

Theorie der Kondensierten Materie

Zusammenfassung/Übersicht

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)

Referenzen der Form „(>3.5)“ beziehen sich im Gegensatz zu „3.5“ auf das separate Skript *Hintergrundrechnungen*, wo vollständig ausgeführte Rechnungen zu finden sind, die hier zugunsten einer besseren Übersicht ausgelassen wurden.

Ich veröffentliche diese *Zusammenfassung/Übersicht* wie auch das zugehörigen separate Dokument *Hintergrundrechnungen* inklusive der Grafiken unter der Creative-Commons-Lizenz

[CC 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

0	Über dieses Skript	2
0.1	Hintergrundrechnungen und Verweise	2
0.2	Notation und Konventionen	2
1	Gitter und Bloch-Theorem	3
1.1	Bravais-Gitter	3
1.2	Laue- und Bragg-Bedingung	3
1.3	Born-van-Kármán-Randbedingungen	3
1.4	Summen als Integrale schreiben	3
1.5	Fouriertransformationen und Delta-Funktionen	3
1.6	Translationen	4
1.7	Bloch-Theorem	4
1.8	Schrödinger-Gleichung für Bloch-Zustände	4
1.9	Eigenschaften der Bloch-Zustände	4
1.10	Strukturfaktor	4
2	Elektronen in Festkörpern	5
2.1	Fast-freie Elektronen	5
2.2	Tight-Binding Model	5
2.3	Tight-Binding Model – Alternative Herleitung	5
3	Dynamik unter externen Feldern	6
3.1	Effektiver Band-Hamilton-Operator	6
3.2	Effektive Masse	6
3.3	Lösung der Bewegungsgleichungen	7
3.4	Semiklassische Quantisierung: Landau-Niveaus	7
3.5	Löcher	7
4	Magnetismus	8
4.1	Magnetische Suszeptibilität	8
4.2	Bohr-van-Leeuwen-Theorem	8
4.3	Pauli-Paramagnetismus	8
4.4	Landau-Diamagnetismus	8
4.5	De-Haas-van-Alphen-Effekt	8
5	Die Berry-Phase	9
5.1	Adiabatisches Theorem	9
5.2	Die Berry-Phase	9
5.3	Berry-Phase und Bloch-Funktionen	9
6	Beispiel: Graphen	10
6.1	Gittereigenschaften	10
6.2	Bandstruktur	10
6.3	Landau-Niveaus	10
6.4	Die Berry-Phase bei Graphen	10
7	Boltzmann-Gleichung	11
7.1	Herleitung	11
7.2	Das Stoßintegral für Stöße an Störstellen	11
7.3	Relaxationszeit-Näherungen für das Stoßintegral	11
7.4	Drude-Leitfähigkeit	12
7.5	Elektrischer Strom und Wärmestrom	12
7.6	Hall-Effekt	13
7.7	Quanten-Hall-Effekt (qualitativ)	13
8	Zweite Quantisierung	14
8.1	Bosonen	14
8.2	Beispiel: Hamilton-Operator für Bosonen	14
8.3	Fermionen	14
9	Wechselwirkungen	15
9.1	Korrelationsfunktionen freier Fermionen	15
9.2	Wechselwirkendes Fermi-Gas: Hartree-Fock	15
9.3	Anregungen in Fermi-Gas und -Flüssigkeit	16
9.4	Fermi-Flüssigkeit und Landau-Funktion	16
9.5	Nullter Schall (Zero Sound)	17
10	Phononen	18
10.1	Born-Oppenheimer-Approximation	18
10.2	Gitterschwingungen	18
10.3	Quantisierung von Phononen	19
10.4	Thermische Eigenschaften von Phononen	19
10.5	Neutronenstreuung	20
11	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	21
11.1	Thomas-Fermi-Abschirmung	21
11.2	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	21
11.3	Elektron-Elektron-Wechselwirkungen via Phononen	22
11.4	Cooper-Problem	22
12	BCS-Theorie	23
12.1	BCS-Theorie	23
12.2	Anregungen: Neue Leiteroperatoren	23
12.3	Mean-Field-Theorie	24
12.4	Endliche Temperaturen	24
13	Elektrodynamik von Supraleitern	25
13.1	London-Gleichungen – Makroskopische Motivation	25
13.2	London-Gleichungen – Mikroskopische Herleitung	25
13.3	Kritische Teilchendichte und kritisches Magnetfeld	26
13.4	BCS-Zustand mit Phase	26
14	Supraleiter in Landau-Theorie	27
14.1	Idee	27
14.2	Landau-Theorie (ohne Ortsabhängigkeit)	27
14.3	Ginsburg-Landau-Theorie (mit Ortsabhängigkeit)	27
14.4	Kohärenzlänge	27
14.5	Externes Magnetfeld	27
14.6	Reduzierte Größen, Ginsburg-Landau-Parameter	28
14.7	Oberflächenenergie	28

0 Über dieses Skript

0.1 Hintergrundrechnungen und Verweise

HINTERGRUNDRECHNUNGEN:

Das vorliegende Skript *Zusammenfassung/Übersicht* geht Hand-in-Hand mit dem zugehörigen separaten Skript *Hintergrundrechnungen*. Während in der *Zusammenfassung/Übersicht* häufig nur die Ergebnisse sowie die wichtigsten Zwischenschritte angegeben sind, sind im Skript *Hintergrundrechnungen* alle Zwischenschritte ausführlich ausgeführt. Auch Hinweise, weiterführende Erläuterungen und Randnotizen finden sich dort. Das Skript *Hintergrundrechnungen* bildet eine Art Anhang zum Skript *Zusammenfassung/Übersicht*.

VERWEISE:

Werden in der *Zusammenfassung/Übersicht* Rechenschritte weggelassen, die in den *Hintergrundrechnungen* zu finden sind, so ist dies in jedem Fall durch einen Verweis auf den entsprechenden Abschnitt in den *Hintergrundrechnungen* gekennzeichnet.

Ein Verweis von der Form

$$(>X.X), \quad \text{z. B. } (>2.10),$$

verweist stets auf einen bestimmten Abschnitt im Skript *Hintergrundrechnungen*.

Ein Verweis von der Form

$$X.X, \quad \text{z. B. } 2.10,$$

verweist stets auf einen bestimmten Abschnitt im Skript *Zusammenfassung/Übersicht*.

0.2 Notation und Konventionen

EINHEITENSYSTEM:

Wir verwenden fast durchgängig natürliche Einheiten, das heißt $\hbar = c = 1$. Insbesondere unterscheiden wir nicht zwischen einem Impuls- und einem Wellenvektor.

INTEGRATIONSMASS:

Für das gewöhnliche d -dimensionale Integrationsmaß verwenden wir die Notation

$$d^d x := dx_1 dx_2 \cdots dx_d.$$

Wir verwenden *nicht* etwa $d^d \vec{x}$.

In 1.4 definieren wir das Impuls-Integrationsmaß mit einem Querstrich wie folgt:

$$d^3 \bar{p} := \frac{d^3 p}{(2\pi)^3/V}.$$

Äquivalent natürlich auch für k, q, \dots statt p , zum Beispiel $d^3 \bar{k}$.

Wir werden im gesamten Skript regen Gebrauch von dieser abkürzenden Schreibweise für obiges Integrationsmaß machen. Weitere Details hierzu finden sich in Abschnitt 1.4.

FOURIERTRANSFORMATION:

Eine Übersicht über die verschiedenen Formen der Fouriertransformation findet sich in 1.5.

EINSTEIN'SCHE SUMMENKONVENTION:

In diesem Skript wird manchmal Gebrauch von der Einstein'schen Summenkonvention gemacht, ohne dass dies explizit dazugesagt wird. Treten doppelte Indizes auf, so ist in der Regel eine Summe impliziert; anderenfalls wird dies explizit erwähnt, zumindest, wenn es nicht aus dem Kontext klar hervorgeht.

Gleich im Abschnitt 1.1 gilt beispielsweise

$$\vec{R} = n_i \vec{a}_i \equiv \sum_{i=1}^n n_i \vec{a}_i.$$

1 Gitter und Bloch-Theorem

1.1 Bravais-Gitter

DEFINITION, GITTERVEKTOR:

Ein *Bravais-Gitter* ist eine unendliche Anordnung diskreter Punkte, deren Orientierung und Ordnung von *jedem* Punkt aus gesehen dieselbe ist. Jeder Punkt ist definiert durch einen Gittervektor

$$\vec{R} = n_i \vec{a}_i, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad \vec{a}_i \in \mathbb{R}^n, \quad i = 1, \dots, n.$$

ELEMENTARZELLE:

Jedes Raumvolumen, das bei Verschiebung um alle Gittervektoren \vec{R} des Bravais-Gitters den Raum vollständig ausfüllt ist eine *Elementarzelle* oder *primitive Einheitszelle*. Die *Wigner-Seitz-Zelle* ist diejenige Elementarzelle, die als Raumbereich um einen Gitterpunkt herum definiert ist, der diesem Punkt näher als jedem anderen Punkt ist.

REZIPROKES GITTER:

Die diskrete Menge aller Wellenvektoren \vec{K} , die ebene Wellen mit der Periodizität des Bravais-Gitters liefern, heißt *reziprokes Gitter*:

$$e^{i\vec{K} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \iff e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} = 1 \iff \vec{K} \in \text{rez. Gitter.}$$

Explizit lauten die Basisvektoren des reziproken Gitters

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2,$$

wobei $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$. Daraus folgt direkt

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}.$$

Mit $\vec{K} = m_i \vec{b}_i$ folgt direkt die Definition $e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} = 1$. Das reziproke Gitter des reziproken Gitters ist das ursprüngliche Ausgangsgitter. Die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters heißt *Erste Brillouin-Zone* (kurz „1. BZ“).

1.2 Laue- und Bragg-Bedingung

LAUE-BEDINGUNG:

Bei Streuung an einem Gitter mit einfallendem Wellenvektor \vec{k} und ausfallendem Wellenvektor \vec{k}' kommt es genau dann zur konstruktiven Interferenz, falls es einen reziproken Gittervektor \vec{K} gibt, für den gilt, dass (>1.1)

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

BRAGG-BEDINGUNG:

Die Bragg-Bedingung lautet (>1.2)

$$n\lambda = 2d \sin \theta.$$

1.3 Born-van-Kármán-Randbedingungen

BORN-VAN-KÁRMÁN-RANDBEDINGUNGEN:

Man betrachte einen endlichen Kristall mit N_i Elementarzellen entlang des Basisvektors \vec{a}_i , also mit insgesamt $N = \prod_i N_i$ Elementarzellen. Die Randbedingungen

$$\psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r})$$

(ohne Summe über i) heißen dann *Born-von-Kármán-Randbedingungen*. Eine 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 diese Randbedingungen automatisch (>1.3). Somit werden nur diskrete \vec{q} 's im reziproken Raum betrachtet.

1.4 Summen als Integrale schreiben

SUMME ALS INTEGRAL SCHREIBEN:

Für große N_i liegen die verschiedenen $\vec{q}_{\{m_i\}}$ sehr dicht beieinander. In diesem Limes, können wir Summen über \vec{q} wie folgt als Integral schreiben (>1.4):

$$\sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \rightarrow \int d^3\vec{q} f(\vec{q}), \quad d^3\vec{q} := \frac{d^3q}{(2\pi)^3/V}.$$

Von der Abkürzung $d^3\vec{q}$ werden wir fortan regen Gebrauch machen.

IMPULSSUMME IN ENERGIEINTEGRAL UMWANDELN:

Um statt über Impulse \vec{q} über Energien \mathcal{E} zu integrieren, können wir stets (>1.5)

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

schreiben, insofern die Energie nur vom Betrag von \vec{q} abhängt. $g(\mathcal{E})$ ist die Zustandsdichte im Energieraum. Darüber hinaus gilt $d\Omega_{\vec{q}}/4\pi = 1$, falls der Integrand unabhängig von der Richtung von \vec{q} ist. Somit folgt also direkt

$$\sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \rightarrow \int g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \frac{d\Omega_{\vec{q}}}{4\pi} f(\vec{q}),$$
$$\sum_{\vec{q}} f(\mathcal{E}(|\vec{q}|)) \rightarrow \int g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} f(\mathcal{E}),$$

wobei \vec{q} eine Funktion von \mathcal{E} und der Richtung von \vec{q} ist.

1.5 Fouriertransformationen und Delta-Funktionen

STANDARD (>1.6):

Für die Standard-Fouriertransformation verwenden wir

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

Diese Konvention hat den Vorteil, dass $f(\vec{q})$ und $f(\vec{r})$ dieselbe Dimension haben. Daraus folgt auch

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

DISKRETE \vec{q} (>1.7):

Unter Born-van-Kármán-Randbedingungen aus 1.3 sind die \vec{q} 's diskret und das Integral über \vec{q} lässt sich als Summe schreiben. In Konsistenz zur obigen Standard-Fouriertransformation folgt

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

Schreibt man das \vec{q} -Integral als Summe, bietet es sich auch an, die δ -Funktion als Kronecker-Delta zu schreiben:

$$\int d^3r e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} = V \delta_{\vec{q}0}, \quad \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = V \delta(\vec{r}).$$

IN \vec{R} PERIODISCHE FUNKTIONEN (>1.8):

Falls $f(\vec{r} + \vec{R}) = f(\vec{r})$ gilt, verschwinden alle Fourierkomponenten außer jenen, mit reziproken Gittervektoren:

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

sowie

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

FUNKTIONEN VON \vec{R} MIT DISKRETEM \vec{q} (>1.9):

Funktionen, die nur von Gittervektoren \vec{R} abhängen, sind periodisch in \vec{Q} . In diesem Fall gilt

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

sowie

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

1.6 Translationen

ZERLEGUNG EINER SYMMETRIEOPERATION:

Jede Symmetrieoperation S eines Bravais-Gitters kann zerlegt werden in eine Translation $T_{\vec{R}}$ um einen Gittervektor \vec{R} und eine Punktsymmetrieoperation (>1.10).

TRANSLATIONSOPERATOR:

Der Translationsoperator $T_{\vec{R}}$ mit $T_{\vec{R}}f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$ ist unitär, $T_{\vec{R}}^{-1} = T_{\vec{R}}^\dagger$ und kommutiert mit dem Hamilton-Operator eines periodischen Gitters, $[T_{\vec{R}}, H] = 0$ (>1.11).

1.7 Bloch-Theorem

HAMILTONIAN:

Man betrachte freie Elektronen in einem periodischen Potential,

$$H = -\frac{1}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}), \quad U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}).$$

BLOCH-THEOREM:

Das Bloch-Theorem besagt, dass alle Eigenzustände die Form

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

haben, wobei \vec{k} nur Element der ersten Brillouin-Zone und $u_{n,\vec{k}}$ die Bloch-Funktion ist. Der Beweis wird in (>1.12) ausgeführt.

1.8 Schrödinger-Gleichung für Bloch-Zustände

SCHRÖDINGER-GLEICHUNG FÜR BLOCH-KOEFFIZIENTEN:

Setzt man die Fourierentwicklung der Wellenfunktion und des Potentials mit Koeffizienten $c_{\vec{q}}$ bzw. $U_{\vec{q}}$ in die Schrödinger-Gleichung ein, so erhält man (>1.13)

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

$c_{\vec{q}}$'s deren \vec{q} 's nicht um \vec{Q} gegeneinander verschoben sind, sind unabhängig. Alle \vec{q} 's die um ein \vec{Q} gegeneinander verschoben sind, gehören zur selben „Familie“. Sei ein $\vec{k} \in 1. \text{ BZ}$ ein Repräsentant der Familie, dann gehört ein beliebiges \vec{q} zur Familie, falls ein \vec{Q} existiert mit $\vec{q} = \vec{k} + \vec{Q}$. Für jede solche Familie, definiert durch die Wahl des \vec{k} , gilt dann

$$\left(E - \frac{1}{2m}(\vec{k} + \vec{Q})^2\right) c_{\vec{k}+\vec{Q}} = \sum_{\vec{q}'} U_{\vec{q}'} c_{\vec{k}+\vec{Q}-\vec{q}'}$$

Innerhalb einer Familie dient nun \vec{Q} als Variable der Funktion $c_{\vec{k}+\vec{Q}} \hat{=} c_{\vec{k}}(\vec{Q})$, die die obige Gleichung löst. Da es mehrere solcher Lösungen für jede Familie gibt, ist ein weiterer Index n zu ergänzen, also $c_{\vec{k}+\vec{Q}} \rightarrow c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}$ und entsprechend $E \rightarrow E_{n,\vec{k}}$.

FOLGEN FÜR DIE WELLENFUNKTION:

Damit gilt für die Wellenfunktion nach der Ersetzung $\vec{q} \rightarrow \vec{k} + \vec{Q}$

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

wobei die Bloch-Funktion

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

wegen $e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}}$ periodisch in \vec{R} ist. Diese Herleitung kann ebenso als Beweis des Bloch-Theorems gelten, wie (>1.12).

SCHRÖDINGER-GLEICHUNG FÜR BLOCH-ZUSTÄNDE:

Als Schrödinger-Gleichung für $u_{n,\vec{k}}$ folgt (>1.14)

$$\left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m}(\vec{k} - i\nabla)^2\right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = U(\vec{r}) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}).$$

QUASI-IMPULS:

Man beachte, dass \vec{k} nicht der Impuls ist in dem Sinne, dass \vec{k} kein Eigenwert des Impulsoperator ist:

$$\hat{p} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = (-i\nabla) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \neq \vec{k} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}).$$

Man nennt \vec{k} daher Quasi- oder Kristall-Impuls.

1.9 Eigenschaften der Bloch-Zustände

FOURIERTRANSFORMATION:

Wie wir bereits in 1.8 gesehen haben, können wir die Bloch-Funktionen wie folgt fouriertransformieren:

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

wobei \vec{Q} reziproke Gittervektoren sind.

