrahieren wir mal H_1 , den Störungsterm, aus dem gesamten Hamilton-Operator und bringen ihn in eine handhabbare Form.

Multipliziert man die Klammer im Hamilton-Operator aus, erhält man

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(\vec{p}^2 - q\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}) - q\vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{p} + \mathcal{O}(\vec{A}^2) \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}),$$

wobei $\vec{p} = -i\nabla$. Der \vec{p}^2 -Term ist die führende Ordnung H_0 . Man beachte, dass das \vec{p} in H auch über die Klammer hinaus auf $\psi_{\sigma}(\vec{r})$ wirkt. In der Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ gilt

$$\nabla \cdot \vec{A} f(\vec{r}) = f(\vec{r}) \underbrace{(\nabla \cdot \vec{A})}_{=0} + \vec{A} \cdot \nabla f(\vec{r}) = \vec{A} \cdot \nabla f(\vec{r}),$$

\vec{A} vertauscht also mit \vec{p} und wir erhalten für die Ordnung- \vec{A} -Terme

$$H_1 = \frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) (-2q\vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{p}) \psi_{\sigma}(\vec{r}) = -\frac{q}{m} \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{p} \psi_{\sigma}(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}).$$

Mit $\vec{p} = -i\nabla$ und $\psi_{\sigma}(\vec{r}) = V^{-1/2} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} c_{\vec{p}\sigma}$ sowie der Fourierzerlegung des Vektorpotentials

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \vec{a}_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

folgt

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{iq}{mV} \sum_{\sigma \vec{p}' \vec{p} \vec{q}} \int d^3r e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{r}} \nabla e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} c_{\vec{p}'\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma} \cdot \vec{a}_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{iq}{mV} \sum_{\sigma \vec{p}' \vec{p} \vec{q}} (i\vec{p} \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) \int d^3r e^{-i(\vec{p}' - \vec{p} - \vec{q}) \cdot \vec{r}} c_{\vec{p}'\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma} = \frac{iq}{mV} \sum_{\sigma \vec{p}' \vec{p} \vec{q}} (i\vec{p} \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) V \delta_{\vec{p}', \vec{p} + \vec{q}} c_{\vec{p}'\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma} \\ &= -\frac{q}{m} \sum_{\sigma \vec{p} \vec{q}} (\vec{p} \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) c_{\vec{p} + \vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma}. \end{aligned}$$

Wir sind nun am Matrixelement $\langle l|H_1|BCS\rangle$ interessiert. Da wir von den Leiteroperatoren der Quasiteilchen, des α 's, besser wissen, wie sie auf $|BCS\rangle$ wirken, als von den c 's, nutze wir die Umrechnungsformeln aus Abschnitt 12.2:

$$\begin{aligned} c_{\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} &= \left(u_{\vec{q}} \alpha_{\vec{q}\sigma}^\dagger + \tilde{\sigma} v_{\vec{q}} \alpha_{-\vec{q},-\sigma} \right) \left(u_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\sigma} + \tilde{\sigma} v_{\vec{p}} \alpha_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger \right) \\ &= u_{\vec{q}} u_{\vec{p}} \alpha_{\vec{q}\sigma}^\dagger \alpha_{\vec{p}\sigma} + \tilde{\sigma} u_{\vec{q}} v_{\vec{p}} \alpha_{\vec{q}\sigma}^\dagger \alpha_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger + \tilde{\sigma} u_{\vec{p}} v_{\vec{q}} \alpha_{-\vec{q},-\sigma} \alpha_{\vec{p}\sigma} + \tilde{\sigma}^2 v_{\vec{q}} v_{\vec{p}} \alpha_{-\vec{q},-\sigma} \alpha_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger. \end{aligned}$$

Die beiden Terme, in denen rechts ein Vernichtungsoperator steht, tragen nicht bei, da der Vernichtungsoperator auf den Grundzustand $|BCS\rangle$ trifft. Auch der letzte Term trägt nicht bei, selbst wenn der Vernichtungs- und Erzeugungsoperator dieselben Impulse tragen; denn $|l\rangle$ kann nicht den $|BCS\rangle$ -Zustand beschreiben, sondern nur angeregte Zustände, da in der Summe aus der Störungstheorie nur über $l \neq BCS$ summiert wird. Für unsere Matrix-Element folgt also (man beachte, dass in H_1 der Erzeugungsoperator den Impuls $\vec{p} + \vec{q}$ und nicht nur \vec{q} trägt):

$$\begin{aligned} \langle l|H_1|BCS\rangle &= -\frac{q}{m} \sum_{\sigma \vec{p} \vec{q}} (\vec{p} \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) \langle l | c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} | BCS \rangle \\ &= -\frac{q}{m} \sum_{\sigma \vec{p} \vec{q}} (\vec{p} \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) \tilde{\sigma} u_{\vec{p}+\vec{q}} v_{\vec{p}} \langle l | \alpha_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger \alpha_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger | BCS \rangle. \end{aligned}$$