NORMIERUNG:

Als Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sind Bloch-Zustände orthogonal. Sie werden üblicherweise auf ein Volumen normiert, das heißt

$$\frac{1}{V} \langle \psi_{n,\vec{k}} | \psi_{n',\vec{k}'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

Dies liefert für die Fourierkoeffizienten (>1.15)

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

VOLLSTÄNDIGKEIT:

Auch die Vollständigkeit der Bloch-Funktionen daraus, dass sie Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sind. Analog zur Normierung auf ein Volumen gilt

$$\frac{1}{V} \sum_{n,\vec{k} \in 1. \text{ BZ}} \psi_{n,\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}') = \delta(\vec{r}' - \vec{r}).$$

Dies liefert für die Fourierkoeffizienten (>1.16)

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

1.10 Strukturfaktor

Man betrachte ein Gitter \vec{R} mit einer mehratomigen Basis $\{\vec{a}_i\}$. Wenn an jedem Basisvektor dieselben Atome sitzen, gilt

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{R},i} \varphi(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{a}_i)),$$

wobei φ das atomare Potential ist. Die Fourierkoeffizienten dieses Potentials sind nun (>1.17)

$$U_{\vec{Q}} = \frac{1}{\Omega} S_{\vec{Q}} \varphi_{\vec{Q}}, \quad S_{\vec{Q}} = \sum_j e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{a}_j}, \quad \varphi_{\vec{Q}} = \int d^3r \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}.$$

Falls die Basis einatomig mit $\vec{a}_1 = 0$ wäre, wäre einfach $S_{\vec{Q}} = 1$.

2 Elektronen in Festkörpern

2.1 Fast-freie Elektronen

LEERES GITTER:

Für $U(\vec{r}) = 0$ lautet die Schrödinger-Gleichung aus 1.8

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

Jedes n liefert eine andere Lösung $c_{n,\vec{k}+\vec{Q}}$ mit Energie $E_{n,\vec{k}}$. Für eine nicht-triviale Lösung mit Quantenzahl n muss

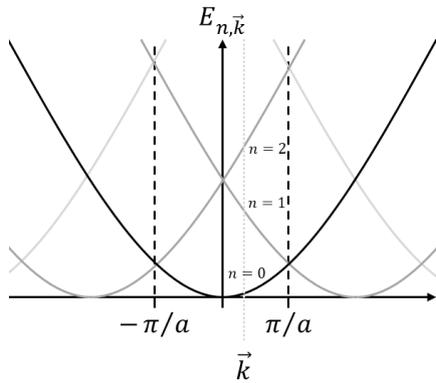
$$E_{n,\vec{k}} = \frac{1}{2m}(\vec{k} + \vec{Q})^2$$

gelten. Die Wahl von \vec{Q} unter allen reziproken Gittervektoren ist frei, aber zu jedem n bzw. $E_{n,\vec{k}}$ gehört ein bestimmtes $\vec{Q} \equiv \vec{Q}_n$.

Falls in der Schrödinger-Gleichung zu einem $E_{n,\vec{k}}$ ein \vec{Q}_m mit $n \neq m$ auftaucht, muss $c_{n,\vec{k}+\vec{Q}_m} = 0$ sein, um die Gleichung zu erfüllen, sodass (>2.1)

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

folgt.



Es gibt also für jedes \vec{k} mehrere Energien $E_{n,\vec{k}}$, wobei eine Erhöhung des Index n dem nächstgrößeren reziproken Gittervektor entspricht. Damit die Energien monoton in n wachsen muss man unterscheiden, ob \vec{k} (im eindimensionalen Fall) positiv oder negativ ist:

$$\begin{aligned} \vec{k} < 0 & & \vec{k} > 0 \\ E_{0,\vec{k}} &\sim (\vec{k} \pm \vec{Q}_0)^2 & E_{0,\vec{k}} &\sim (\vec{k} \pm \vec{Q}_0)^2 \\ E_{1,\vec{k}} &\sim (\vec{k} + \vec{Q}_1)^2 & E_{1,\vec{k}} &\sim (\vec{k} - \vec{Q}_1)^2 \\ E_{2,\vec{k}} &\sim (\vec{k} - \vec{Q}_1)^2 & E_{2,\vec{k}} &\sim (\vec{k} + \vec{Q}_1)^2 \end{aligned}$$

Wir verwenden $\vec{Q}_0 = 0$ und im 1D Fall $\vec{Q}_n = n \cdot 2\pi/a$.

SCHWACHES POTENTIAL - NICHT-ENTARTETER FALL:

Ob für die mit n durchnummerierten Zustände Entartung vorliegt, hängt im Falle eines schwachen Potentials $U(\vec{r}) \approx 0$ von der Wahl von \vec{k} ab. Für die meisten \vec{k} , die nicht an der Brillouin-Zonengrenze liegen, liegt keine Entartung vor. Die nicht-entartete Störungstheorie liefert hier (>2.2)

$$E_{n,\vec{k}} = \epsilon_{n,\vec{k}}^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{|U_{\vec{Q}_n - \vec{Q}_m}|^2}{\epsilon_{n,\vec{k}}^{(0)} - \epsilon_{m,\vec{k}}^{(0)}}$$

wobei $\epsilon_{n,\vec{k}}^{(0)}$ die ungestörte Energie für $U(\vec{r}) = 0$ ist.

SCHWACHES POTENTIAL - ENTARTETER FALL:

Für \vec{k} 's, die nahe den Brillouin-Zonengrenzen liegen, sind die Energien entartet, zum Beispiel $\epsilon_{0,\vec{k}}^{(0)}$ und $\epsilon_{1,\vec{k}}^{(0)}$ für $\vec{k} \approx \pi/a$. In diesem Fall liefert die entartete Störungstheorie (>2.3)

$$E_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}}^{(0)} \pm |U_{\vec{Q}_0 - \vec{Q}_1}|, \quad \vec{k} \approx \pi/a.$$

Dies entspricht Bandlücken.

ZUSAMMENHANG MIT DER LAUE-BEDINGUNG:

Dass es Entartung ganz allgemein immer auf der Brillouin-Zonengrenze geben muss, kann man in Analogie zur Laue-Bedingung beweisen (>2.4).

2.2 Tight-Binding Model

WANNIER-FUNKTIONEN:

Definiert man die sogenannten *Wannier-Funktionen* als

$$w_n(\vec{r}) := \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1. \text{ BZ}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \Omega \int_{1. \text{ BZ}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}),$$

wobei N die Anzahl an Elementarzellen ist, so lässt sich die Wellenfunktion schreiben als (>2.5)

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

Die Wannier-Funktionen sind im Index und der Verschiebung orthogonal:

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

SCHRÖDINGER-GLEICHUNG MIT WANNIER-FUNKTIONEN:

Mit atomaren Potentialen φ schreibt sich das Gesamtpotential als $U(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \varphi(\vec{r} - \vec{R})$. Damit folgt für die Schrödinger-Gleichung (>2.6)

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

wobei H_0 der atomare Hamilton-Operator und $\Delta U(\vec{r}, \vec{R}) =$

$\sum_{\vec{R}' \neq \vec{R}} \varphi(\vec{r} - \vec{R}')$ ist. Zudem wurde $w_n \equiv w_n(\vec{r} - \vec{R})$ abgekürzt.

LINEAR COMBINATION OF ATOMIC ORBITALS:

Setzt man für die Wannier-Funktionen eine Linearkombination aus M atomaren Orbitalen ϕ_m (pro Elementarzelle) mit Koeffizienten b_{nm} ein, so führt dies auf (>2.7)

$$\begin{aligned} (E_{n,\vec{k}} - E_{0,l}) b_{nl} + \sum_{m=1}^M (E_{n,\vec{k}} - E_{0,m}) b_{nm} \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} I_{lm}(\vec{R}) \\ = \sum_{m=1}^M b_m \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} h_{lm}(\vec{R}), \end{aligned}$$

wobei I_{lm} und h_{lm} bestimmte Überlapp-Integrale darstellen (>2.7). Dies entspricht einer $M \times M$ -Matrix-Gleichung und liefert entsprechend Lösungen mit $n = 1, \dots, M$, also M Bänder.

EIN ORBITAL PRO ELEMENTARZELLE:

Für $M = 1$ gilt für das resultierende Energieband (>2.8)

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

2.3 Tight-Binding Model – Alternative Herleitung

ALLGEMEINE HERLEITUNG:

Unter der Annahme, dass der Überlapp zwischen Wellenfunktionen $|\vec{R}, m\rangle$ verschiedener Elementarzellen vernachlässigbar ist, sodass $\langle \vec{R}', m' | \vec{R}, m \rangle = \delta_{\vec{R}'\vec{R}} \delta_{m'm}$, setzt man zunächst einen Hopping-Hamilton-Operator an (>2.9):

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

Setzt man die Wellenfunktionen erneut als LCAO ein, erhält man schließlich erneut eine $M \times M$ -Matrixgleichung (>2.9):

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

EIN ORBITAL PRO ELEMENTARZELLE:

Für $M = 1$ folgt direkt die Energie (>2.10)

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

Wenn nur Sprünge zum nächsten Nachbar berücksichtigt werden, folgt daraus im 1D-Gitter mit Gitterkonstante a (>2.11)

$$E_{\vec{k}} = 2t \cos ak$$

und im entsprechenden bcc-Gitter (>2.12)

$$E_{\vec{k}} = 8t \cos(ak_x/2) \cos(ak_y/2) \cos(ak_z/2).$$

3 Dynamik unter externen Feldern

3.1 Effektiver Band-Hamilton-Operator

ÜBERSICHT:

Man betrachte ein Elektron in einem Kristallpotential $U(\vec{r})$ unter dem Einfluss eines äußeren elektromagnetischen Feldes,

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\varphi + U(\vec{r}), \quad \vec{p} = -i\nabla$$

wobei die externen Felder \vec{A} und φ auf den Längenskalen der Elementarzellen a nur sehr wenig variieren. Man kann nun zeigen, dass

1. ein Elektron näherungsweise stets in seinem Band n bleibt.
2. für dieses Elektron der effektive Band-Hamilton-Operator

$$H_{\text{eff},n} = \mathcal{E}_n(\vec{k}) + q\varphi$$

gilt, wobei $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ hier die Dispersionsrelation des Elektrons ist, als dessen Argument im Hamilton-Operator der Operator $\vec{k} := \vec{p} - q\vec{A}$ einzusetzen ist.

ETWAS SCHWAMMIGE MOTIVATION:

Aus der Annahme, dass das Elektron ein Wellenpaket bildet, kann man die Gruppengeschwindigkeit dieses Pakets

$$\vec{v}_g = \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}_n(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}_0}$$

ableiten (>3.1), wobei \vec{k}_0 der mittlere Impuls des Wellenpakets ist. Außerdem bekommt man für $\vec{A} = 0, \varphi \neq 0$ eine weitere Beziehung. Um das Elektron durch das elektrische Feld $\vec{E} = -\nabla\varphi$ zu schieben, ist folgende Leistung P nötig:

$$q\vec{E} \cdot \vec{v}_g = P = \frac{d\mathcal{E}_n(\vec{k}_0)}{dt} = \dot{\vec{k}}_0 \cdot \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}_n(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}_0} = \vec{v}_g \cdot \dot{\vec{k}}_0 \Leftrightarrow q\vec{E} = \dot{\vec{k}}_0.$$

Dabei wurde die Kettenregel sowie die Formel für die Gruppengeschwindigkeit verwendet. Als Argument für $H_{\text{eff},n}$ kann nun geltend gemacht werden, dass er diese beiden Bewegungsgleichungen reproduziert (>3.3 für $\vec{A} = 0$):

$$\dot{\vec{r}} = \nabla_{\vec{p}} H_{\text{eff},n}(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}_n(\vec{k}), \quad \dot{\vec{k}} = -\nabla H_{\text{eff},n} = -q\nabla\varphi = q\vec{E}.$$

BESSERER BEWEIS:

Schreibt man die (jetzt zeitabhängige) Wellenfunktion als Entwicklung in Wannier-Funktionen

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

folgt nach einer Herleitung sehr ähnlich zur zeitabhängigen Störungstheorie folgende DGL für die Koeffizienten (>3.2):

$$i\dot{a}_{n, \vec{R}} = \sum_{\vec{R}'} a_{n, \vec{R}'} \mathcal{E}_n(\vec{R} - \vec{R}') + \sum_{n', \vec{R}'} a_{n', \vec{R}'} \underbrace{\langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) | q\varphi | w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}') \rangle}_{\approx q\varphi \delta_{nn'} \delta_{\vec{R}\vec{R}'} \text{ für } \varphi \approx 0}$$

Für die erste Summe folgt

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{R}'} a_{n, \vec{R}'} \mathcal{E}_n(\vec{R} - \vec{R}') &= \sum_{\vec{R}'} a_{n, \vec{R} - \vec{R}'} \mathcal{E}_n(\vec{R}') \\ &= \sum_{\vec{R}'} \mathcal{E}_n(\vec{R}') e^{-i\vec{R}' \cdot (-i\nabla)} a_{n, \vec{R}} = \mathcal{E}_n(-i\nabla) a_{n, \vec{R}}. \end{aligned}$$

Im vorletzten Schritt wurde hier der Translationsoperator

$$T_{\vec{R}} = e^{i\vec{R} \cdot (-i\nabla)}$$

verwendet; dann entspricht $\mathcal{E}_n(-i\nabla)$ dem Fourierkoeffizient von $\mathcal{E}_n(\vec{R}')$. Als Endergebnis bleibt somit

$$i\dot{a}_{n, \vec{R}} \approx (\mathcal{E}_n(-i\nabla) + q\varphi) a_{n, \vec{R}}$$

In diesem Fall bleibt ein Elektron für alle Zeiten in seinem Band n . Wenn die $a_{n, \vec{R}}$ über das Gitter nicht allzu sehr variieren, gelangt man mittels analytischer Fortsetzung zu der Schrödinger-Gleichung

$$i\dot{a}_{n, \vec{r}} \approx \underbrace{(\mathcal{E}_n(-i\nabla) + q\varphi)}_{=H_{\text{eff},n}} a_{n, \vec{r}}.$$

Für $\vec{A} \neq 0$ enthält die Klammer $-i\nabla - q\vec{A}$ (ohne Beweis).

3.2 Effektive Masse

DEFINITION:

Für freie Elektronen gilt $\mathcal{E} = k^2/2m$. Für kompliziertere Dispersionsrelationen kann man um eine Extremstelle \vec{k}_0 entwickeln:

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \mathcal{E}(\vec{k}_0) + 0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}),$$

wobei die erste Ordnung für Extremstellen verschwindet. Man definiert nun den Massen-Tensor

$$m_{ij}^{*-1} := \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j}.$$

Für eine isotrope Dispersionsrelation kann man den Massen-Tensor als Skalar $m^{*-1} = \partial^2 \mathcal{E} / \partial k^2$ verwenden.

Mit der effektiven Masse können wir jede beliebige Dispersionsrelation quadratisch nähern:

$$\mathcal{E}_n(\vec{k}) \approx \frac{1}{2} m_{ij}^{*-1} k_j k_j = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} - q\vec{A})^2,$$

wobei das letzte Gleichzeichen für eine isotrope Dispersionsrelation und $\vec{k} = \vec{k} - q\vec{A}$ gilt.

BEISPIEL: KUBISCHES GITTER:

Im kubischen Gitter gilt in Tight-Binding-Näherung

$$\mathcal{E} = 2t \sum_{i=x,y,z} \cos ak_i \stackrel{\vec{k} \approx 0}{\approx} 2t \sum_{i=x,y,z} \left(1 - \frac{1}{2} a^2 k_i^2\right) = \mathcal{E}(0) - ta^2 k^2,$$

sodass

$$m_{ij}^{*-1} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j} = -2ta^2 \delta_{ij} =: m^{*-1} \delta_{ij} \Rightarrow m^* = -\frac{1}{2ta^2}.$$

ANWENDUNGSBEISPIEL: STÖRSTELLE:

Man betrachte ein Gitter mit einer Störstelle, also einem „falschen“ Atom mit zusätzlichem Valenzelektron. In der Metallbindung ist dieses Atom positiv geladen und bringt ein „externes“ Potential

$$U_{\text{Stör}} = -e^2/r\epsilon$$

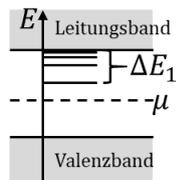
auf, wobei das ϵ eine Korrektur für die Abschirmung durch andere Elektronen etc. ist. Der Hamilton-Operator ist dann

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{r\epsilon}.$$

Sei der betrachtete Kristall nun ein Isolator, d. h. das chemische Potential liegt zwischen einem Leitungsband und einem Valenzband. Das zusätzliche Elektron der Störstelle ist dann das einzige im Leitungsband.