Damit das Matrixelement in der Summe nicht verschwindet, muss $|l\rangle$ offensichtlich ein zwei-Teilchen-Zustand mit entgegengesetzten Spins sein. Wir schreiben daher $|l\rangle = |\vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma'\rangle$. Das ist aber noch nicht alles; die Impulse müssen natürlich auch übereinstimmen. Dazu gibt es zwei Möglichkeiten: Entweder passt $\vec{k}_1 \sigma'$ zum ersten oder zum zweiten Erzeugungsoperator (und $\vec{k}_2, -\sigma'$ zum jeweils anderes) – dann ergibt das Matrixelement 1, sonst 0. Die beiden Möglichkeiten können wir als Summe von Kronecker-Deltas schreiben:

$$\langle \vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma' | \alpha_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger \alpha_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger | BCS \rangle = \delta_{-\sigma\sigma'} \delta_{-\vec{p}\vec{k}_1} \delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}_2} - \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}_1} \delta_{-\vec{p}\vec{k}_2}.$$

Das relative Minuszeichen trägt der Tatsache Rechnung, dass wir es hier mit Fermionen zu tun haben; wir bekommen also auch einen Faktor -1 , wenn wir die beiden Erzeugungsoperatoren oder die Impulse \vec{k}_1, \vec{k}_2 vertauschen im Zustand vertauschen.

Somit bekommen wir

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma' | H_1 | BCS \rangle &= -\frac{q}{m} \sum_{\sigma \vec{p} \vec{q}} (\vec{p} \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) \tilde{\sigma} u_{\vec{p}+\vec{q}} v_{\vec{p}} \left(\delta_{-\sigma\sigma'} \delta_{-\vec{p}\vec{k}_1} \delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}_2} - \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}_1} \delta_{-\vec{p}\vec{k}_2} \right) \\ &= -\frac{q}{m} \sum_{\vec{q}} \left(-(-\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) \tilde{\sigma}' u_{-\vec{k}_1+\vec{q}} v_{\vec{k}_1} \delta_{-\vec{k}_1+\vec{q},\vec{k}_2} - ((\vec{k}_1 - \vec{q}) \cdot \vec{a}_{\vec{q}}) \tilde{\sigma}' u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_1-\vec{q}} \delta_{-\vec{k}_1+\vec{q},\vec{k}_2} \right) \\ &= -\frac{q}{m} \left(-(-\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{k}_1+\vec{k}_2}) \tilde{\sigma}' u_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_1} - (\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{k}_1+\vec{k}_2}) \tilde{\sigma}' u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} \right) \\ &= -\frac{q}{m} \tilde{\sigma}' (\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{k}_1+\vec{k}_2}) (u_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_1} - u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2}) = \frac{q \tilde{\sigma}'}{m} (\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{k}_1+\vec{k}_2}) (u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} - u_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_1}). \end{aligned}$$

Dabei haben wir $u_{-\vec{p}} = u_{\vec{p}}, v_{-\vec{p}} = v_{\vec{p}}$ sowie verwendet. Man beachte zudem, dass $\sum_{\sigma} \tilde{\sigma} \delta_{\pm\sigma\sigma'} = \pm \tilde{\sigma}'$ ergibt (zur Definition von $\tilde{\sigma}$ siehe Abschnitt 12.2). Zudem haben wir den Trick angewandt, im zweiten Term beim zweiten Gleichheitszeichen die \vec{p} -Summe kontraintuitiverweise mit dem ersten Kronecker-Delta $\delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}_1}$ zu eliminieren. Dadurch erhalten wir die Kombination $\vec{q} \cdot \vec{a}_{\vec{q}} = 0$. Dieses Skalarprodukt verschwindet in der Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ des Vektorpotentials:

$$\nabla \cdot \vec{A}(\vec{r}) = \nabla \cdot \sum_{\vec{q}} \vec{a}_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{q}} \vec{a}_{\vec{q}} \cdot \vec{q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall \vec{r} \quad \Rightarrow \quad \vec{q} \cdot \vec{a}_{\vec{q}} = 0.$$

Nur zum Verständnis: Mit diesem Ergebnis könnten wir jetzt die Störungstheorie-Summe über l in eine Summe über \vec{k}_1, \vec{k}_2 und σ' umschreiben, wobei alle Summenglieder sofort verschwinden, in denen $|l\rangle$ nicht genau zwei Teilchen enthält.