Die Störstelle bildet ein Potentialtopf mit Energieniveaus (vgl. Wasserstoffatom)

$$\Delta E_n = -\frac{m^* e^4}{2\epsilon \hbar n^2}.$$



3.3 Lösung der Bewegungsgleichungen

BEWEGUNGSGLEICHUNGEN:

Aus dem klassischen Hamilton-Formalismus folgen aus

$$H = \mathcal{E}(\vec{k}) + q\varphi, \quad \vec{k} = \vec{p} - q\vec{A}$$

die kanonischen Bewegungsgleichungen (>3.3)

$$\dot{\vec{v}} = \dot{\vec{r}} = \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}|_{\vec{k}=\vec{p}-q\vec{A}}, \quad \dot{\vec{p}} = q\vec{v} \times \vec{B} + q(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A} - q\nabla\varphi.$$

Dabei ist \vec{p} der *kanonische Impuls* und \vec{k} der *kinematische Impuls*, in dem Sinne, dass (>3.4)

$$\vec{k} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = \vec{F}_{\text{Lorentz}}.$$

ELEKTRONEN IM E-FELD (BLOCH-OSZILLATIONEN):

Für $\vec{B} = 0$ und $\vec{E} \neq 0$ folgt somit (>3.5)

$$\dot{\vec{k}} = q\vec{E}, \quad \dot{\vec{v}} = q m^{*-1} \cdot \vec{E}.$$

Die letzte Gleichung entspricht $\vec{a} = \vec{F}/m$. In 1D gilt somit $\dot{v} = m^{*-1} qE$ mit $m^{*-1} = \partial^2 \mathcal{E} / \partial k^2$. Für eine typische Tight-Binding-Dispersionsrelation $\mathcal{E} \sim -\cos ka$ ist m^* nicht nur positiv, sondern auch negativ oder sogar unendlich. Wegen $\dot{k} = qE$ wächst k linear und springt an der Brillouin-Zonengrenze um einen reziproken Gittervektor zurück. Es folgt $\mathcal{E} \sim \cos \omega t$ mit irgendeinem ω und entsprechend $\dot{v} \sim \cos \omega t$. Die Elektronen bewegen sich somit oszillierend.

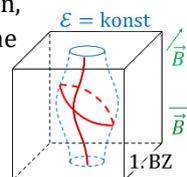
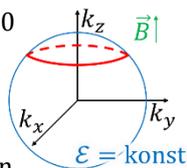
ELEKTRONEN IM B-FELD:

Für $\vec{E} = 0$ und $\vec{B} \neq 0$ folgt aus den Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{k}} = q\vec{v} \times \vec{B}, \quad \dot{\mathcal{E}} = (\nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}) \cdot \dot{\vec{k}} = q\vec{v} \cdot (\vec{v} \times \vec{B}) = 0.$$

Für $\vec{B} = B\vec{e}_z$ folgt aus der ersten Gleichung $\dot{k}_z = 0$

bzw. ganz allgemein ist der \vec{k} -Anteil in \vec{B} -Richtung konstant. Für $\mathcal{E} \sim k^2$ liefert die Bedingung $\dot{\mathcal{E}} = 0$ eine Kugeloberfläche, auf der die Trajektorien liegen, die zudem $\dot{k}_z = 0$ erfüllen müssen (siehe Abb.). Im Allgemeinen kann es sein, dass die Oberfläche $\dot{\mathcal{E}} = 0$ die erste Brillouin-Zone schneidet; dann springt der \vec{k} -Vektor an der Zonengrenze um einen reziproken Gittervektor zurück (offene Trajektorie).



UMRECHNUNG IN DEN REALEN RAUM:

Für geschlossene Trajektorien und $\vec{B} = B\vec{e}_z$ folgt (>3.6)

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

Die Trajektorie des realen Raums entspricht also der um 90° gedrehten und mit qB skalierten reziproken Trajektorie, wobei die Trajektorie in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld verbleibt.

ZYKLOTRON-FREQUENZ UND -MASSE:

Die Zyklotron-Masse ist definiert als

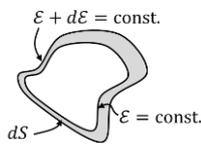
$$m_c := \frac{1}{2\pi} \frac{dS}{d\mathcal{E}},$$

wobei S die von einer reziproken Trajektorie der Energie \mathcal{E} eingeschlossene (reziproke) Fläche ist. Die Zyklotron-Frequenz, also die Frequenz mit der ein Elektron die geschlossene Trajektorie „abfliegt“, ist dann (>3.7)

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

Dabei ist $l_B^2 = 1/eB$ die *magnetische Länge*.

Für die eine Dispersionsrelation $\mathcal{E} = k^2/2m^*$ folgt $m_c = m^*$ (>3.8). Wir benutzen stets $e > 0$, sodass für ein Elektron $q = -e$ gilt.



3.4 Semiklassische Quantisierung: Landau-Niveaus

ÜBERBLICK:

Nicht alle bisher klassisch berechneten Trajektorien sind auch quantenmechanisch erlaubt – vielmehr sind nur diskrete Energiewerte zulässig, die sogenannten *Landau-Niveaus*.

BORN-SOMMERFELD-QUANTISIERUNG DES FLUSSES:

Die Born-Sommerfeld-Bedingung für Kreisbahnen lautet

$$\oint d\vec{r} \cdot \vec{p} = 2\pi(n + \gamma),$$

wobei das $\gamma = 1/2$ eine Sommerfeld'sche Korrektur zum Bohr'schen Atommodell darstellt. Aus 3.3 folgt $\vec{p} = \vec{k} + q\vec{A}$, womit sich diese Bedingung in eine Bedingung für den magnetischen Fluss Φ übersetzen lässt (>3.9):

$$\Phi_n = \Phi_0(n + \gamma), \quad \Phi_0 := 2\pi/e,$$

wobei Φ_0 (für $q = -e < 0$) *Flussquantum* genannt wird. Es gilt offensichtlich $\Phi_{n+1} - \Phi_n = \Phi_0$.

QUANTISIERUNG DER FLÄCHEN UND DER ENERGIEN:

Aus der Quantisierung des Flusses folgt sogleich auch die der Flächen (>3.10),

$$\mathcal{A}_n = 2\pi l_B^2(n + \gamma), \quad S_n = l_B^{-4} \mathcal{A}_n,$$

sowie der Energie (>3.10),

$$\mathcal{E}_{n+1} - \mathcal{E}_n = \omega_c.$$

Man beachte, dass die Zyklotron-Frequenz ω_c im Allgemeinen eine Funktion der Energie ist; die Energieniveaus sind also nicht zwingend äquidistant.

3.5 Löcher

Man betrachte eine Stromdichte eines bestimmten Bandes

$$\vec{j} = \frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k}, s) n(\vec{k}, s).$$

Dabei ist s der Spin und n die Besetzungszahl. Systeme sind üblicherweise symmetrisch unter Zeitumkehr, das heißt unter $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$, $s \rightarrow -s$, $\mathcal{E}_{\vec{k},s} = \mathcal{E}_{-\vec{k},-s}$, $\vec{v}_g(\vec{k}, s) = -\vec{v}_g(-\vec{k}, -s)$. Für ein volles Band folgt unter dieser Symmetrie $\vec{j} = 0$ (>3.11).

Mit $n_h := 1 - n$ folgt (>3.12)

$$\vec{j} = -\frac{q}{V} \sum_s \int_{1.BZ} d^3\vec{k} \vec{v}_g(\vec{k}, s) n_h(\vec{k}, s).$$

Löcher haben also entgegengesetzte Ladungen. Alternativ haben sie gleiche Ladungen, aber negative effektive Massen $m_h^* = -m^*$:

$$qE_i = m_{ij}^* \dot{v}_j \quad \Rightarrow \quad -qE_i = m_{h,ij}^* \dot{v}_j.$$

Des Weiteren gilt

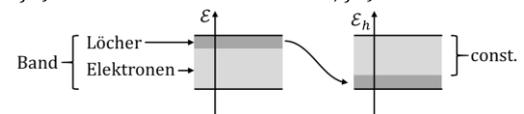
$$\vec{k}_h = -\vec{k},$$

$$s_h = -s,$$

$$\mathcal{E}_h(\vec{k}_h, s_h) = \text{const.} - \mathcal{E}(\vec{k}, s),$$

$$\vec{v}_h(\vec{k}_h, s_h) = \nabla_{\vec{k}_h} \mathcal{E}_h(\vec{k}_h) = \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}) = \vec{v}(\vec{k}, s).$$

In die Erhaltungssätze geht ein Loch (fehlendes Elektron) mit den zum Elektron inversen Impulsen, Spins und Energien ein. Die Gruppengeschwindigkeit des Loches ist jedoch dieselbe, wie die des Elektrons: In einem System, in dem ein Elektron fehlt, dass in x -Richtung fliegt, bewegt sich also das fehlende Elektron/Loch auch in x -Richtung.



4 Magnetismus

4.1 Magnetische Suszeptibilität

MAGNETISIERUNG:

Es gilt mit Magnetisierung \vec{M}

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M}.$$

Die Suszeptibilität ist definiert als

$$\chi := \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0}.$$

Für kleine H -Felder gilt nun $M \approx \chi H$ und daher

$$B \approx \underbrace{(1 + 4\pi\chi)}_{=\mu} H = \mu H, \quad M \approx \chi H \approx \frac{\chi}{1 + 4\pi\chi} B \stackrel{\chi \ll 1}{\approx} \chi B.$$

Man beachte, dass für $\chi \ll 1$ auch $\mu \approx 1 \Rightarrow B \approx H$ gilt.

THERMODYNAMISCHE POTENTIALIALE:

Aus $dU = T dS - M dH$ folgt über die üblichen Zusammenhänge bei thermodynamischen Potentialen

$$dF = \dots - M dH \Rightarrow M = - \left. \frac{\partial F}{\partial H} \right|_{H=0},$$

$$d\Omega = \dots - M dH \Rightarrow M = - \left. \frac{\partial \Omega}{\partial H} \right|_{H=0}.$$

4.2 Bohr-van-Leeuwen-Theorem

Im Gegensatz zum Abschnitt 3 betrachten wir nun nicht mehr nur einzelne Elektronen, sondern alle (Valenz-)Elektronen in Form eines Elektronengases. Das Bohr-van-Leeuwen-Theorem besagt, dass es im klassischen Limes (ohne Spin und mit $\hbar = 0$) keine Magnetisierung im thermischen Gleichgewicht gibt. Für klassische Elektronen ohne Wechselwirkung lässt sich die Zustandssumme schreiben als $Z = Z_1^N / N!$ schreiben, wobei Z_1 die Ein-Teilchen-Zustandssumme ist:

$$Z_1 = \int d^3r d^3p e^{-\beta H}, \quad H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + U(\vec{r}).$$

Da man unter dem d^3p -Integral die Koordinate stets um $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + q\vec{A}$ verschieben kann, ist Z_1 von \vec{A} unabhängig und es folgt $\chi = 0$.

4.3 Pauli-Paramagnetismus

Paramagnetismus tritt bei Stoffen mit ungepaarten Elektronen auf, die daher einen Netto-Spin $\vec{s} = \vec{\sigma}/2$ besitzen können, die an ein Magnetfeld koppeln:

$$H = H_0 - g\mu_B \vec{B} \cdot \vec{s}, \quad g = 2.$$

Das große Potential Ω ist eine Funktion von $\mu - \epsilon$. Ist \vec{B} parallel zu \vec{s} wird $\epsilon \rightarrow \epsilon - \mu_B B$, ist es antiparallel $\epsilon \rightarrow \epsilon + \mu_B B$. Sei $\Omega_0(\mu)$ nun das große Potential ohne Magnetfeld. Nun kann man die Energiekorrektur durch das Magnetfeld auch in das μ reinschreiben: $\mu \rightarrow \mu + \mu_B B$ für parallel, $\mu \rightarrow \mu - \mu_B B$ für antiparallel. Für ein schwaches Magnetfeld, bei dem etwa gleich viele Spins parallel wie antiparallel ausgerichtet sind, gilt (>4.1)

$$\Omega(\mu) \approx \Omega_0(\mu) + \frac{1}{2} \mu_B^2 B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}.$$

Für die Suszeptibilität χ_{para} folgt somit

$$\chi_{\text{para}} \approx - \frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} = - \mu_B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}.$$

Bei $T = 0$ ist die Fermi-Energie $E_F = \epsilon_F \mp \mu_B B$ für Elektronen mit Spin $\sigma_z = \pm 1$. Somit sind alle Zustände bis $\epsilon_F = E_F \pm \mu_B B$ besetzt. Mit einer Zustandsdichte *pro Spin* $g(\epsilon)$ folgt somit für die Differenz der Teilchenanzahl mit Spin-up und -down:

$$N_+ - N_- = \int_0^{E_F + \mu_B B} d\epsilon g(\epsilon) - \int_0^{E_F - \mu_B B} d\epsilon g(\epsilon) \approx 2\mu_B B g(E_F).$$

Die Suszeptibilität lässt sich somit auch schreiben als

$$\chi_{\text{para}} \approx \frac{\partial M}{\partial B} = \mu_B \frac{\partial N_+ - N_-}{\partial B} = \frac{2\mu_B^2 g(E_F)}{V} = \frac{\mu_B^2 g_s(E_F)}{V},$$

wobei $g_s = 2g$ die Zustandsdichte inklusive der Spins ist.

4.4 Landau-Diamagnetismus

Diamagnetismus rührt von den quantenmechanischen Landau-Niveaus her. Wir betrachten im Folgenden ein freies Elektronengas dafür; diese Effekte kommen in allen Materialien vor, in diesem Sinne sind alle Materialien diamagnetisch. Diamagnetismus ist nur schwächer als Paramagnetismus, weshalb letzterer die Effekte des ersteren bei paramagnetischen Materialien überlagert.

LANDAU-ENERGIENIVEAUS:

Man betrachte freie Elektronen in einem externen Magnetfeld $\vec{A} = -By\vec{e}_x$. Für die Landau-Energieniveaus folgt (>4.2)

$$E_{n,p_z} = \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m^*}, \quad e > 0.$$

ENTARTUNG:

Für die Entartung findet man (>4.3):

$$\mathcal{N} = L_x L_y eB / 2\pi.$$

GROSSES POTENTIAL:

Setzt man obige Landau-Niveau-Energie in die Formel für das große Potential eines idealen Fermigases erhält man (>4.4)

$$\Omega = 2\mu_B^* B \sum_{n=0}^{\infty} f(\mu - (2n+1)\mu_B^* B),$$

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

Dies lässt sich mittels Summationsformel von Euler-Maclaurin weiter umschreiben zu (>4.5)

$$\Omega(\mu) \approx \int_{-\infty}^{\mu} dx f(x) - \frac{(2\mu_B^* B)^2}{24} f'(\mu).$$

Mit $\int_{-\infty}^{\mu} dx f(x) = \Omega_0(\mu)$ und $f'(x) = \Omega_0''(\mu)$ folgt (>4.5)

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

SUSZEPTIBILITÄT:

Offensichtlich gilt für die diamagnetische Suszeptibilität also

$$\chi_{\text{dia}} \approx - \frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} \approx \frac{1}{3} \mu_B^{*2} \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} = - \frac{1}{3} \frac{m^2}{m^{*2}} \chi_{\text{para}},$$

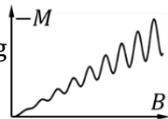
wobei $B \approx H$ sowie $\mu_B^*/\mu_B = m/m^*$ verwendet wurde.

4.5 De-Haas-van-Alphen-Effekt

BEFUND:

Aus dem Potential Ω in 4.4 folgt die Magnetisierung

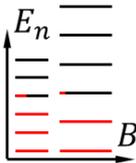
$$M \approx - \frac{\partial \Omega}{\partial B} \sim \chi_{\text{dia}} B + f(B) B^{3/2}, \quad B \approx H.$$



Die Ordnung $\sim f(B) B^{3/2}$ hätte man in 4.4 auch erhalten, wenn man bei der in den Hintergrundrechnungen durchgeführten Näherung der Summe $\sum_{n=0}^{\infty} F(n + 1/2)$ weitere Terme mitgenommen hätte. $f(B)$ ist hierbei eine oszillierende Funktion fester Amplitude und abnehmender Frequenz.

QUALITATIVE ERKLÄRUNG:

Berücksichtigt man die p_z -Komponente nicht, sind die Landau-Energieniveaus diskret mit $E_n \sim B$. Gleichzeitig ist die Entartung $\mathcal{N}_B \sim B$. Somit haben die unteren Zustände für größere B mehr „Fassungsvermögen“, sodass sich der oberste Zustand für wachsendes B in die unteren Zustände entleert – die Energie sinkt dadurch. Gleichzeitig nimmt die Energie der Zustände aber mit B zu. Diese beiden gegenläufigen Effekte heben sich *nicht* genau auf; eine ausführliche Analyse (>4.6) zeigt, dass die Energie E und daher auch die Magnetisierung $M = -\partial E / \partial B$ (bei $T = 0$: $F = E$) schwankt: Während sich ein Zustand entleert, nimmt M linear bis hin zu positiven Werten zu, springt dann aber zurück auf negative Werte, wenn der Zustand vollständig entleert ist und sich der darunterliegende zu entleeren beginnt. Die Magnetisierung oszilliert also.



5 Die Berry-Phase

5.1 Adiabatisches Theorem

AUSSAGE DES THEOREMS:

Das adiabatische Theorem besagt, dass wenn man eine Störung $V(t)$ zu einem Hamilton-Operator H_0 langsam einschaltet, also mit sehr kleinem \dot{V} , dann wechselt das System näherungsweise nicht die Quantenzahlen. Es bleibt also im Zustand n , wenngleich natürlich dieser Zustand wegen der Störung zu verschiedenen Zeitpunkten verschiedene Energien haben kann.

BEWEIS:

Ein einfacher Beweis wird in (>5.1) gegeben. Konzeptuell aufwändiger ist ein anderer Beweis in (>5.2), der jedoch für die folgenden Abschnitte benötigt wird.

BEISPIEL: LANDAU-ZENER-TUNNELN:

Man betrachte einen Spin im Magnetfeld,

$$H \sim \vec{B}(t) \cdot \vec{\sigma},$$

wobei sich die z-Komponente des Magnetfelds zeitlich langsam ändert:

$$\vec{B}(t) = \alpha t \vec{e}_z + \Delta \vec{e}_y.$$

Für $t = -\infty$ zeigt das Magnetfeld also in $-\vec{e}_z$ -Richtung, für $t = 0$ hat es die Stärke $\vec{B}(0) = \Delta \vec{e}_x$ und für $t = \infty$ zeigt es wieder in \vec{e}_z -Richtung. Sei der Spin anfangs entlang des Magnetfelds ausgerichtet. Eine aufwendige Rechnung zeigt, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Spin bei $t = \infty$ gegen das Magnetfeld ausgerichtet ist,

$$e^{-\Delta^2/\alpha}$$

beträgt. Für eine langsame Magnetfeldänderung (kleine α) ist die Wahrscheinlichkeit für eine Zustandsänderung (Spinflip) relativ zum Magnetfeld also sehr klein.