$$\begin{aligned}\langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \phi_1 \rangle &= \sum_{l \neq \text{BCS}} \frac{\langle l | H_1 | \text{BCS} \rangle}{E_{\text{BCS}} - E_l} \langle \text{BCS} | \vec{j}_p | l \rangle \\ &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \sigma} \frac{\langle \vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma' | H_1 | \text{BCS} \rangle}{E_{\text{BCS}} - E_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}} \langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma' \rangle.\end{aligned}$$

Soweit wollen wir allerdings gar nicht gehen. Stattdessen betrachten wir Grenzfälle, wie (>13.8).

13.8 Grenzfall eines konstanten Vektorpotentials

Wir hatten das Vektorpotential fourierzerlegt,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \vec{a}_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}.$$

Für $\vec{q} \rightarrow 0$ wird $\vec{A}(\vec{r})$ offensichtlich räumlich konstant. Für unser Matrixelement

$$\langle \vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma' | H_1 | \text{BCS} \rangle = \frac{q\sigma'}{m} (\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}) (u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} - u_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_1})$$

bedeutet dieser Limes offensichtlich $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow 0$ bzw. $\vec{k}_2 \rightarrow -\vec{k}_1$. Wegen $u_{-\vec{p}} = u_{\vec{p}}, v_{-\vec{p}} = v_{\vec{p}}$ folgt in diesem Limes offensichtlich

$$\langle \vec{k}_1, \sigma'; \vec{k}_2, -\sigma' | H_1 | \text{BCS} \rangle \rightarrow 0.$$

Man beachte, dass das q auf dem Bruchstrich vorne natürlich nach wie vor die Elektronenladung $q = -e < 0$ ist.

13.9 Verhalten für fast konstantes Vektorpotential

Wir beschränken uns für diese Analyse auf Impulse nahe der Fermi-Oberfläche, also nahe p_F , oder in anderen Worten auf $\xi_{\vec{p}} \ll E_{\vec{p}} \approx \Delta$ (siehe dazu die Grafik in Abschnitt 12.3). Dann folgt

$$\begin{aligned}u_{\vec{p}} v_{\vec{q}} - u_{\vec{q}} v_{\vec{p}} &= \sqrt{\frac{E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}} \sqrt{\frac{E_{\vec{q}} - \xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}}} - \sqrt{\frac{E_{\vec{q}} + \xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}}} \sqrt{\frac{E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{\xi_{\vec{p}}}{E_{\vec{p}}}} \sqrt{1 - \frac{\xi_{\vec{q}}}{E_{\vec{q}}}} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{\xi_{\vec{q}}}{E_{\vec{q}}}} \sqrt{1 - \frac{\xi_{\vec{p}}}{E_{\vec{p}}}} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}\right) \left(1 - \frac{\xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}}\right) - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}}\right) \left(1 - \frac{\xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}\right) + \mathcal{O}(\xi_{\vec{p}}^2/E_{\vec{p}}^2) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}} + \frac{\xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}\right) - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}} + \frac{\xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}}\right) + \mathcal{O}(\xi_{\vec{p}}^2/E_{\vec{p}}^2) = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_{\vec{p}}}{E_{\vec{p}}} - \frac{\xi_{\vec{q}}}{E_{\vec{q}}}\right) + \mathcal{O}(\xi_{\vec{p}}^2/E_{\vec{p}}^2) \\ &\approx \frac{1}{2\Delta} (\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{q}}).\end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir $E_{\vec{p}} \approx E_{\vec{q}} \approx \Delta$ genähert. Mit $\vec{\delta} = \vec{p} + \vec{q}$ folgt $\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{q}} = \xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}-\vec{\delta}}$, denn $\xi_{\vec{p}} = -\vec{p}$.

13.10 Phase im BCS-Zustand

Wenn wir die Annahme, dass $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ reell sind, verwerfen sollen, können wir

$$u_{\vec{p}} = |u_{\vec{p}}|e^{i\varphi_u}, \quad v_{\vec{p}} = |v_{\vec{p}}|e^{i\varphi_v}$$

schreiben, wobei $|u_{\vec{p}}|$ bzw. $|v_{\vec{p}}|$ dann genau die Größen sind, die wir bisher immer als $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ bezeichnet haben. Wir wollen an unserer Notation nichts ändern; wir wollen weiterhin die keine Beträge schreiben. Wir belassen $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ also so reell, wie sie immer waren und fügen die Phasen stattdessen direkt in die Definition des Zustands ein:

$$|\text{BCS}\rangle := \prod_{\vec{p}} \left(u_{\vec{p}} e^{i\varphi_u} + v_{\vec{p}} e^{i\varphi_v} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle = \prod_{\vec{p}} e^{i\varphi_u} \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} e^{i(\varphi_v - \varphi_u)} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle.$$