5.2 Die Berry-Phase

EINFÜHRUNG:

Eigenzustände eines zeitunabhängigen Hamilton-Operators haben eine Phase $e^{-iE_n t}$ bzw. $\varphi = -E_n t$. Ist die Energie zeitabhängig gilt entsprechend

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

In der Näherung, dass die Quantenzahl eines Systems für langsame Störungen $V(t)$ nicht wechselt, kann man eine weitere Ordnung der Störungstheorie betrachten, die die Energie $E_n(t)$ korrigiert. Dadurch entsteht auch eine Korrektur zur Phase, die *Berry-Phase*. Sie kann geschrieben werden als (>5.3)

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

Dabei ist $\vec{\chi}(t)$ ein Vektor aller zeitabhängiger Parameter des Hamilton-Operators und $\oint d\vec{\chi}$ ist ein geschlossenes Pfadintegral im Parameterraum (wenn $\vec{\chi}(t)$ keinen geschlossenen Pfad beschreibt, verletzt diese Beschreibung die Eichinvarianz und ist nicht anwendbar). In Analogie zum Magnetfeld kann man auch

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

schreiben, wobei S eine vom Pfad $\vec{\chi}$ eingeschlossene Fläche ist.

BEISPIEL:

Für den Hamilton-Operator

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

mit $\vec{B}(0) \parallel \hat{z}$ ergibt sich nach längerer Rechnung (>5.4)

$$\varphi_{\text{Berry},\uparrow,\downarrow} = \mp \frac{1}{2} \oint d\varphi (1 - \cos \theta) \stackrel{\theta=\pi/2}{=} \mp \pi.$$

5.3 Berry-Phase und Bloch-Funktionen

DIE BERRY-PHASE BEI BLOCH-FUNKTIONEN:

In 1.8 wurde folgende Schrödinger-Gleichung für Bloch-Funktionen hergeleitet:

$$\left(E_{n,\vec{k}} - \frac{1}{2m} (\vec{k} - i\nabla)^2 \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = U(\vec{r}) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}).$$

Der Vektor zeitabhängiger Parameter ist in diesem Fall $\vec{\chi} \cong \vec{k}$. Somit folgt analog zur Formel 5.2

$$\varphi_{\text{Berry},n} = i \oint d\vec{k} \cdot \langle u_{n,\vec{k}} | \nabla_{\vec{k}} | u_{n,\vec{k}} \rangle.$$

KORREKTUR DER SEMI-KLAISSCHEN QUANTISIERUNG:

Solche geschlossenen Bahnen sind offensichtlich insbesondere die Bahnen im Magnetfeld. Durch das Phänomen der Berry-Phase muss die Quantisierungsbedingung aus 3.4 korrigiert werden:

$$\oint d\vec{r} \cdot \vec{p} + \varphi_{\text{Berry},n} = 2\pi(n + \gamma)$$

$$\Leftrightarrow \oint d\vec{r} \cdot \vec{p} = 2\pi(n + \tilde{\gamma}) \quad \tilde{\gamma} = \gamma - \frac{1}{2\pi} \varphi_{\text{Berry},n}.$$

Siehe für die Berry-Phase im Beispiel Graphen 6.4.

6 Beispiel: Graphen

6.1 Gittereigenschaften

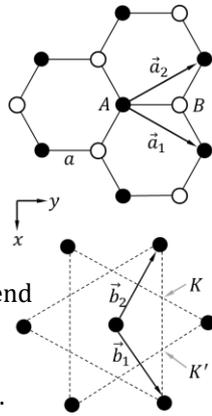
Graphen ist ein Honigwabekristall, also ein 2D-Gitter aus regelmäßigen Dreiecken mit zweiatomiger Basis. Sei a die Kantenlänge des Sechsecks, dann ist eine mögliche Wahl von Basisvektoren (>6.1)

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Die reziproken Gittervektoren sind entsprechend

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 3 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -3 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

Die erste Brillouin-Zone ist somit ein Sechseck.



6.2 Bandstruktur

TIGHT-BINDING-NÄHERUNG:

Unter Vernachlässigung des Spins und unter ausschließlicher Berücksichtigung von nächsten-Nachbar-Sprüngen, folgt für die Bandstruktur in Tight-Binding-Näherung (>6.2)

$$E_{\pm, \vec{k}} = \pm t \sqrt{\epsilon_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^*}, \quad \text{wobei}$$

$$\epsilon_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^* = 3 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_x) + 4 \cos(3ak_y/2) \cos(\sqrt{3}ak_x/2).$$

Es gibt also zwei Bänder, bezeichnet mit \pm . Jeder Zustand, definiert durch \vec{k} und \pm , kann von zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin besetzt werden.

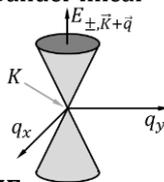
VERHALTEN BEI NIEDRIGER ENERGIE/TEMPERATUR:

Da jeder Zustand von zwei Elektronen besetzt werden kann, ist bei $T = 0$ das untere $-$ -Band komplett gefüllt und das obere $+$ -Band komplett leer. Bei niedrigen Temperaturen sind also diejenigen Bereiche interessant, an denen sich die beiden Bänder möglichst nahe sind.

Tatsächlich gibt es sogar Orte im reziproken Raum, an denen sich die beiden Bänder berühren, das heißt wo $E_{\pm, \vec{k}} = 0$ gilt. Man kann leicht zeigen, dass dies gerade an den sechs Ecken der ersten Brillouin-Zone (aus 6.1) der Fall ist. Nur zwei Ecken, K und K' , sind wirklich unterschiedlichen, die anderen können von diesen beiden Ecken aus über einen reziproken Gittervektor erreicht werden. An beiden Ecken lassen sich die Bänder linear nähern (>6.3):

$$E_{\pm, \vec{k}+\vec{q}} = E_{\pm, \vec{k}'+\vec{q}} = \pm \frac{3at}{2} |\vec{q}|.$$

In der Nähe der K -Punkte sind die Bänder also näherungsweise Doppelkegel.



HAMILTON-OPERATOR BEI NIEDRIGER ENERGIE:

Bei niedriger Energie lässt sich der Hamilton-Operator im Bereich um K und K' nähern als (>6.4)

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

wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2)$ der Vektor der ersten beiden Pauli-Matrizen ist, $v := 3at/2$ sowie $\vec{q} = (q_x, q_y)$.

6.3 Landau-Niveaus

Man betrachte nun die Landau-Niveaus bei niedrigen Energien am Punkt K . Nach minimaler Kopplung $\vec{q} \rightarrow \vec{q} - q\vec{A}$ (mit Ladung q) kann man den Hamilton-Operator H_K in die Form eines harmonischen Oszillators bringen und so die Energieniveaus finden (>6.5):

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

6.4 Die Berry-Phase bei Graphen

In 5.2 wurde die Berry-Phase eines Spins im Magnetfeld mit Hamilton-Operator $H \sim \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$ berechnet. Für den Hamilton-Operator für niedrige Energien aus 6.2, $H_K \sim \vec{\sigma} \cdot \vec{q}$ nimmt der Wellenvektor \vec{q} eine zum Magnetfeld analoge Rolle ein. \vec{q} hat in H_K nur x - und y -Komponenten; die Kreisbahn der Landau-Niveaus liegt also in der x - y -Ebene. Dies entspricht daher dem Fall $\theta = \pi/2$ aus 5.2. In diesem Fall war die Berry-Phase dort $\varphi_{\text{Berry}} = \pi$.

Mit der Quantisierungsbedingung für die Kreisbahnen aus 5.3 folgt somit

$$\tilde{\gamma} = \gamma - \frac{1}{2\pi} \varphi_{\text{Berry}} = \gamma - \frac{1}{2}.$$

Wie in 3.4 ohne Beweis erwähnt, ist in der Born-Sommerfeld-Theorie $\gamma = 1/2$. Der Faktor γ wird also genau von der Berry-Phase kompensiert.

7 Boltzmann-Gleichung

7.1 Herleitung

NÖTIGE DEFINITIONEN:

Wir verwenden im Folgenden die Notation \vec{p} statt \vec{k} für den kinematischen Impuls; das heißt, dass wir die Bewegungsgleichungen aus 3.3 nun wie folgt schreiben:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}} \mathcal{E}(\vec{p}), \quad \dot{\vec{p}} = q(\vec{E} + \vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}).$$

Sei die *Wahrscheinlichkeitsdichte*, ein Elektron zur Zeit t am Ort \vec{r} mit Impuls \vec{p} und Spin σ im Band n zu finden gegeben durch $V^{-1} f(n, \sigma, \vec{p}, \vec{r}, t)$.

Dann folgt für die Teilchen- und Stromdichte

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{n, \sigma} \int d^3 \vec{p} f, \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{q}{V} \sum_{n, \sigma} \int d^3 \vec{p} \vec{v}_{\vec{p}} f.$$

HERLEITUNG:

Aus dem Satz von Liouville folgt $df/dt = 0$ (>7.1), insofern die Teilchen frei sind. Der Einfluss von Stößen wird nun anstelle der 0 mit einem *Stoßintegral* $I[f]$ beschrieben:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{p}} f + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = I[f].$$

Einsetzen der Bewegungsgleichungen aus 3.3 liefert

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + q(\vec{E} + \vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{p}} f + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = I[f].$$

7.2 Das Stoßintegral für Stöße an Störstellen

Man betrachte nun keine Stöße zwischen Elektronen, sondern nur Stöße an Störstellen (dies ist einfacher, da hier nur einzelne Elektronen betrachtet werden müssen).

ALLGEMEINE FORMULIERUNG:

Ein Stoß an einer Störstelle am Ort \vec{r} ändert den Impuls \vec{p} des Teilchens. Man betrachte einen Punkt (\vec{r}, \vec{p}) im Phasenraum, wobei \vec{r} der Ort des Stoßes und \vec{p} beliebig ist. Sei nun $W_{\vec{p}_1 \vec{p}}$ die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen, das zuvor den Impuls \vec{p}_1 hatte, durch den Stoß den Impuls \vec{p} erhält, also durch den Stoß plötzlich vom Punkt (\vec{r}, \vec{p}_1) in den Punkt (\vec{r}, \vec{p}) springt.

Umgekehrt können Teilchen durch den Stoß aus dem Punkt (\vec{r}, \vec{p}) in einen anderen Punkt (\vec{r}, \vec{p}_2) mit Wahrscheinlichkeit $W_{\vec{p}, \vec{p}_2}$ springen. Das raus- und reinspringen bzgl. eines Punktes im Phasenraum (\vec{r}, \vec{p}) mit festem \vec{r} und irgendeinem \vec{p} kann man in zwei Stoßintegralen schreiben: $I = I_{\text{in}} + I_{\text{out}}$.

Wir lassen nun im Folgenden alle Argumente von f bis auf den Impuls weg. Dann ist

$$I_{\text{in}}[f(\vec{p})] = \sum_{\vec{p}_1} W_{\vec{p}_1 \vec{p}} f(\vec{p}_1) (1 - f(\vec{p})).$$

$$I_{\text{out}}[f(\vec{p})] = \sum_{\vec{p}_2} W_{\vec{p} \vec{p}_2} f(\vec{p}) (1 - f(\vec{p}_2)).$$

I_{in} entspricht der Übergangswahrscheinlichkeit $W_{\vec{p}_1 \vec{p}}$ mal die Wahrscheinlichkeit $f(\vec{p}_1)$, dass sich ein Teilchen in (\vec{r}, \vec{p}_1) befindet, mal die Wahrscheinlichkeit $1 - f(\vec{p})$, dass (\vec{r}, \vec{p}) frei ist (dieser Term ist wegen des Pauli-Prinzips für Fermionen nötig).

IM THERMODYNAMISCHEN GLEICHGEWICHT:

Im Gleichgewicht gelte für f die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(n, \vec{p}) = f_0(n, \vec{p}) = \frac{1}{e^{\beta(\mathcal{E}_n(\vec{p}) - \mu)} + 1} \quad \text{sowie} \quad I = I_{\text{in}} + I_{\text{out}} = 0.$$

Eine hinreichende Bedingung für $I_{\text{in}} + I_{\text{out}} = 0$ ist (>7.2)

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

ELASTISCHE STÖSSE AUSSERHALB DES GLEICHGEWICHTS:

Für elastische Stöße gilt Energieerhaltung. Wir nehmen an, dass $W_{\vec{p} \vec{p}'} = W_{\vec{p}' \vec{p}}$ (dies folgt etwa aus der Zeitumkehrsymmetrie).

Dann gilt (>7.3)

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

7.3 Relaxationszeit-Näherungen für das Stoßintegral

FERMIS GOLDENE REGEL UND STÖRPOTENTIAL:

Mit Fermis Goldener Regel können wir $W_{\vec{p} \vec{p}'}$ durch ein Störpotential $U(\vec{r})$ ausdrücken:

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

Diese Wahl erfüllt *detailed Balance* für f_0 , also $I[f_0] = 0$ (>7.2).

Wir nehmen an, dass jede Störstelle am Ort \vec{a}_i ein Störpotential $u(\vec{r} - \vec{a}_i)$ verursacht, sodass das Gesamtstörpotential $U(\vec{r}) = \sum_i u(\vec{r} - \vec{a}_i)$ ist. Unter einigen eher technischen Annahmen folgt

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

wobei N_{St} die Anzahl der Störstellen ist (>7.4). Für elastische Stöße mit $|\vec{p}'| = |\vec{p}|$ liegt es nahe, dass das Matrixelement nur von dem Winkel θ zwischen \vec{p}' und \vec{p} abhängt (Definition $u(\theta)$).

IMPULS-RELAXATIONSZEIT-NÄHERUNG:

Wir teilen f in ein Gleichgewichts- f_0 und die Abweichung δf aus, sodass $f = f_0 + \delta f$ und $I[f_0] = 0$. Zusätzlich nehmen wir an, dass $\sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p} \vec{p}'} \delta f(\vec{p}') = 0$, dass sich die Fluktuationen in der Summe also aufheben (>7.5). Somit folgt

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

mit der *Impuls-Relaxationszeit* $\tau_{\vec{p}}$ (>7.6)

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

TRANSPORT-RELAXATIONSZEIT-NÄHERUNG:

Für die *Transport-Relaxationszeit* verwendet man ebenfalls die Näherung $f = f_0 + \delta f$ mit $I[f_0] = 0$, aber *nicht*

$\sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p} \vec{p}'} \delta f(\vec{p}') = 0$. Wir machen nun den Ansatz

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

einfach weil δf in vielen Fällen von dieser Form ist (>7.7). Diese Annahmen liefern uns nach längerer Rechnung (>7.7)

$$I[f] = I[\delta f] = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad u(\theta) := \langle \vec{p}' | u | \vec{p} \rangle, \quad \theta = \angle \vec{p}', \vec{p},$$

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

NOTATION:

Wir werden im Folgenden *nicht* zwischen der Impuls- und der Transport-Relaxationszeit unterscheiden; wir verwenden die Variable τ für beide. Am Ende jeder Rechnung kann man dann nach Bedarf für τ eine der beiden obigen Formeln einsetzen.

KONSTANTE RELAXATIONSZEITEN:

$\tau \equiv \tau(\mathcal{E}(\vec{p}))$ hängt zwar von $\mathcal{E}(\vec{p})$ ab, oft nimmt man τ jedoch der Einfachheit halber impulsunabhängig an. τ wird dann etwa experimentell bestimmt; alternativ wäre sicherlich $|\vec{p}| = E_F$ eine gute Wahl, um ein konstantes τ zu bekommen. Für die Drude-Leitfähigkeit etwa findet man, dass diese Ersetzung genau das richtige Resultat liefert (siehe Bemerkung am Ende von (>7.9)).

INTERPRETATION:

Für $f = f_0 + \delta f$ und $df_0/dt = 0$ liest sich die Boltzmann-Gleichung in Relaxationszeit-Näherung

$$\frac{d\delta f}{dt} = -\frac{\delta f}{\tau} \quad \Leftrightarrow \quad \delta f \sim e^{-t/\tau}.$$

τ ist also ein Maß für die Zeit, in der das System nach einer Störung/einem Stoß ins Gleichgewicht $f = f_0$ zurückkehrt. Der zusätzliche Faktor $1 - \cos \theta$ der Transport-Relaxationszeit sorgt nun dafür, dass Stöße mit $\theta \approx \pi$ („back scattering“) stärker gewichtet werden, also solche mit $\theta \approx 0$ („forward scattering“). Für $u(\theta) = \text{const.}$ folgt sofort, dass beide Formeln für τ gleich sind. In 7.4 werden wir sehen, dass die Leitfähigkeit für große τ abnimmt. Back scattering in τ_{Tr} verringert also die Leitfähigkeit stärker, als forward scattering. Dies ist sicherlich realistisch, daher ist die Transport-Relaxationszeit der normalen Relaxationszeit in aller Regel vorzuziehen.

7.4 Drude-Leitfähigkeit

DER LEITFÄHIGKEITSTENSOR:

Man betrachte ein schwaches externes elektrisches Feld

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t},$$

wobei nur der Realteil berücksichtigt wird. Die Boltzmann-Gleichung lautet damit in der einfachsten Relaxationszeit-Näherung mit konstantem τ von 7.3

$$\frac{\partial f}{\partial t} + q\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = -\frac{\delta f}{\tau_{Tr}}$$

Macht man nun den Ansatz einer linearen Antwort; das heißt $\delta f = \delta f_0 e^{-i\omega t}$ sowie $\nabla_{\vec{r}} f = 0$ (f ändere sich nur global, es gibt also keine Wellen o. Ä.) und nutzt aus, dass die Verteilung im Gleichgewicht f_0 zeitlich konstant ist, kann man δf_0 und damit δf aus der Boltzmann-Gleichung berechnen und in die Stromdichte aus 7.1 einsetzen (>7.8). Ein Vergleich mit $j_a = \sigma_{ab} E_b$ liefert

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

VEREINFACHUNG MIT SOMMERFELD-NÄHERUNG:

Falls $kT \ll \mu$ ist f_0 beinahe eine θ -Funktion und es folgt die Sommerfeld-Näherung

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

Bei $T = 0$ und für eine isotrope Dispersionsrelation folgt (>7.9)

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

Hierbei ist v_F die Fermi-Geschwindigkeit und $g(E_F)$ die Energie-Zustandsdichte (ohne Spins; der Faktor 2 vor dem q^2 ist der Spin-Entartungsfaktor). Die letzte Form mit der Teilchendichte n gilt nur im Fall einer Dispersionsrelation $\epsilon_{\vec{p}} \sim \vec{p}^2$.

7.5 Elektrischer Strom und Wärmestrom

ANNAHMEN: LOKALES GLEICHGEWICHT

Man betrachte ein schwaches externes elektrisches Feld, $\vec{E} \neq 0$, und ein Temperaturfeld $T(\vec{r})$. Ist die Temperatur nicht räumlich konstant, befindet sich das System automatisch auch nicht im Gleichgewicht. Wenn sich $T(\vec{r})$ nicht zu sehr im Raum ändert, können wir lokal am Ort \vec{r} näherungsweise annehmen, dass das System im Gleichgewicht ist und daher ungefähr gilt, dass

$$f = f_0 + \delta f, \quad f_0 = \frac{1}{e^{\beta(\vec{r})(\epsilon(\vec{p}) - \mu(\vec{r}))} + 1}$$

und dass δf klein ist (*Chapman-Enskog-Entwicklung*). Wir nehmen wieder an, dass $I[f_0] = 0$, aber diesmal gilt $\nabla_{\vec{r}} f_0 \neq 0$ (im Gegensatz zu 7.4). Aus 7.3 wissen wir, dass $I[f] = -\delta f / \tau$ und im stationären Fall gilt $\partial \delta f / \partial t = 0$.

δf UND ELEKTRO-CHEMISCHES POTENTIAL:

Mit diesen Annahmen liefert die Boltzmann-Gleichung (>7.10)

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \tau \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \left(e \vec{E}_{ec} + \frac{\epsilon - \mu}{T} \nabla_{\vec{r}} T \right), \quad \vec{E}_{ec} := \vec{E} + \frac{1}{e} \nabla_{\vec{r}} \mu$$

Für das elektro-chemische Potential gilt dann $\varphi_{ec} := \varphi - \mu/e$.

STRÖME: ONSAGER, SEEBECK, THOMSON:

Zu Strömen trägt f_0 nicht bei, nur δf . Somit folgt für den elektrischen Strom \vec{j}_E (siehe 7.1) und den Wärmestrom \vec{j}_Q

$$\vec{j}_E = -\frac{2e}{V} \int d^3\vec{p} \vec{v}_{\vec{p}} \delta f, \quad \vec{j}_Q = \frac{2}{V} \int d^3\vec{p} (\epsilon(\vec{p}) - \mu) \vec{v}_{\vec{p}} \delta f,$$

wobei nur ein Band betrachtet wird und der Spin einen Faktor 2 ergibt. Die Definition des Wärmestroms ergibt sich aus $dQ = dE - \mu dN$. Mit diesen Definitionen können wir nun

$$\begin{pmatrix} \vec{j}_E \\ \vec{j}_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E}_{ec} \\ T^{-1} \nabla T \end{pmatrix}$$

schreiben und finden (>7.11)

$$K_{ij,ab} = \frac{2\tau}{V} \int d^3\vec{p} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \mathcal{K}_{ij} v_{\vec{p},a} v_{\vec{p},b}$$

$\mathcal{K}_{11} = -e^2$, $\mathcal{K}_{12} = -e(\epsilon - \mu) = -\mathcal{K}_{21}$, $\mathcal{K}_{22} = (\epsilon - \mu)^2$. Ein elektrisches Feld sorgt also für einen Wärmestrom und ein Temperaturgradient für elektrischen Strom (*Thomson-* bzw. *Seebeck-Effekt*). $K_{12,ab} = -K_{21,ab}$ ist die *Onsager-Relation*.

WIEDEMANN-FRANZ-GESETZ:

Berechnet man das Integral in K_{22} mit der Sommerfeld-Näherung aus 7.4 erhält man für die Wärmeleitfähigkeit

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

und zusammen mit der Drude-Leitfähigkeit für $\omega = 0$ folgt das *Wiedemann-Franz-Gesetz* (>7.12)

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

7.6 Hall-Effekt

ANNAHMEN:

Man betrachte die Boltzmann-Gleichung aus 7.1 für ein konstantes \vec{B} -Feld, ein schwaches konstantes \vec{E} -Feld und für unsere übliche Näherung des Stoßintegrals aus 7.3, $I[f] = -\delta f/\tau$ mit $f = f_0 + \delta f$. Wir suchen zudem eine stationäre, homogene Lösung mit $\partial f/\partial t = \nabla_{\vec{r}} f = 0$. Damit folgt (>7.13)

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

ANSATZ FÜR δf :

Ein Vergleich der Boltzmann-Gleichung und ihrer Lösung aus der Herleitung der Drude-Leitfähigkeit 7.4 legt den Ansatz

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

nahe, mit einem noch zu bestimmenden Vektor \vec{X} anstelle von \vec{E} (>7.14). Zudem wollen wir das Problem nur für die einfache Dispersionsrelation $\mathcal{E}_{\vec{p}} = \vec{p}^2/2m^*$ lösen.

LÖSEN DER BOLTZMANN-GLEICHUNG:

Einsetzen des Ansatzes und der Dispersionsrelation liefert

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

(>7.15). $\vec{X} = 0$ ist also für $\vec{B} \neq 0$ eine Lösung, insofern $\vec{E} = 0$ ist.

Diese Gleichung wird von folgendem \vec{X} gelöst (>7.15):

$$\vec{X} = \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} (\vec{E} + \omega_c^2 \tau^2 (\vec{E} \cdot \vec{b}) \vec{b} - \omega_c \tau \vec{E} \times \vec{b}), \quad \vec{b} := \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|}$$

LEITFÄHIGKEITSTENSOR:

Für die Drude-Leitfähigkeit haben wir in 7.4 $\vec{j} = \sigma_D \vec{E}$ mit $\sigma_D = nq^2\tau/m^*$ gefunden. Im Vergleich zur Drude-Leitfähigkeit haben wir hier \vec{E} durch \vec{X} ersetzt. Es gilt somit auch

$$j_a = \sigma_D X_a \stackrel{!}{=} \sigma_{ab} E_b.$$

Da wir \vec{X} explizit ermittelt haben, können wir so auf σ_{ab} schließen (>7.16):

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

Für $\vec{b} = \hat{z}$ vereinfacht sich dieser zu

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

Die nebendiagonal-Elemente beschreiben den Hall-Effekt, da sie einen Strom bewirken, der nicht in Richtung des elektrischen Feldes fließt. Man beachte, dass $\omega_c \sim B$.

HALL-KOEFFIZIENT:

Umgekehrt gilt $E_a = \rho_{ab} j_b$, wobei

$$\rho = \sigma^{-1} = \frac{\sigma_D^{-1}}{= \rho_D} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

der spezifische Widerstandstensor ist. Definiert man ferner

$\rho_D := \sigma_D^{-1}$, so folgt der sogenannte Hall-Koeffizient (>7.17)

$$R := \frac{E_{\perp}}{B j} = \frac{\rho_D \omega_c \tau}{B} \approx \frac{1}{ne},$$

wobei E_{\perp} die Feldkomponente senkrecht zum Magnetfeld und Strom ist und der letzte Schritt für kleine Magnetfelder gilt.

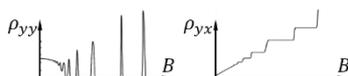
7.7 Quanten-Hall-Effekt (qualitativ)

DAS PHÄNOMEN:

Ganz am Ende von 7.6 haben wir für $\vec{B} = B \vec{e}_z$ gesehen, dass für den richtungsabhängigen spezifischen Widerstand

$$\rho_{yy} = \rho_D, \quad \rho_{yx} = -\rho_D \omega_c \tau_{Tr} \sim B$$

gilt. Tatsächlich beobachtet man aber folgenden Verlauf:



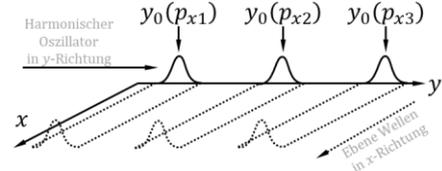
Unsere Formeln gelten also nur für kleine B . Die Peaks von ρ_{yy} liegen immer im Bereich eines Anstieges von ρ_{yx} .

LANDAU-NIVEAUS:

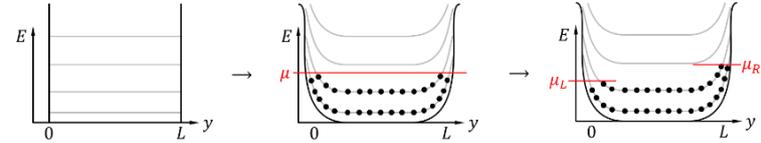
Wie wir in 4.4 gesehen haben, entstehen für Elektronen in einem Magnetfeld Landau-Niveaus, die \mathcal{N} -fach entartet sind mit

$$\mathcal{N} = L_x L_y eB/2\pi.$$

Für die dort gewählte Eichung $\vec{A} = -By \vec{e}_x$ machten wir in (>4.2) den Ansatz $\psi(\vec{r}) = Y(y) e^{i(p_x x + p_z z)}$ für die Wellenfunktion; das heißt in x -Richtung haben wir eine ebene Welle und in y -Richtung die Funktion $Y(y)$, die sich als Wellenfunktion eines harmonischen Oszillators herausstellt. $Y(y)$ ist entartet – zur selben Energie gehören verschiedene gleichartige Wellenfunktionen, die nur um $y \rightarrow y + y_0$ mit $y_0 = l_B^2 p_x$ für alle erlaubten p_x -Werte entlang der y -Achse verschoben sind:



Diese Grafik zeigt nun nur den Grundzustand des harmonischen Oszillators; an jeder Position y_0 gibt es aber auch die höheren Zustände, die in den höheren Landau-Niveaus liegen. Zeichnen wir nun die Landau-Zustände in ein Potentialtopf-Schema ein:



KORREKTUR DES POTENTIALTOPFES:

Um das Phänomen zu erklären, genügt es nicht, das vereinfachte Modell eines unendlich hohen Potentialtopfes zu betrachten; realistischer ist ein Topf, dessen Potential zu den Rändern hin etwas sanfter ansteigt. Diesen sanften Anstieg werden auch die Landau-Niveaus nachahmen. Wenn wir nun irgendein chemisches Potential μ annehmen, so sind alle darunterliegenden Zustände besetzt (schwarze Punkte). Liegt μ zwischen zwei Landau-Niveaus, ist das Material ein Isolator. Wegen der Krümmung am Rand des Topfes, kann dort am Rand aber immer Strom fließen, selbst wenn im Zentrum des Topfes μ zwischen zwei Niveaus liegt und dort daher kein Strom fließt.

ANLEGEN EINER SPANNUNG:

Legt man nun eine Spannung U in y -Richtung an, verschiebt sich das chemische Potential derart, dass es zum Beispiel am rechten Rand steigt und am linken Rand sinkt. Auf beiden Seiten fließt nun ein Strom entlang der x -Richtung (in y -Richtung ist das Material immer noch ein Isolator) und da es rechts mehr Elektronen gibt als links (μ_R liegt höher als μ_L) überwiegt dort der Stromfluss, sodass es auch einen netto-Stromfluss in x -Richtung gibt. Dieser ergibt sich *pro besetztem Landau-Niveau* zu

$$I_x = R_K^{-1} U, \quad R_K = 2\pi/q^2.$$

Mit $(I_x, I_y) = \sigma(U_x, U_y)$ folgt (N_L ist die Anzahl an Niveaus und R_K die Von-Klitzing-Konstante)

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -N_L/R_K \\ N_L/R_K & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho = \sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & R_K/N_L \\ -R_K/N_L & 0 \end{pmatrix}.$$

Man beachte, dass in dieser Matrix-Formulierung $\sigma_{xx} = \rho_{xx} = 0$ gilt. $\sigma = 0 \Rightarrow \rho = \infty$ gilt nicht mehr.

ERKLÄRUNG DES VERLAUFS VON ρ_{yy} und ρ_{yx} :

Wie wir in 4.4 gesehen haben, ist die Entartung eines Landau-Niveaus $\mathcal{N} \sim B$ und die Energie ebenfalls $E_n \sim B$. Für größere Magnetfelder verschieben sich die Niveaus also nach oben durch die μ -Linie hindurch. In y -Richtung fließt nur dann Strom, wenn μ auf einem Landau-Niveau liegt; dann ist ρ_{yy} endlich, d. h. dort gibt es einen ρ_{yy} -Peak. Für jedes weitere Landau-Niveau, das unterhalb von μ liegt, nimmt die Leitfähigkeit σ_{yx} zu, ρ_{yx} also ab. Das ist für immer kleinere Magnetfelder B der Fall, aber stufenförmig, da immer ein Niveau nach dem anderen durch μ hindurchrutscht.

8 Zweite Quantisierung

8.1 Bosonen

ZUSTÄNDE:

Sei $|i\rangle$ ein 1-Teilchen-Zustand, dessen Quantenzahlen hier durch i zusammengefasst werden; wird der Zustand beispielsweise durch Impuls und Spin beschrieben, schreibt man $|\vec{p}, \sigma\rangle$. Im Ortsraum schreiben wir $\phi_a(\vec{r})$, wobei a hier für alle möglichen Quantenzahlen bzw. für die Zustandsnummer steht. Ein allgemeiner N -Teilchen-Zustand ist dann

$$|N_1 N_2 \dots\rangle = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}} \sum_{\mathcal{P}} |\phi_{a_1}(\vec{r}_1) \dots \phi_{a_N}(\vec{r}_N)\rangle,$$

wobei N_i die Anzahl der Teilchen im i -ten Zustand und \mathcal{P} alle sinnvollen Permutationen bezeichnet (>8.1).

1-TEILCHEN-OPERATOREN:

1-Teilchen-Operatoren $f_{\vec{r}_i}^{(1)}$, die auf einzelne, bestimmte Teilchen am Ort \vec{r}_i wirken, sind nicht valide. Valide sind nur 1-Teilchen-Operatoren derart

$$F^{(1)} = \sum_{i=1}^N f_{\vec{r}_i}^{(1)}.$$

Derartige 1-Teilchen-Operatoren können nur den Zustand maximal eines Teilchens verändern. Daher gibt es nur die folgenden nicht-verschwindenden Matrixelemente (>8.2, >8.3):

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \sum_a N_a \langle a | f^{(1)} | a \rangle,$$

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

ERZEUGUNGS- UND VERNICHTUNGSOPERATOREN:

Wir definieren eine Vernichtungsoperator \hat{a}_b als (>8.4)

$$\begin{aligned} \hat{a}_b |\dots N_b \dots\rangle &:= \sqrt{N_b} |\dots N_b - 1 \dots\rangle \\ \Rightarrow \hat{a}_b^\dagger |\dots N_b \dots\rangle &:= \sqrt{N_b + 1} |\dots N_b + 1 \dots\rangle \\ \Rightarrow \hat{N}_b |\dots N_b \dots\rangle &:= \sqrt{N_b} |\dots N_b \dots\rangle, \quad \hat{N}_b := \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_b, \\ &[\hat{a}_a, \hat{a}_b^\dagger] = \delta_{ab}. \end{aligned}$$

Somit folgt direkt aus obiger Formel, dass wir einen validen 1-Teilchen-Operator schreiben können als (>8.5)

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

2-TEILCHEN-OPERATOREN:

Es gibt auch Operatoren, die auf mehrere Teilchen gleichzeitig wirken können; höhere als 2-Teilchen-Operatoren sind aber in der Praxis sehr selten. Sei $f_{\vec{r}_1 \vec{r}_2}^{(2)}$ ein Operator, der auf zwei bestimmte Koordinaten wirkt, dann ist ein valider Operator

$$F^{(2)} = \sum_{i < j} f_{\vec{r}_i \vec{r}_j}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | f^{(2)} | cd \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_c \hat{a}_d$$

mit einer Summe über alle Paare i, j . Für das einfachste der möglichen Matrixelement ist die Gleichheit, analog zu (>8.2) und (>8.5) in (>8.6) und (>8.7) gezeigt.

FELDOPERATOREN:

Wir definieren nun Feld-Operatoren

$$\psi(\vec{r}) = \sum_a \phi_a(\vec{r}) \hat{a}_a, \quad \psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_a \phi_a^*(\vec{r}) \hat{a}_a^\dagger$$

mit 1-Teilchen-Zuständen im Ortsraum $\phi_a(\vec{r})$. Aus der Vollständigkeit $\sum_a \phi_a^*(\vec{r}) \phi_a(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ kann man leicht $[\psi(\vec{r}), \psi^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$, $[\psi(\vec{r}), \psi(\vec{r}')] = [\psi^\dagger(\vec{r}), \psi^\dagger(\vec{r}')] = 0$ zeigen (>8.8).