Die totale Phase des $|\text{BCS}\rangle$ -Zustands $\prod_{\vec{p}} e^{i\varphi_u}$ spielt physikalisch keine große Rolle; wir wollen sie nicht weiter betrachten. Stattdessen belassen wir es bei der relativen Phase $\varphi := \varphi_v - \varphi_u$ und schreiben

$$|\text{BCS}(\varphi)\rangle := \prod_{\vec{p}} \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} e^{i\varphi} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle.$$

Dadurch ändert sich nichts an den Ergebnissen unserer bisherigen Herleitungen. Beispielsweise wird zwar die Definition der Energielücke Δ aus Abschnitt 12.1 zu

$$\Delta := \Lambda \sum_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \rightarrow \Lambda \sum_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} e^{i\varphi} = \Delta e^{i\varphi},$$

wobei das Δ am Ende wieder unser altbekanntes, reelles Δ ist. In der Selbstkonsistenzgleichung aus (>12.7), mit der wir die Formel $\Delta = 2\omega_D e^{-1/\Lambda g(E_F)}$ hergeleitet haben, ändert sich jedoch nichts, denn die lautete

$$\Delta = \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}} \quad \rightarrow \quad \Delta e^{i\varphi} = \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{p} \in \mathcal{B}} \frac{\Delta e^{i\varphi}}{\sqrt{|\Delta e^{i\varphi}|^2 + \xi_{\vec{p}}^2}}$$

und dies entspricht wieder exakt der alten Gleichung. $\Delta = 2\omega_D e^{-1/\Lambda g(E_F)}$ ist also nach wie vor gültig.

14 SUPRALEITER IN LANDAU-THEORIE

14.1 Minimum des Landau-Funktional – Ortsunabhängig

Ableiten und gleich null setzen von

$$F[\psi] = a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 = a\psi\psi^* + \frac{b}{2}\psi\psi^*\psi\psi^*$$

nach ψ oder ψ^* liefert

$$\frac{\partial F}{\partial \psi} = \psi^*(a + b|\psi|^2) = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial \psi^*} = \psi(a + b|\psi|^2) = 0.$$

Somit gibt es die beiden Lösungen

$$|\psi| = 0, \quad |\psi| = \sqrt{-a/b}.$$

14.2 Minimum des Landau-Funktional – Ortsabhängig

Wir wollen das Funktional

$$F[\psi(\vec{r}), \vec{A}(\vec{r})] = a|\psi(\vec{r})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\vec{r})|^4 + \frac{1}{4m}|(-i\nabla - 2q\vec{A})\psi(\vec{r})|^2 + \frac{B_i^2}{8\pi}$$

nach $\psi(\vec{r})$ minimieren. Dazu wollen wir zunächst den dritten Term expliziter aufschreiben:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4m}|(-i\nabla - 2q\vec{A})\psi|^2 &= \frac{1}{4m}(-i\nabla\psi - 2q\vec{A}\psi) \cdot (i\nabla\psi^* - 2q\vec{A}\psi^*) \\ &= \frac{1}{4m}(\nabla\psi \cdot \nabla\psi^* + 2iq\nabla\psi \cdot \vec{A}\psi^* - 2iq\vec{A}\psi \cdot \nabla\psi^* + 4q^2\vec{A}^2|\psi|^2) \\ &= \frac{1}{4m}(\partial_i\psi)(\partial_i\psi^*) + \frac{iq}{2m}A_i(\psi^*\partial_i\psi - \psi\partial_i\psi^*) + \frac{q^2}{m}\vec{A}^2|\psi|^2. \end{aligned}$$

Die Minimierung von F bezüglich ψ^* liefert uns nun die Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = \frac{\partial F}{\partial \psi^*} - \partial_i \frac{\partial F}{\partial (\partial_i \psi^*)}.$$

Wir finden (analog zu (>14.1))

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \psi^*} &= a\psi + b\psi|\psi|^2 + \frac{iq}{2m} \underbrace{A_i \partial_i \psi}_{=(\vec{A} \cdot \nabla)\psi} + \frac{q^2}{m}\vec{A}^2\psi, \\ \partial_i \frac{\partial F}{\partial (\partial_i \psi^*)} &= \partial_i \left(\frac{1}{4m} \partial_i \psi - \frac{iq}{2m} A_i \psi \right) = \frac{1}{4m} \nabla^2 \psi - \frac{iq}{2m} \left((\nabla \cdot \vec{A})\psi + (\vec{A} \cdot \nabla)\psi \right) \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} 0 &= a\psi + b\psi|\psi|^2 + \frac{iq}{2m}(\vec{A} \cdot \nabla)\psi + \frac{q^2}{m}\vec{A}^2\psi - \frac{1}{4m}\nabla^2\psi + \frac{iq}{2m} \left((\nabla \cdot \vec{A})\psi + (\vec{A} \cdot \nabla)\psi \right) \\ &= a\psi + b\psi|\psi|^2 + \frac{1}{4m}(-\nabla^2 + 2iq(\nabla \cdot \vec{A}) + 4iq\vec{A} \cdot \nabla + 4q^2\vec{A}^2)\psi. \end{aligned}$$

Note that the following squared brackets gives precisely the last term of the above equation:

$$\begin{aligned} (-i\nabla - 2q\vec{A})^2 &= -\nabla^2 + 2iq \left((\nabla \cdot \vec{A}) + \vec{A} \cdot \nabla \right) + 2iq\vec{A} \cdot \nabla + 4q^2\vec{A}^2 \\ &= -\nabla^2 + 2iq(\nabla \cdot \vec{A}) + 4iq\vec{A} \cdot \nabla + 4q^2\vec{A}^2. \end{aligned}$$

Thus, in our case the Euler-Lagrange equation with respect to ψ^* reads

$$\alpha\psi + b\psi|\psi|^2 + \frac{1}{4m}(-i\nabla - 2q\vec{A})^2\psi = 0.$$

14.3 Minimum des Landau-Funktional – Ortsabhängig – Strom

Den Strom bekommen wir aus der Euler-Lagrange-Gleichung des Vektorpotentials

$$0 = \frac{\partial F}{\partial A_i} - \partial_j \frac{\partial F}{\partial(\partial_j A_i)}.$$

Da auch das Magnetfeld B_i im letzten Term des Landau-Funktional F von A_i abhängt, schreiben wir jenes zunächst um als

$$\frac{B_i^2}{8\pi} = \frac{1}{8\pi}(\nabla \times \vec{A})^2 = \frac{1}{8\pi}\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm}(\partial_j A_k)(\partial_l A_m).$$

(Achtung: Der Index i des Magnetfelds B_i steht für „induziert“ und ist kein Index einer Komponente). Das komplette Funktional, unter Berücksichtigung der Umformungen aus (>14.2), können wir also explizit schreiben als

$$F = \dots + \frac{iq}{2m}A_i(\psi^*\partial_i\psi - \psi\partial_i\psi^*) + \frac{q^2}{m}A_iA_i|\psi|^2 + \frac{1}{8\pi}\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm}(\partial_j A_k)(\partial_l A_m).$$

Das ... steht dabei für alle Terme, in denen das Vektorpotential A_i nicht auftaucht. Die Ableitungen in den Euler-Lagrange-Gleichungen liefern nun

$$\frac{\partial F}{\partial A_i} = \frac{iq}{2m}(\psi^*\partial_i\psi - \psi\partial_i\psi^*) + \frac{2q^2}{m}A_i|\psi|^2,$$

$$\begin{aligned} \partial_j \frac{\partial F}{\partial(\partial_j A_i)} &= \partial_j \left(\frac{1}{8\pi}\epsilon_{abk}\epsilon_{alm} \left(\frac{\partial(\partial_b A_k)}{\partial(\partial_j A_i)}(\partial_l A_m) + (\partial_b A_k) \frac{\partial(\partial_l A_m)}{\partial(\partial_j A_i)} \right) \right) \\ &= \frac{1}{8\pi}\partial_j (\epsilon_{aji}\epsilon_{alm}(\partial_l A_m) + \epsilon_{abk}\epsilon_{aji}(\partial_b A_k)) = \frac{1}{4\pi}\partial_j (\epsilon_{aji}\epsilon_{alm}(\partial_l A_m)) \\ &= -\frac{1}{4\pi}\epsilon_{ija}\partial_j(\nabla \times \vec{A})_a = -\frac{1}{4\pi}(\nabla \times \vec{B}_i)_i = -j_i, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Maxwell-Gleichung $\nabla \times \vec{B}_i = 4\pi\vec{j}$ verwendet wurde. Die Euler-Lagrange-Gleichungen können wir somit als Vektor-Gleichung schreiben als

$$\vec{j} = -\frac{iq}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2q^2}{m}\vec{A}|\psi|^2.$$