Mit Feld-Operatoren kann man etwa 1-Teilchen-Zustände schreiben als (>8.9)

$$F^{(1)} = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) f^{(1)} \psi(\vec{r}).$$

8.2 Beispiel: Hamilton-Operator für Bosonen

ALLGEMEINE FORM:

Eine sehr übliche Form des Hamilton-Operators ist nun

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

wobei mit \vec{p}_i der Impulsoperator $\vec{p}_i = -i\nabla_{\vec{r}_i}$ gemeint ist. $U^{(1)}$ beschreibt nun ein (externes) Potential, dass für alle Teilchen gleich ist; $U^{(2)}$ beschreibt Wechselwirkungen zwischen Teilchen. Mit den Formeln aus (>8.1) kann man diesen Hamilton-Operator auch durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren oder Feldoperatoren ausdrücken.

STREUUNG:

Man betrachte nun freie, aber wechselwirkende Teilchen, also $U^{(1)} = 0$ aber $U^{(2)} \neq 0$. In diesem Fall kann man den Hamilton-Operator schreiben als (>8.10)

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

Dieser Hamilton-Operator beschreibt einen Stoß von zwei Teilchen mit Impulsübertrag \vec{q} . Dabei ist $\tilde{U}^{(2)}(\vec{q})$ die Fourier-transformierte von $U^{(2)}(\vec{r})$.

8.3 Fermionen

ZUSTÄNDE:

Einen N -Teilchen-Zustand von Fermionen kann man schreiben als

$$\begin{aligned} |N_1 N_2 \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} |\phi_{a_1}(\vec{r}_1) \dots \phi_{a_N}(\vec{r}_N)\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{a_1}(\vec{r}_1) & \phi_{a_1}(\vec{r}_2) & \dots \\ \phi_{a_2}(\vec{r}_1) & \phi_{a_2}(\vec{r}_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Im Unterschied zu den Bosonen enthält der Vorfaktor nur $N!$, denn $N_i = 0, 1$ und es werden hier nur besetzte Zustände mit $N_i = 1$ betrachtet. Außerdem hat man einen Faktor -1 je nach Permutation \mathcal{P} . Die Determinanten-Schreibweise nennt sich *Slater-Determinante*.

MATRIX-ELEMENTE VON 1-TEILCHEN-OPERATOREN:

Wie schon für Bosonen in 8.1 gilt für 1-Teilchen-Operatoren $F^{(1)} = \sum_{i=1}^N f_{\vec{r}_i}^{(1)}$, dass

$$\langle N_1 N_2 \dots | F^{(1)} | N_1 N_2 \dots \rangle = \sum_a N_a \langle a | f^{(1)} | a \rangle.$$

Für das andere Matrixelement gilt nun (ohne Beweis)

$$\begin{aligned} \langle \dots N_a \dots N_b - 1 \dots | F^{(1)} | \dots N_a - 1 \dots N_b \dots \rangle \\ = \langle a | f^{(1)} | b \rangle \cdot (-1)^{\sum_{k=a+1}^b N_k}. \end{aligned}$$

Man muss also alle Zustände beliebig (aber immer gleich) anordnen und für jeden Schritt über besetzte Zustände den man von a nach b gehen muss, erhält man einen Faktor -1 .

ERZEUGUNGS- UND VERNICHTUNGSOPERATOREN:

Wir wollen erneut Operatoren \hat{a}_a^\dagger und \hat{a}_a definieren, sodass wir

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

schreiben können. Dazu müssen wir sie definieren als (>8.11)

$$\begin{aligned} \hat{a}_a^\dagger |\dots N_a \dots\rangle &:= (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} |\dots N_a + 1 \dots\rangle \quad (\text{für } N_a = 0), \\ \hat{a}_a |\dots N_a \dots\rangle &:= (-1)^{\sum_{k=1}^{a-1} N_k} |\dots N_a - 1 \dots\rangle \quad (\text{für } N_a = 1). \end{aligned}$$

Damit stellt sich heraus, dass diese Operatoren

Antikommutatorrelationen erfüllen (>8.12):

$$\{\hat{a}_a, \hat{a}_b\} = \{\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_b^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{a}_a^\dagger, \hat{a}_b\} = \delta_{ab}.$$

2-TEILCHEN-OPERATOREN:

Es gilt, ohne Beweis,

$$F^{(2)} = \sum_{i < j} f_{\vec{r}_i \vec{r}_j}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | f^{(2)} | cd \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_c \hat{a}_d$$

9 Wechselwirkungen

9.1 Korrelationsfunktionen freier Fermionen

N-TEILCHEN-ZUSTAND FREIER ELEKTRONEN:

Den N -Teilchen-Zustand von freiem Fermi-Gas $|\varphi_0\rangle$ können wir bei $T = 0$ schreiben als

$$|\varphi_0\rangle := \prod_{\substack{\sigma\vec{p} \\ \text{mit } |\vec{p}| < p_F}} a_{\vec{p}\sigma}^\dagger |0\rangle,$$

wobei der Fermi-Impuls für freie Teilchen $p_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ mit $n := N/V$ beträgt.

1-TEILCHEN-KORRELATIONSFUNKTION:

Wir definieren die 1-Teilchen-Korrelationsfunktion als

$$g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) := \frac{2}{n} \langle \varphi_0 | \psi_\sigma^\dagger(\vec{r}_2) \psi_\sigma(\vec{r}_1) | \varphi_0 \rangle.$$

Für freie Fermionen, d. h. $|\varphi_0\rangle$ ist durch obigen N -Teilchen-Zustand gegeben und die Wellenfunktionen in ψ_σ sind ebene Wellen, folgt (>9.1)

$$g_\sigma(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = 3 \frac{\sin x - x \cos x}{x^3}, \quad x := p_F |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$$

sowie $g_\sigma(0) = 1$.

2-TEILCHEN-KORRELATIONSFUNKTION:

Wir definieren die 2-Teilchen-Korrelationsfunktion als

$$g_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) := \frac{4}{n^2} \langle \varphi_0 | \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) | \varphi_0 \rangle,$$

was der Wahrscheinlichkeit entspricht, ein Teilchen mit Spin σ_2 am Ort \vec{r}_2 anzutreffen, wenn an \vec{r}_1 bereits ein Teilchen mit σ_1 ist. Für freie Fermionen finden wir diesmal (>9.2)

$$g_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{für } \sigma_1 \neq \sigma_2 \\ 1 - |g_\sigma(\vec{r})|^2, & \text{für } \sigma_1 = \sigma_2 =: \sigma \end{cases}$$

Plottet man $g_{\sigma\sigma}$, findet man Pauli-Abstoßung (>9.3). Ihre Reichweite liegt in der Größenordnung von des Fermi-Abstandes $r_F := (9\pi/4)^{1/3} p_F^{-1}$; dies ist gerade der Radius einer Kugel mit Volumen V/N . Man definiert zudem $r_S := r_F/a_0$ (mit Bohrschem Radius a_0), um die Pauli-Abstoßung mit der elektromagnetischen Wechselwirkung zu vergleichen.

9.2 Wechselwirkendes Fermi-Gas: Hartree-Fock

HAMILTON-OPERATOR:

Der Hamilton-Operator von beliebig vielen Fermionen lässt sich nun schreiben als (>9.4)

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) H^{(1)} \psi_{\sigma}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) U^{(2)} \psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1)$$

mit $H^{(1)} = \vec{p}^2/2m + U^{(1)}(\vec{r})$.

GEL-MODELL (JELLIUM-MODEL):

Betrachtet man das Elektronengas gesondert, so enthält ein Metall neben diesem Elektronengas noch positiv geladene Ionen, die ein „externes“ Potential $U^{(1)}(\vec{r})$ erzeugen. Im Gel-Modell betrachtet man diese Ionen nicht als einzelne Punktladungen, sondern als verschmiertes „Gel“ der Dichte $n_1(\vec{r})$, das dann das Potential $U^{(1)}$ erzeugt. Eine sinnvolle Annahme ist sicherlich $n_1 = \text{const}$. Wenn das Metallvolumen – und damit das Integrationsvolumen – groß aber endlich ist, kann man dann $U^{(1)}$ innerhalb des Metalls als konstant nähern:

$$U^{(1)}(\vec{r}) = - \int_V d^3r' \frac{n_1(\vec{r}') e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \stackrel{n_1 = \text{const.}}{\approx} -n_1 \int_V d^3r' \frac{e^2}{|\vec{r}'|} =: -n_1 U_0.$$

ERWARTUNGSWERTE DES FREIEN FERMI-GASES:

Wir wollen nun den Erwartungswert von H bzgl. des freien Fermi-Gases $|\varphi_0\rangle$ aus 9.1 berechnen. Zwar ist $|\varphi_0\rangle$ sicherlich kein Eigenzustand von H , dennoch liefert $\langle \varphi_0 | H | \varphi_0 \rangle$ womöglich eine mehr oder weniger gute Abschätzung für die Energie. Unser Hamilton-Operator setzt sich aus E_{pot} , E_{kin} und E_{WW} zusammen; die entsprechenden Erwartungswerte ergeben

$$E_{\text{pot}} = -n_1 U_0 N, \quad E_{\text{kin}} = \frac{3}{5} N E_F,$$

$$E_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 U^{(2)}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \left(n^2 - \frac{n^2}{4} \sum_{\sigma} |g_{\sigma}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|^2 \right),$$

siehe (>9.5), (>9.6) und (>9.7). Der n^2 -Term wird *Hartree-Beitrag* E_{Ha} genannt, der g_{σ} -Term *Fock-Beitrag* E_{Fo} . Letzterer ist eine quantenmechanische Korrektur zum wechselwirkungsfreien Fermi-Gas.

ENERGIEBILANZ:

Für eine konstante Elektronendichte $n = n_1$ und falls $U^{(2)}$ ebenso wie $U^{(1)}$ einfach Coulomb-Abstoßung beschreibt, gilt offenbar

$$E_{\text{Ha}} = \frac{n^2}{2} \int_V d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \approx \frac{n^2 V}{2} \int_V d^3r_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_2|} = \frac{n N U_0}{2} = -\frac{E_{\text{pot}}}{2}.$$

Würde man die potentielle Energie der positiv geladenen Ionen mitberücksichtigen, hätte man $E_{\text{pot,I}} = E_{\text{Ha}}$. Somit folgt

$$E_{\text{Ha}} + E_{\text{pot}} + E_{\text{pot,I}} = 0.$$

Die relevanten Energien sind also nur (>9.8)

$$E_{\text{kin}} + E_{\text{Fo}} = \frac{3}{5} N E_F - \frac{3e^2}{4\pi} N p_F.$$

Wir können diese Energie pro Teilchen auch schreiben als (>9.9)

$$\frac{E_{\text{kin}} + E_{\text{Fo}}}{N} \approx \left(\frac{2,210}{r_S^2} - \frac{0,916}{r_S} \right) \frac{e^2}{2a_0}.$$

Die minimale Energie erhält man für $r_S \approx 4,8$. Tatsächlich findet man für Alkalimetall diesen Wert, was unsere Abschätzung der Energie durch $\langle \varphi_0 | H | \varphi_0 \rangle$ rechtfertigt.

9.3 Anregungen in Fermi-Gas und -Flüssigkeit

ANREGUNGEN IM FERMI-GAS:

Beginnen wir zunächst wieder mit wechselwirkungsfreiem Fermi-Gas. Bei $T = 0$ ist die Fermi-Verteilung eine Stufenfunktion. Man betrachte nun eine Anregung, das heißt ein Elektron, das durch eine Energiezufuhr $\Delta E := \epsilon_2 - \epsilon_1$ aus dem Fermi-See herausgehoben wird, d. h. $\epsilon_1 < E_F$ und $\epsilon_2 > E_F$. Wenn wir die zugeführte Energie schreiben als

$$\Delta E = \epsilon_2 - \epsilon_1 = (\epsilon_2 - E_F) + (E_F - \epsilon_1)$$

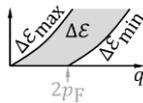
können wir auch davon sprechen, ausgehend von einem vollen Fermi-See ein zusätzliches Elektron mit Quasi-Energie $\xi_2 := \epsilon_2 - E_F$ und ein Loch mit Quasi-Energie $\xi_1 := E_F - \epsilon_1$ erzeugt zu haben. Für $\epsilon_i \approx E_F$ gilt (>9.10)

$$\xi_1 \approx v_F(p_F - p_1), \quad \xi_2 \approx v_F(p_2 - p_F).$$

Für einen gegebenen Impulsübertrag $\vec{q} := \vec{p}_2 - \vec{p}_1$ kann die Energiedifferenz ΔE folgende Werte annehmen (>9.11):

$$0 < \Delta E \leq \frac{q(q + 2p_F)}{2m} \quad \text{für } q \leq 2p_F,$$

$$\frac{q(q - 2p_F)}{2m} < \Delta E \leq \frac{q(q + 2p_F)}{2m} \quad \text{für } q > 2p_F.$$



Für gegebene Impulsüberträge $|\vec{q}| = q$ findet man also irgendwelche Übergänge mit Energiedifferenz ΔE .

POSTULAT VON LANDAU:

Das Postulat von Landau besagt, dass das Anregungsspektrum von Fermi-Flüssigkeit – das wechselwirkende Pendant zum Fermi-Gas – für niedrige Temperaturen (also kleine q) die gleiche Form hat, wie jenes von Fermi-Gas.

FERMI-FLÜSSIGKEIT:

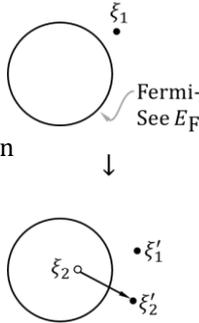
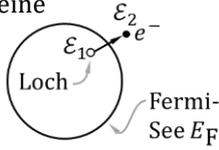
Man betrachte nun Fermi-Flüssigkeit, in der etwa $2 \rightarrow 2$ -Streuung möglich ist, wie sie durch Operatoren $F^{(2)} \sim \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_a \hat{a}_c$ aus 8.1 beschrieben wird. Man betrachte nun eine solche Streuung mit einem Anfangszustand, in dem es ein Elektron mit Quasi-Energie ξ_1 zusätzlich zu einem vollen Fermi-See gibt. Dieses streue nun mit einem Elektron aus dem Fermi-See und reiße dieses mit aus dem See hinaus; ein Elektron-Loch-Paar mit Quasi-Energien ξ_2 und ξ'_2 wird erzeugt. Die Quasi-Energiebilanz ist (>9.12)

$$\xi_1 = \xi'_1 + \xi_2 + \xi'_2.$$

Nimmt man ξ_1 als gegeben an, so ist eine weitere Quasi-Energie, sagen wir ξ'_2 , durch die Quasi-Energiebilanz fixiert und ξ_2 sowie ξ'_1 sind frei wählbar, aber sicherlich gilt $\xi_1 > \xi'_1, \xi_2$. Der zur Verfügung stehende Phasenraum für diesen Prozess ist somit

$$\xi'_1 \cdot \xi_2 < \xi_1^2,$$

die Streurrate also etwa $\gamma \sim \xi_1^2$. Für $\xi_1 \ll E_F$ ist die Streurrate klein und die Zustände außerhalb, aber in der Nähe, der Fermi-Oberfläche langlebig.



9.4 Fermi-Flüssigkeit und Landau-Funktion

BESETZUNGSZAHLEN UND ENERGIEKORREKTUR:

Für die Besetzungszahl bei $T = 0$ gilt

$$n_{\vec{p}\sigma} = \begin{cases} 1, & |\vec{p}| \leq p_F \\ 0, & |\vec{p}| > p_F \end{cases}$$

allerdings beeinflussen die Wechselwirkungen die Energie, sodass eine Korrektur zu $E = \sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma}$ nötig ist:

$$\delta E = \sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon_{\vec{p}\sigma} \{n_{\vec{q}\sigma'}\} \delta n_{\vec{p}\sigma},$$

wobei $\epsilon_{\vec{p}\sigma}$ hier nun ein Funktional der Besetzungszahlen der anderen Impulse $n_{\vec{q}\sigma'}$ mit $\vec{q} \neq \vec{p}$ oder $\sigma \neq \sigma'$ ist (eben weil diese mit dem Teilchen \vec{p} wechselwirken.).

Zudem wollen wir statt $n_{\vec{p}\sigma}$ mit $\sigma = \uparrow, \downarrow$ eine Spin-Matrix $n_{\vec{p}\alpha\beta}$ mit $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$ schreiben. α ist der Spin des ersten und β des zweiten Teilchens mit Impuls \vec{p} . $n_{\vec{p}\alpha\beta} = 0, 1$ beschreibt, ob die beiden Teilchen mit Impuls \vec{p} sich im $\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$ - oder $\downarrow\downarrow$ -Zustand befinden: Da $\uparrow\downarrow$ und $\downarrow\uparrow$ ununterscheidbar sind, ist die Matrix $\hat{n}_{\vec{p}}$ symmetrisch und es folgt

$$\delta E = \sum_{\vec{p}\alpha\beta} \epsilon_{\vec{p}\alpha\beta} \frac{\delta n_{\vec{p}\alpha\beta}}{\delta n_{\vec{p}\beta\alpha}} = \sum_{\vec{p}} \text{Tr} \hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} \delta \hat{n}_{\vec{p}}.$$

ENTROPIE UND FERMI-VERTEILUNG:

Ist der n -te Zustand mit Wahrscheinlichkeit W_n besetzt, gilt für die Entropie $S = -k \sum_n W_n \ln W_n$. Somit folgt

$$S = -k \sum_{\vec{p}} \text{Tr} (\hat{n}_{\vec{p}} \ln \hat{n}_{\vec{p}} + (1 - \hat{n}_{\vec{p}}) \ln(1 - \hat{n}_{\vec{p}})),$$

wobei der $1 - \hat{n}_{\vec{p}}$ -Term (*vermutlich*) die Löcher beschreibt. Mit $\delta N = \sum_{\vec{p}} \text{Tr} \delta \hat{n}_{\vec{p}}$ und Lagrange-Multiplikatoren λ_1, λ_2 kann man die Entropie $\tilde{S} = S + \lambda_1 E + \lambda_2 N$ minimieren und erhält (>9.13)

$$\hat{n}_{\vec{p}} = \frac{1}{\exp \beta (\hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}} - \mu) + 1}.$$

So bekannt diese Gleichung auch aussieht: Hier hängt $\hat{\mathcal{E}}_{\vec{p}}$ nun von $\hat{n}_{\vec{p}}$ ab! $\hat{n}_{\vec{p}}$ wird durch diese Gleichung also nur implizit bestimmt.