14.4 Variation der reellen Wellenfunktion

Angenommen, ψ sei reell, dann liefern die Euler-Lagrange-Gleichungen ganz analog zu (>14.2) die Gleichung

$$\alpha\psi + b\psi^3 + \frac{1}{4m}(-i\nabla - 2q\vec{A})^2\psi = 0.$$

Setzen wir eine Variation $\psi = \psi_0 + \delta\psi$ ein, wobei ψ_0 alleine obige Gleichung bereits erfüllt, erhalten wir

$$\psi^3 = (\psi_0 + \delta\psi)^3 = \psi_0^3 + 3\psi_0^2\delta\psi + \mathcal{O}(\delta\psi^2)$$

und somit, bis zur Ordnung $\delta\psi$ und für $\vec{A} = 0$

$$0 = a(\psi_0 + \delta\psi) + b(\psi_0^3 + 3\psi_0^2\delta\psi) + \frac{1}{4m}(-i\nabla)^2(\psi_0 + \delta\psi) = a\delta\psi + 3b\psi_0^2\delta\psi - \frac{1}{4m}\nabla^2\delta\psi$$

$$\Leftrightarrow (a + 3b\psi_0^2)\delta\psi = \frac{1}{4m}\nabla^2\delta\psi.$$

14.5 Kohärenzlänge des normalen Zustands

Im normalen Zustand ohne Supraleitung, also $\psi_0 = 0$, folgt in einer Dimension, also $\nabla \rightarrow d/dx$, aus der letzten Gleichung aus (>14.4)

$$a\delta\psi = \frac{1}{4m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\delta\psi \quad \Leftrightarrow \quad \delta\psi \sim e^{\pm\sqrt{4ma}x} = e^{\pm x/\xi}, \quad \xi = \frac{1}{\sqrt{4ma}} = \frac{1}{\sqrt{4m|a|}}$$

Man beachte, dass im normalen Zustand $a > 0$ ist (siehe Abschnitt 14.2), daher können wir in der Definition der Kohärenzlänge ohne weiteres $a \rightarrow |a|$ ersetzen.

14.6 Kohärenzlänge des supraleitenden Zustands

Für den supraleitenden Zustand $\psi_0 = \sqrt{-a/b}$ mit $a < 0$ folgt in einer Dimension aus der letzten Gleichung aus (>14.4)

$$\underbrace{\left(a + 3b\left(-\frac{a}{b}\right)\right)}_{=-2a=2|a|}\delta\psi = \frac{1}{4m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\delta\psi \quad \Leftrightarrow \quad \delta\psi \sim e^{\pm\sqrt{8m|a|x}} = e^{\pm\sqrt{2}x/\xi}, \quad \xi = \frac{1}{\sqrt{4m|a|}}$$

14.7 Externes Magnetfeld: Änderung des Landau-Funktional

Ersetzen wir im Landau-Funktional

$$F = a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{4m}|(-i\nabla - 2q\vec{A})\psi|^2 + \frac{B_i^2}{8\pi}$$

aus Abschnitt 14.3 das induzierte Magnetfeld durch das gesamte, $\vec{B}_i \rightarrow \vec{B} = \vec{H} + \vec{B}_i$ und fügen einen Term $-\vec{H} \cdot \vec{B}/4\pi$ hinzu, erhalten wir

$$F = \dots + \frac{B^2}{8\pi} - \frac{\vec{H} \cdot \vec{B}}{4\pi} = \dots + \frac{(\vec{H} + \vec{B}_i)^2 - 2\vec{H} \cdot (\vec{H} + \vec{B}_i)}{8\pi}$$

$$= \dots + \frac{\vec{H}^2 + 2\vec{H} \cdot \vec{B}_i + \vec{B}_i^2 - 2\vec{H}^2 - 2\vec{H} \cdot \vec{B}_i}{8\pi} = \dots + \frac{\vec{B}_i^2 - \vec{H}^2}{8\pi}.$$

14.8 Reduzierte Freie Energie I

Mit

$$\tilde{\psi} := \psi/\psi_0, \quad \tilde{r} := \vec{r}/\lambda_L, \quad \tilde{B}_i := B_i/\sqrt{2}H_c, \quad \tilde{A} := \vec{A}/\sqrt{2}H_c\lambda_L$$

sowie

$$\psi_0 = \sqrt{-\frac{a}{b}}, \quad \lambda_L = \sqrt{\frac{m}{4\pi q^2 n_s}} = \sqrt{\frac{m}{8\pi q^2 |\psi_0|^2}} = \sqrt{-\frac{mb}{8\pi q^2 a}}, \quad H_c = \sqrt{\frac{4\pi a^2}{b}}, \quad \xi = \frac{1}{\sqrt{4m|a|}}$$

$$\Rightarrow H_c\lambda_L = \sqrt{\frac{m|a|}{2q^2}} = \frac{1}{2\sqrt{2}q\xi}$$

folgt $\nabla = \lambda_L^{-1} \tilde{\nabla}$ sowie

$$\begin{aligned}
F &= a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{4m}|(-i\nabla - 2q\vec{A})\psi|^2 + \frac{B_i^2}{8\pi} \\
&= a\psi_0^2|\tilde{\psi}|^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4|\tilde{\psi}|^4 + \frac{1}{4m}\left|(-i\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - 2\sqrt{2}H_c\lambda_L q\tilde{A})\psi_0\tilde{\psi}\right|^2 + \frac{2H_c^2\tilde{B}_i^2}{8\pi} \\
&= \frac{-a^2}{b}|\tilde{\psi}|^2 + \frac{a^2}{2b}|\tilde{\psi}|^4 + \frac{1}{4m}\left|(-i\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - \frac{1}{\xi}\tilde{A})\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi}\right|^2 + \frac{a^2}{b}\tilde{B}_i^2 \\
&= \frac{-a^2}{b}|\tilde{\psi}|^2 + \frac{a^2}{2b}|\tilde{\psi}|^4 - \frac{a}{b}\underbrace{\frac{1}{4m\xi^2}}_{=|a|}\left|(-i\xi\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right|^2 + \frac{a^2}{b}\tilde{B}_i^2.
\end{aligned}$$

Mit $-a|a| = a^2$ (für $a < 0$) sowie $\kappa := \lambda_L/\xi$ folgt somit

$$\tilde{F} := \frac{b}{a^2}F = -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left|(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right|^2 + \tilde{B}_i^2.$$

14.9 Reduzierte Euler-Lagrange-Gleichungen

Mit denselben Größen wie in (>14.8) folgt für die ψ^* -Euler-Lagrange-Gleichung

$$\begin{aligned}
0 &= a\psi + b\psi|\psi|^2 + \frac{1}{4m}(-i\nabla - 2q\vec{A})^2\psi \\
&= a\psi_0\tilde{\psi} + b\psi_0^3\tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{4m}\left(-i\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - 2\sqrt{2}H_c\lambda_L q\tilde{A}\right)^2\psi_0\tilde{\psi} \\
&= a\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi} - a\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{4m}\left(-i\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - \frac{1}{\xi}\tilde{A}\right)^2\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi} \\
&= a\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi} - a\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \sqrt{-\frac{a}{b}}\frac{1}{4m\xi^2}\left(-i\xi\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)^2\tilde{\psi} \\
&= a\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi} - a\sqrt{-\frac{a}{b}}\tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \sqrt{-\frac{a}{b}}\underbrace{|a|}_{=-a}\left(-i\xi\lambda_L^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)^2\tilde{\psi} \\
\Leftrightarrow \quad 0 &= -\tilde{\psi} + \tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \left(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)^2\tilde{\psi}.
\end{aligned}$$

Für die \vec{A} -Euler-Lagrange-Gleichung (also den Strom) folgt

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= -\frac{iq}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2q^2}{m}\vec{A}|\psi|^2 = -\frac{iq}{2m}\psi_0^2\lambda_L^{-1}(\tilde{\psi}^*\tilde{\nabla}\tilde{\psi} - \tilde{\psi}\tilde{\nabla}\tilde{\psi}^*) - \frac{2q^2}{m}\sqrt{2}H_c\lambda_L\psi_0^2\tilde{A}|\tilde{\psi}|^2 \\
&= -\frac{iq}{2m}\psi_0^2\lambda_L^{-1}(\tilde{\psi}^*\nabla\tilde{\psi} - \tilde{\psi}\nabla\tilde{\psi}^*) - \frac{q}{m\xi}\psi_0^2\tilde{A}|\tilde{\psi}|^2 \\
\Leftrightarrow \quad \vec{j} &:= \frac{m\xi}{q\psi_0^2}\vec{j} = -\frac{i}{2\kappa}(\tilde{\psi}^*\nabla\tilde{\psi} - \tilde{\psi}\nabla\tilde{\psi}^*) - \tilde{A}|\tilde{\psi}|^2.
\end{aligned}$$