LANDAU-FUNKTION - KORREKTUR ZUR DISPERSIONSRELATION:

In 9.3 haben wir gesehen, dass ein Elektron nahe oberhalb des Fermi-Sees die Energie $\epsilon_{\vec{p}} = E_F + \xi \approx E_F + v_F(p - p_F)$ hat. Hierzu postuliert nun Landau die Korrektur (man beachte, dass $\mathcal{E}_{\vec{p}\alpha\beta}$ hier eine Spin-Matrix ist)

$$\delta \mathcal{E}_{\vec{p}\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'\gamma\delta} f_{\alpha\beta\gamma\delta}(\vec{p}, \vec{p}') \delta n_{\vec{p}'\gamma\delta},$$

wobei

$$V^{-1} g(E_F) f_{\alpha\beta\gamma\delta}(\vec{p}, \vec{p}') = F(\theta_{\vec{p}\vec{p}'}) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + G(\theta_{\vec{p}\vec{p}'}) \sigma_{i\alpha\beta} \sigma_{i\gamma\delta},$$

und $\sigma_{i\alpha\beta}$ die $\alpha\beta$ -Komponente der i -ten Pauli-Matrix ist. Diese Form für $\delta \mathcal{E}_{\vec{p}\alpha\beta}$ wird hier als Postulat ohne weitere Begründung gegeben. $\theta_{\vec{p}\vec{p}'}$ ist der Winkel zwischen \vec{p} und \vec{p}' .

Im Shnirmann-Skript ist – im Gegensatz zu hier – die Zustandsdichte exklusive Volumen definiert; also gilt $g(\mathcal{E}) = V g_{\text{Shnirmann}}(\mathcal{E})$.

9.5 Nullter Schall (Zero Sound)

BOLTZMANN-GLEICHUNG:

Wir betrachten nun die Boltzmann-Gleichung und ersetzen dort die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f durch unsere Besetzungszahl $n_{\vec{p}}(\vec{r}) = n_{0\vec{p}} + \delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ aus 9.4. Wir wollen nur die internen Wechselwirkungen ohne externes Feld untersuchen; $n_{0\vec{p}}$ ist die Besetzungszahl ohne Einfluss der Wechselwirkung; diese ist sicherlich ortsunabhängig. Zudem betrachten wir das Ganze ohne Spin, sodass sämtliche Spin-Indizes verschwinden.

Anstelle der externen (Lorentz-)Kraft tritt nun die Korrektur zur Dispersionsrelation aus 9.4; wenn wir die Hamilton-Funktion H in der Hamiltonschen Bewegungsgleichung $\dot{\vec{p}} = -\nabla_{\vec{r}}H$ durch dieses $\mathcal{E}_{\vec{p}}$ ersetzen, erhalten wir

$$\dot{\vec{p}} = \underbrace{\vec{F}_{\text{ext}}}_{=0} - \nabla_{\vec{r}}\mathcal{E}_{\vec{p}} = -\nabla_{\vec{r}}\delta\mathcal{E}_{\vec{p}},$$

wobei im letzten Schritt verwendet wurde, dass erst die Korrektur zur Dispersionsrelation vom Ort abhängt.

Mit den üblichen diversen Annahmen zur Vereinfachung der Boltzmann-Gleichung folgt (>9.14)

$$\frac{\partial \delta n_{\vec{p}}}{\partial t} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') (\nabla_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}'}) \cdot (\nabla_{\vec{r}} n_{0\vec{p}}) + v_F \hat{p} \cdot \nabla_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} = 0.$$

ANSATZ:

Für $\delta n_{\vec{p}}$ wählen wir nun den Ansatz einer ebenen (Schall-)Welle

$$\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = X(\hat{p}) \delta \left(\mathcal{E}_{\vec{p}}^{(0)} - E_F \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}.$$

Gesucht ist dabei die Funktion X von $\hat{p} := \vec{p}/|\vec{p}|$. Mit der Boltzmann-Gleichung findet man den Zusammenhang (>9.15)

$$X(\theta, \varphi) \sim \frac{F \cos \theta}{s - \cos \theta}, \quad s := \frac{\omega}{v_F q}$$

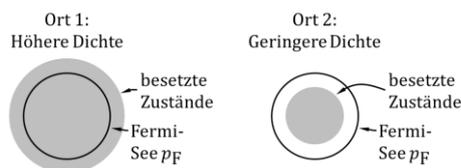
wobei θ, φ die Kugelkoordinaten-Winkel von \hat{p} sind, wobei wir $\hat{z} \parallel \vec{q}$ gewählt haben. Die Proportionalitätskonstante lässt sich allein mit der Boltzmann-Gleichung nicht ermitteln. Allerdings findet man noch einen Zusammenhang zwischen $F = F(\theta_{\vec{p}\vec{p}'}) = \text{const.}$ und s :

$$F = \left(\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 \right)^{-1}.$$

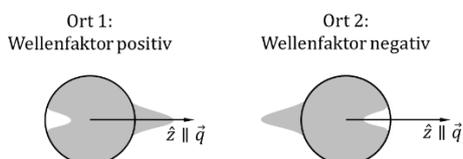
Für ein gemessenes s lässt sich so F bestimmen. Ist F anderweitig schon bekannt, lässt sich so s bestimmen und damit die Dispersionsrelation $\omega(q) = v_F s q$ der Schallwelle.

INTERPRETATION:

Da wir eine wellenartige Dichtefluktuations $\delta n_{\vec{p}} \sim e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ angenommen haben, reden wir von einer „Schallwelle“. Ansonsten hat die Welle des sogenannten *Nullten Schalls* nicht viel mit dem gewöhnlichen Schall gemein. Bei gewöhnlichem Schall würde die Dichte (hier nur Elektronendichte) mancherorts zunehmen und dazwischen abnehmen, sodass die Zustände mancherorts über den normalen Fermi-See hinaus besetzt sind und anderenorts der Fermi-See nicht ganz voll ist:



Beim Nullten Schall hängt die Amplitude X der Schallwelle von der Richtung des Impulses, ausgedrückt durch θ , ab. Sie ist maximal für $\theta = 0$ und maximal negativ (wenn auch mit geringerer Amplitude) für $\theta = \pi$. Der im Impulsraum besetzten Zustände (graue Fläche) sehen also so aus:



10 Phononen

10.1 Born-Oppenheimer-Approximation

KOMPLETTER HAMILTON-OPERATOR EINES MOLEKÜLS:

Die komplette Quantenmechanik eines Moleküls mit N freien Elektronen und M Ionen lässt sich beschreiben durch einen Hamilton-Operator der Form

$$H = H_{el} + H_{ion} + H_{WW},$$

mit

$$H_{el} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|},$$

$$H_{ion} = \sum_{i=1}^M \frac{\vec{P}_i^2}{2M_i} + \sum_{i<j}^M V_{ion}(\vec{R}_i - \vec{R}_j),$$

$$H_{WW} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M V_{WW}(\vec{r}_i - \vec{R}_j).$$

BORN-OPPENHEIMER-APPROXIMATION:

Anstatt – wie quantenmechanisch eigentlich notwendig – das System als $N + M$ -Teilchen-System zu betrachten und auch Wellenfunktionen für die Ionen zu berechnen, geht man in der Born-Oppenheimer-Approximation davon aus, dass die viel schwereren Ionen an irgendwelchen Orten \vec{R}_i fixiert sind. Wir wollen nun das quantenmechanische Problem nur für die Elektronen lösen; wir betrachten \vec{R}_i also nunmehr als Parameter und nicht mehr als Koordinaten:

$$(H_{el} + H_{WW})\psi_n^{el} = E_n^{el}\psi_n^{el}.$$

Die Energien E_n^{el} werden dann natürlich von diesen Parametern \vec{R}_i abhängen. Die Gesamtenergie des Systems können wir dann schreiben als

$$E_{ges}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) = \sum_{i<j}^M V_{ion}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) + E_{el}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots).$$

Nach wie vor betrachten wir die Ionen in Ruhe, also ohne kinetische Energie. E_{ges} lässt sich auch als effektives Potential für die Ionen verstehen; V_{ion} ist der abstoßende Teil und E_{el} der anziehende. Nun kann man E_{ges} minimieren, um die energetisch günstigsten Ionenpositionen \vec{R}_i zu finden und damit auch die Elektronen-Energieniveaus E_{el} .

10.2 Gitterschwingungen

IONISCHES POTENTIAL UND NOTATION:

Wir betrachten nun $E_{ges}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) =: V(\{\vec{r}_{ni}\})$ aus 10.1 als effektives Potential für die Ionen des Gitters. Statt die Ionen durchnummerieren, nutzen wir zwei Indizes n, i , wobei n die Elementarzelle und i das dortige Basisatom indiziert. Mit Gittervektoren \vec{R}_n und Basisvektoren \vec{a}_i schreiben wir somit

$$\vec{r}_{ni\mu}(t) = \vec{R}_{n\mu} + \vec{a}_{i\mu} + u_{ni\mu}(t), \quad \mu = x, y, z.$$

Dabei ist $u_{ni\mu}$ die Auslenkung aus der Gleichgewichtslage. Das effektive Potential können wir nun nach den Auslenkungen um das Minimum bei $u_{ni\mu} = 0$ entwickeln:

$$V(\{\vec{r}_{ni\alpha}\}) = V(\{\vec{u}_{ni\alpha}\}) = \frac{1}{2} \sum_{nmij\mu\nu} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{ni\mu} u_{mj\nu} + \mathcal{O}(u^3).$$

EIGENSCHAFTEN DER KOEFFIZIENTEN (>10.1):

$$\phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \phi_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m), \quad \phi_{ij\mu\nu}^{nm} = \phi_{jiv\mu}^{mn}, \quad \sum_{mj} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} = 0.$$

NEUE KOORDINATEN:

Um die Bewegungsgleichungen ein wenig zu vereinfachen, arbeiten wir lieber mit den Koordinaten

$$A_{ni\mu} := \sqrt{m_i} u_{ni\mu}, \quad D_{ij\mu\nu}^{nm} := (m_i m_j)^{-1/2} \phi_{ij\mu\nu}^{nm}.$$

D erbt die Eigenschaften von ϕ wie folgt (>10.2):

$$D_{ij\mu\nu}^{nm} = D_{ij\mu\nu}(\vec{R}_n - \vec{R}_m), \quad D_{ij\mu\nu}^{nm} = D_{jiv\mu}^{mn}, \quad \sum_{mj} \sqrt{m_j} D_{ij\mu\nu}^{nm} = 0.$$

BEWEGUNGSGLEICHUNG:

Mit A 's statt u 's lauten die Bewegungsgleichungen (>10.3)

$$\ddot{A}_{ni\mu} = -\sum_{mj\nu} D_{ij\mu\nu}^{nm} A_{mj\nu}$$

Wenn wir die Indizes $ni\mu$ zu einem Index $X = \{ni\mu\}$ zusammenfassen, können wir A_X als Vektor- und D_{XY} als Matrixkomponente auffassen und diese Gleichung als Matrix-Gleichung schreiben:

$$\ddot{A} = -DA.$$

Man könnte nun die Eigenmoden über $\det(D - \omega^2) = 0$ finden, allerdings ist D eine $3NM \times 3NM$ -Matrix (mit N Elementarzellen n und M Basisatomen i pro Zelle in 3 Dimensionen μ). Die Größe der Matrix lässt sich mittels Fouriertransformation reduzieren.

FOURIERTRANSFORMATION:

Eine Fouriertransformation der Gleichung liefert (>10.4)

$$\ddot{A}_{i\mu}(\vec{q}) = -\sum_{j\nu} D_{ij\mu\nu}(\vec{q}) A_{j\nu}(\vec{q}) \Leftrightarrow \ddot{A}(\vec{q}) = -D(\vec{q}) A(\vec{q}),$$

die sicher wieder mit $X = \{i\mu\}$ in eine Matrix-Gleichung mit Vektorkomponente A_X und Matrixkomponente D_{XY} schreiben lässt. D ist nun nur noch eine $3M \times 3M$ -Matrix – dies ist (zumindest numerisch) machbar; der größte Faktor N ist verschwunden. Man erhält nun die Dispersionsrelation $\omega(\vec{q})$, indem man $\det(D(\vec{q}) - \omega^2(\vec{q})) = 0$ für jedes \vec{q} einzeln löst.

EIGENWERTE UND -VEKTOREN:

Die Matrix $D(\vec{q})$ ist hermitesch: $D = D^\dagger$ (>10.5). Somit hat sie $3M$ reelle Eigenwerte $\omega_\alpha^2(\vec{q})$ mit zugehörigen Eigenvektoren $e_{\alpha X}(\vec{q})$ mit $\alpha = 1, \dots, 3M$. Zudem kann man zeigen, dass (>10.6)

$$\omega_\alpha^2(-\vec{q}) = \omega_\alpha^2(\vec{q}), \quad e_{\alpha X}(-\vec{q}) = e_{\alpha X}^*(\vec{q}), \quad X = \{i\mu\}.$$

GRENZFALL $\vec{q} = 0$ - AKUSTISCHE MODEN:

Für $\vec{q} = 0$ findet man drei Eigenvektoren der Matrix $D(0)$ mit Eigenwert $\omega_\alpha^2(0) = 0$. Diese Moden nennt man *akustisch* (>10.7). Für akustische Moden schwingen alle Vektoren einer Einheitszelle in Phase (d. h. $u_{i\mu}(\vec{q})$ ist unabhängig von i , >10.8).

GRENZFALL $\vec{q} = 0$ - OPTISCHE MODEN:

Die übrigen $3M - 3$ Moden sind *optisch*, haben also endliche Eigenwerte $\omega_\alpha^2(0) > 0$ bei $\vec{q} = 0$. Sie haben die Eigenschaft

$$\sum_i m_i u_{i\mu}(0) = 0.$$

Der Schwerpunkt der Atome einer Elementarzelle ist also konstant – die Bewegung innerhalb einer Elementarzelle ist also irgendwie gegenphasig (>10.9).

10.3 Quantisierung von Phononen

KINETISCHE UND POTENTIELLE ENERGIE:

Die Energien lassen sich schreiben als ($>10.10, >10.11$)

$$T = \frac{1}{2} \sum_{n\mu} m_i \dot{u}_{ni\mu}^2 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \dot{B}_\alpha(\vec{q}) \dot{B}_\alpha(-\vec{q}),$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{nmij\mu\nu} \phi_{ij\mu\nu}^{nm} u_{ni\mu} u_{mj\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_\alpha^2(\vec{q}) B_\alpha(\vec{q}) B_\alpha(-\vec{q}),$$

Dabei sind $B_\alpha(\vec{q})$ einfache harmonische Schwingungen der Form $\sim e^{\pm i\omega_\alpha t}$ mit \vec{q} -abhängigen Koeffizienten (>10.8).

QUANTISIERUNG MIT LEITEROPERATOREN:

Zur besseren Übersicht schreiben wir das Argument \vec{q} im Folgenden als Index. Wir definieren den kanonischen Impuls

$$P_{\vec{q}\alpha} := \frac{\partial H}{\partial \dot{B}_{\vec{q}\alpha}} = \dot{B}_{-\vec{q}\alpha}$$

(>10.12) sowie in Analogie zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator die Leiteroperatoren

$$a_{\vec{q}\alpha} := \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (\omega_{\vec{q}\alpha} B_{\vec{q}\alpha} + iP_{-\vec{q}\alpha}),$$

$$a_{\vec{q}\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (\omega_{\vec{q}\alpha} B_{-\vec{q}\alpha} - iP_{\vec{q}\alpha}).$$

Dies ist äquivalent zu (>10.13)

$$B_{\vec{q}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger + a_{\vec{q}\alpha}),$$

$$P_{\vec{q}\alpha} = \frac{i\omega_{\vec{q}\alpha}}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}\alpha}}} (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger - a_{-\vec{q}\alpha}).$$

Da Phononen Bosonen sind, nehmen wir an, dass $[a_{\vec{q}\alpha}, a_{\vec{q}\alpha}^\dagger] = 1$.

HAMILTON-OPERATOR:

Damit lässt sich der Hamilton-Operator schreiben als (>10.14)

$$H = \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} (a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} + 1/2).$$

PHYSIKALISCHE AUSLENKUNGEN:

Für die physikalische Auslenkung aus der Gleichgewichtslage folgt (>10.15)

$$u_{ni\mu} = \sum_{\vec{q}\alpha} \frac{1}{\sqrt{2Nm_i\omega_{\vec{q}\alpha}}} (e_{\alpha i\mu}(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} + e_{\alpha i\mu}^*(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha}^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}).$$

$u_{ni\mu}$ spielt die Rolle des quantisierten Feldes der Phononen.

Wegen $u_{ni\mu}^\dagger = u_{ni\mu}$ hat der Feldoperator $u_{ni\mu}$ reelle Eigenwerte.

10.4 Thermische Eigenschaften von Phononen

ALLGEMEINER ZUSTANDSDICHTE DER PHONONEN:

Die Zustandsdichte der Phononen kann durch das Integral

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_\alpha \int_{S_\omega} d^2q \frac{1}{|\nabla_{\vec{q}} \omega_\alpha(\vec{q})|}$$

gegeben werden, wobei S_ω die Oberfläche im \vec{q} -Raum mit Energie ω ist (>10.16). Die Singularitäten an Orten \vec{q} mit $\nabla_{\vec{q}} \omega_i(\vec{q}) = 0$ nennt man *van-Hove-Singularitäten*.