Man beachte, dass man den Proportionalitätsfaktor zwischen \vec{j} und \vec{j} auch als

$$\frac{m\xi}{q\psi_0^2} = 8\pi q\xi\lambda_L^2$$

schreiben kann. Zudem folgt aus den Maxwell-Gleichungen mit $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$

$$\begin{aligned}
\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) &= 4\pi\vec{j} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_L^{-2}\sqrt{2}H_c\lambda_L\tilde{\nabla} \times (\tilde{\nabla} \times \tilde{A}) = 4\pi\frac{1}{8\pi q\xi\lambda_L^2}\vec{j} \\
\Leftrightarrow \quad \tilde{\nabla} \times (\tilde{\nabla} \times \tilde{A}) &= \vec{j}.
\end{aligned}$$

14.10 Reduzierte Freie Energie II

Die freie Energie lässt sich nun auch schreiben als

$$\begin{aligned}\tilde{F} &= -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left|(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right|^2 + \tilde{B}_i^2 \\ &= -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left((-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right)\left((-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right)^* + \tilde{B}_i^2 \\ &= -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left((-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right)\left(i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)\tilde{\psi}^* + \tilde{B}_i^2.\end{aligned}$$

Da \tilde{F} in der Landau-Theorie stets unter einem Volumenintegral steht, können wir das $\tilde{\nabla}$ aus der zweiten Klammer per partieller Integration auf die erste Klammer übertragen. Das Übertragen des Vektorpotentials ist ohnehin kein Problem, da es keine Ableitung oder Ähnliches enthält:

$$\begin{aligned}\tilde{F} &= -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left((-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\right)\left(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)\tilde{\psi}\tilde{\psi}^* + \tilde{B}_i^2 \\ &= -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left((-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\right)^2\tilde{\psi}\tilde{\psi}^* + \tilde{B}_i^2.\end{aligned}$$

Aus der reduzierten Euler-Lagrange-Gleichung

$$-\tilde{\psi} + \tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \left(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)^2\tilde{\psi} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)^2\tilde{\psi} = \tilde{\psi} - \tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2.$$

Setzen wir dies in \tilde{F} ein, erhalten wir

$$\tilde{F} = -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left(\tilde{\psi} - \tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2\right)\tilde{\psi}^* + \tilde{B}_i^2 = -\frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \tilde{B}_i^2.$$

14.11 Keine freie Energiedifferenz beim Kritischen Externen Feld

Wir haben F im Abschnitt 14.1 als Differenz der freien Energie zwischen dem normalen und dem supraleitenden Zustand definiert. Das heißt, dass wir für $H < H_c$ ein negatives F bekommen müssen, wenn wir den Ordnungsparameter für die supraleitende Phase einsetzen, also $\psi = \psi_0 = \sqrt{-a/b}$ bzw. $\tilde{\psi} = 1$. Und natürlich sollten wir $F = 0$ bekommen, falls wir den Ordnungsparameter für die normale Phase einsetzen, also $\psi = \tilde{\psi} = 0$. Zusätzlich müssen wir nun aber noch das magnetische Feld beachten. Für den normalen Zustand ist das externe Feld \vec{H} gleich dem gesamten internen Feld \vec{B} , dass im Allgemeinen Superposition aus dem externen Feld und dem induzierten Feld durch supraleitenden Ströme ist:

$$\vec{B} = \vec{H} + \vec{B}_i.$$

Im normalen Zustand ist jedoch $\vec{B}_i = \vec{B} = 0$ also $\vec{B} = \vec{H}$. Zudem ist $\tilde{\psi} = 0$. Somit bekommen wir trivialerweise

$$\tilde{F} = -\frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^2 + \tilde{B}_i^2 = 0.$$

Betrachten wir als nächstes den supraleitenden Zustand. Hier gilt $\vec{B}_i = \vec{B} - \vec{H} = -\vec{H}$, da es in einem Supraleiter kein Magnetfeld \vec{B} gibt. Zudem haben wir, wie bereits erläutert, $\tilde{\psi} = 1$. Bei $\vec{H} \rightarrow \vec{H}_c$ folgt somit

$$\tilde{F} = -\frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^2 + \tilde{B}_i^2 = -\frac{1}{2} + \tilde{H}_c^2.$$

Die reduzierten Magnetfelder (sowohl B - als auch H -Felder) haben wir in Abschnitt 14.6 definiert als

$$\tilde{\vec{B}} = \frac{1}{\sqrt{2}H_c} \vec{B} \quad \Rightarrow \quad \tilde{H}_c = \frac{1}{\sqrt{2}H_c} H_c \quad \Rightarrow \quad \tilde{H}_c^2 = \frac{1}{2}.$$

Somit folgt auch für die supraleitende Phase bei H_c , dass $\tilde{F} = 0$. Dieses Ergebnis ist natürlich trivial und zeigt nichts als die Konsistenz unserer Annahmen und Rechnungen.