ZUSTANDSDICHTE VON AKUSTISCHEN PHONONEN:

Akustische Moden $\alpha = s$ haben bei $\vec{q} \rightarrow 0$ die

Dispersionsrelation

$$\omega_s(\vec{q}) \approx c_s(\vec{n}_{\vec{q}}) |\vec{q}|, \quad \vec{n}_{\vec{q}} := \vec{q}/|\vec{q}|.$$

Wenn wir annehmen, dass die Steigung/Schallgeschwindigkeit c_s nur unwesentlich von der Richtung $\vec{n}_{\vec{q}}$ abhängt ($c'_s \ll c_s$), folgt daraus für kleine \vec{q} bzw. kleine ω (>10.17)

$$g_{ak}(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2} \left\langle \frac{1}{c_s^3} \right\rangle =: \gamma\omega^2,$$

wobei $\langle 1/c_s^3 \rangle$ die Mittelung über alle akustischen Moden und Richtungen ist. Den Vorfaktor von ω^2 wollen wir mit γ abkürzen.

ENERGIE:

Die Besetzungszahl ist durch die Bose-Einstein-Verteilung

$$\langle a_{\vec{q}\alpha}^\dagger a_{\vec{q}\alpha} \rangle = n_{\vec{q}\alpha} = \frac{1}{e^{\beta\omega_{\vec{q}\alpha}} - 1} \Rightarrow E = E_0 + \sum_{\vec{q}\alpha} \omega_{\vec{q}\alpha} n_{\vec{q}\alpha}.$$

gegeben (da die Teilchenzahl nicht fest ist, gibt es kein chemisches Potential). Die Energie E folgt direkt aus dem Hamilton-Operator aus 10.3.

WÄRMEKAPAZITÄT - HOHE TEMPERATUREN:

Für $\beta\omega_{\vec{q}\alpha} \ll 1$ kann man $n_{\vec{q}\alpha}$ entwickeln und erhält (>10.18)

$$c_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3Mnk \left(1 - \frac{1}{12} \frac{\langle \omega_{\vec{q}\alpha}^2 \rangle}{(kT)^2} + \mathcal{O}(\beta^3 \omega_{\vec{q}\alpha}^3) \right).$$

$\langle \omega_{\vec{q}\alpha}^2 \rangle$ ist die Mittelung über Moden α und Impulse \vec{q} . Falls die kT deutlich geringer als die Energie $\omega_{\vec{q}\alpha}$ optischer Moden ist, kann man die optischen Moden vernachlässigen, indem man $\alpha \rightarrow s$ und $3M \rightarrow 3$ ersetzt. Die nullte Ordnung, $c_V = 3Nk$, ist dann das Dulong-Petit-Gesetz.

WÄRMEKAPAZITÄT - NIEDRIGE TEMPERATUREN:

Bei niedrigen Temperaturen tragen nur niedrige Anregungsfrequenzen $\omega_{\vec{q}\alpha}$ zur Energie/Wärmekapazität bei. Zum einen können daher die optischen Moden vernachlässigt werden, zum anderen ist für niedrige Temperaturen obige Zustandsdichte $g_{ak}(\omega) = \gamma\omega^2$, die ja nur für kleine \vec{q} bzw. ω gilt eine gute Näherung. Damit folgt für $\beta\omega_{\vec{q}s} \ll 1$ (>10.19)

$$c_V = \frac{4\pi^4}{15} \gamma k (kT)^3.$$

ÜBERBLICK: WOZU DEBYE-/EINSTEIN-MODELL:

Obige Grenzfälle konnten ganz allgemein aus den Resultaten von 10.2 und 10.3 bestimmt werden. Für die Wärmekapazität bei beliebigen Temperaturen sind weitere Näherungen/Annahmen/Modelle nötig. Für akustische Phononen liefert das Debye-Modell einen sinnvollen Verlauf der Wärmekapazität für alle Temperaturen, für optische das Einstein-Modell.

DEBYE-MODELL (AKUSTISCHE PHONONEN):

Im Debye-Modell wird postuliert, dass obige Näherung der Zustandsdichte statt nur für kleine \vec{q} im Prinzip für alle \vec{q} gelte. Dennoch muss nach wie vor $\sum_{\vec{q}s} 1 = 3N$ gelten. Dies wird erreicht, indem die Zustandsdichte oberhalb der Debye-Frequenz $\omega_D = (9N/\gamma)^{1/3}$ abgebrochen wird, also (>10.20)

$$g_D(\omega) = \gamma\omega^2 \theta(\omega_D - \omega).$$

Damit ergibt sich folgendes Temperaturverhalten der Wärmekapazität, das obige Grenzfälle richtig reproduziert (>10.21):

$$c_V = 9Nk \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 f(\Theta_D/T), \quad f(z) := \int_0^z dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2},$$

wobei $\Theta_D := \omega_D/k$.

EINSTEIN-MODELL (OPTISCHE PHONONEN):

Das einfachste Modell für optische Phononen ist $\omega_{\vec{q}\alpha} = \omega_E = \text{const}$. Damit ergibt sich folgendes Temperaturverhalten der Wärmekapazität (>10.22):

$$c_V = 3(M-1)Nk \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2},$$

wobei $\Theta_E := k/\omega_E$. Die obigen Grenzfälle werden unabhängig von der Wahl von ω_E richtig reproduziert.

10.5 Neutronenstreuung

KINETMATIK:

Mit Neutronenmasse M , finalen bzw. initialen Neutronenimpulsen \vec{p}_f, \vec{p}_i und Kristallenergien E_f, E_i schreiben wir den Energieübertrag als

$$\omega := -(E_f - E_i) = (p_f^2 - p_i^2)/2M.$$

Der Wirkungsquerschnitt lässt sich nun schreiben als (>10.23)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{M^2 V^2}{(2\pi)^3} \frac{p_f}{p_i} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} W(i, \vec{p}_i \rightarrow f, \vec{p}_f).$$

FERMIS GOLDENE REGEL:

Sei \vec{r}_n die Position des n -ten Ions im Kristall. Dann werde die Wechselwirkung zwischen Neutronen und den Ionen beschrieben durch ein Potential $U(\vec{r}) = U_0 \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$. Mit Fermis Goldener Regel kann man nun W berechnen und erhält schließlich mit Impulsübertrag $\vec{q} := \vec{p}_f - \vec{p}_i$ (>10.24)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{MU_0}{2\pi}\right)^2 \frac{p_f}{p_i} \sum_{nm} \int \frac{dt}{2\pi} \underbrace{\langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_n} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_m(t)} \rangle}_{=: S(\vec{q}, \omega)} e^{i\omega t},$$

wobei $\langle \dots \rangle$ das thermodynamische und quantenmechanische Mittel ist. $\vec{r}_m(t)$ ist ein Heisenberg-Operator, $\vec{r}_n \hat{=} \vec{r}_n(0)$ ist jedoch nicht zeitabhängig.

DER STRUKTURFAKTOR:

In obiger Gleichung wurde der Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$ definiert, den man auch als $S(\vec{q}, \omega) \sim \int dt \langle \rho_{-\vec{q}}(0) \rho_{\vec{q}}(t) \rangle e^{i\omega t}$ schreiben kann (>10.25). Er entspricht also einer Korrelationsfunktion der Ionendichte. Nimmt man eine einatomige Basis an (ein Ion pro Elementarzelle), vereinfacht sich der Strukturfaktor zu (>10.26)

$$S(\vec{q}, \omega) = N \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \int \frac{dt}{2\pi} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_0} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)} \rangle e^{i\omega t}.$$

BERECHNUNG DES ERWARTUNGSWERTES:

Um den Erwartungswert zu berechnen, nutzen wir aus, dass wir \vec{u}_n als Feldoperatoren verstehen können; d. h. wir verwenden die Entwicklung in Leiteroperatoren aus 10.3. Aus dem Wick-Theorem folgt für zwei Operatoren φ_1, φ_2 (>10.27)

$$\langle e^{i\varphi_1} e^{-i\varphi_2} \rangle = e^{-2W} e^{\langle \varphi_1 \varphi_2 \rangle}, \quad W := \langle \varphi_1 \varphi_1 + \varphi_2 \varphi_2 \rangle / 4.$$

In unserem Fall bedeutet dies

$$\langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_0} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)} \rangle = e^{-2W} e^{\langle (\vec{q}\cdot\vec{u}_0(0)) (\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)) \rangle}.$$

DER DEBYE-WALLER-FAKTOR:

e^{-2W} berechnet man als *Debye-Waller-Faktor*. Es gilt (>10.28)

$$W = \sum_{\vec{k}\alpha} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k})|^2}{4Nm\omega_{\vec{k}\alpha}} (2n_B(\omega_{\vec{k}\alpha}) + 1).$$

ENTWICKLUNG DES MISCHTERMS:

Die andere Exponentialfunktion entwickelt man. Entsprechend bekommt man $S = S_0 + S_1 + \dots$ mit (>10.29, >10.30)

$$S_0(\vec{q}, \omega) = N^2 \delta(\omega) e^{-2W} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\vec{q}\vec{k}\vec{k}'},$$

$$S_1(\vec{q}, \omega) = N e^{-2W} \sum_{\alpha} \frac{|\vec{q} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{q})|^2}{2m\omega_{\vec{q}\alpha}} \cdot \left((n_B(\omega_{\vec{q}\alpha}) + 1) \delta(\omega + \omega_{\vec{q}\alpha}) + n_B(\omega_{\vec{q}\alpha}) \delta(\omega - \omega_{\vec{q}\alpha}) \right).$$

INTERPRETATION:

S_0 entspricht Bragg-/Laue-Streuung: Sie ist elastisch ($\delta(\omega)$) und der Impulsübertrag muss einem reziproken Gittervektor entsprechen. Die Bewegung \vec{u}_n der Ionen sorgt allerdings dafür, dass die Gitterebenen verschmieren, daher ist die Streuung hier nun um e^{-2W} unterdrückt. Man beachte $\vec{u}_n = 0 \Rightarrow W = 0$ sowie $T = 0 \Rightarrow W = 0$, die Nulltemperaturbewegung trägt also bei. S_1 beschreibt die Wechselwirkung von Neutronen mit *einem* Phonon; also Emission $\omega < 0$ oder Absorption $\omega > 0$ eines Phonons. Absorption ist nur möglich, falls $n_B > 0$, (spontane) Emission ist wegen der „+ 1“ immer möglich; der n_B -Term bei der Erzeugung beschreibt die stimulierte Emission.

11 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

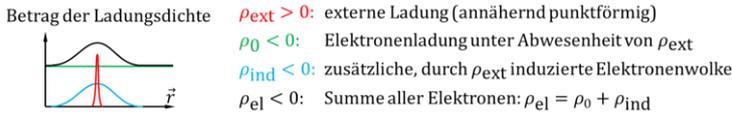
11.1 Thomas-Fermi-Abschirmung

ABSCHIRMENDE ELEKTRONENWOLKE:

Man betrachte ein (unendliches) Elektronengas, in das eine „externe“/zusätzliche Ladungsdichte ρ_{ext} platziert wird, die ein Potential φ_{ext} erzeugt. Falls $\rho_{\text{ext}} > 0$, sammelt sich um diese positive externe Ladung eine Elektronenwolke ρ_{ind} an, die deren Feld abschirmt. Wegen der Abschirmung, bringt man *effektiv* eine Ladungsdichte $\rho := \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}$ ein, mit einem totalen Potential φ , sodass

$$-\nabla^2 \varphi_{\text{ext}} = 4\pi \rho_{\text{ext}}, \quad -\nabla^2 \varphi = 4\pi \rho.$$

In Analogie zu Dielektrika gilt $\vec{D} = -\nabla \varphi_{\text{ext}}$ und $\vec{E} = -\nabla \varphi$.



DIELEKTRIZITÄT UND SUZEPTIBILITÄT:

In Analogie zu Dielektrika schreiben wir $\vec{D}(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r})$ mit Dielektrizität ϵ . Im Fourierraum folgt daraus (>11.1)

$$\varphi_{\text{ext}}(\vec{q}) = \epsilon(\vec{q}) \varphi(\vec{q}).$$

Ferner folgt aus der Definition der Suszeptibilität (>11.2)

$$\rho_{\text{ind}} =: \chi \varphi \Rightarrow \epsilon(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi(\vec{q}).$$

ELEKTROCHEMISCHES POTENTIAL:

Im Gleichgewicht ist das elektro-chemische Potential aus Abschnitt 7.5

$$\mu_{\text{ec}} := -e\varphi_{\text{ec}} = \mu - e\varphi$$

konstant - für ein $\varphi \equiv \varphi(\vec{r})$ ist also auch $\mu \equiv \mu(\vec{r})$ (>11.3). Die Teilchendichte am Ort \vec{r} ist somit gegeben durch

$$n(\mu(\vec{r})) = n(\mu_{\text{ec}} + e\varphi(\vec{r})), \quad n(\mu) = \frac{1}{V} \int_0^\infty d\mathcal{E} \frac{g(\mathcal{E})}{e^{\beta(\mathcal{E}-\mu)} + 1}.$$

Die Elektronen, die wegen des externen Potentials *zusätzlich* an einem Ort \vec{r} vorhanden sind, sind gegeben durch jene, die mit externem Potential da sind ($n(\mu)$), abzüglich jener, die auch so da wären ($n(\mu_{\text{ec}})$). Sie erzeugen ρ_{ind} (>11.4)

$$\rho_{\text{ind}} = -e(n(\mu) - n(\mu_{\text{ec}})) \approx -e^2 g(\mu_{\text{ec}}) \varphi/V,$$

wobei die letzte Umformung für kleine φ und T gilt. Für negative externe Ladungen ($-e\varphi > 0$) nimmt μ und damit $n(\mu)$ ab. Somit ist in diesem Fall $\rho_{\text{ind}} > 0$.

THOMAS-FERMI-WELLENLÄNGE:

Ein Vergleich der beiden obigen Formeln für ρ_{ind} liefert

$$\chi = -e^2 g(\mu_{\text{ec}})/V \Rightarrow \epsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{4\pi e^2 g(\mu_{\text{ec}})}{q^2 V} =: 1 + \frac{k_{\text{TF}}^2}{q^2},$$

wobei die Thomas-Fermi-Wellenlänge wie folgt definiert wurde:

$$k_{\text{TF}}^2 = 4\pi e^2 g(\mu_{\text{ec}})/V.$$

EXTERNE PUNKTLADUNG:

Man betrachte eine externe Punktladung Q , die das Potential

$$\varphi_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{Q}{r} \Rightarrow \varphi_{\text{ext}}(\vec{q}) = \frac{4\pi Q}{q^2}$$

erzeugt (ohne Beweis der Fouriertransformation). Für das Potential folgt somit

$$\varphi(\vec{q}) = \frac{\varphi_{\text{ext}}(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q})} = \frac{4\pi Q}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \Rightarrow \varphi(\vec{r}) = \frac{Q}{r} e^{-k_{\text{TF}} r},$$

Das Potential der externen Ladung wird also um einen Faktor $e^{-k_{\text{TF}} r}$ abgeschwächt: Häufig ist k_{TF} sehr groß, sodass φ praktisch eine Delta-Funktion bei der Position von Q ist und Elektronen in einiger Entfernung von Q nichts mitkriegen. Wir werden also gerne folgende Näherung verwenden:

$$\varphi(\vec{q}) \approx \frac{4\pi Q}{k_{\text{TF}}^2} \Rightarrow \varphi(\vec{r}) = \frac{4\pi Q}{k_{\text{TF}}^2} \delta(\vec{r}).$$

11.2 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

KORREKTUR DES HAMILTON-OPERATORS:

Wir betrachten einen Kristall mit einem Atom pro Elementarzelle und einem entsprechenden Potential

$$U(\vec{r}) = \sum_n V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n - \vec{u}_n) \approx V_{\text{ion}}^{(0)} - \sum_n \vec{u}_n \cdot \nabla V_{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n),$$

wobei \vec{u}_n kleine Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage sind. Die $\mathcal{O}(\vec{u}_n)$ -Korrektur des Potentials δV_{ion} liefert folgende Korrektur zum Hamilton-Operator (>11.5):

$$\delta H = \sum_\sigma \langle \psi_\sigma | \delta V_{\text{ion}} | \psi_\sigma \rangle.$$

Da die Phononen in δV_{ion} den Spin nicht beeinflussen, können wir annehmen, dass beide ψ_σ im Matrixelement denselben Spin σ haben.

ZWEITE QUANTISIERUNG:

Wir verstehen ψ_σ als elektronische Feldoperatoren und setzen die aus 8.1 bzw. (>9.1) bekannten Entwicklungen

$$\psi_\sigma(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \phi_{\vec{p}}(\vec{r}) c_{\vec{p}\sigma}$$

ein. $\phi_{\vec{p}}(\vec{r})$ sind hier die 1-Teilchen-Zustände, im Falle eines Gitters also $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} u_{\vec{p}}(\vec{r})$ (siehe 1.7). Außerdem setzen wir die aus 10.3 bekannte Entwicklung in Leiteroperatoren von \vec{u}_n ein. Wir erhalten dann den *Fröhlich-Hamilton-Operator* (>11.6)

$$\delta H = \sum_{\vec{\sigma}\vec{\alpha}} M_{\vec{p}_1\vec{p}_2\vec{q}\alpha} (a_{\vec{q}\alpha} + a_{-\vec{q}\alpha}^\dagger) c_{\vec{p}_2\sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1\sigma},$$

wobei $a_{\vec{q}\alpha}$ die Leiteroperatoren der Phononen aus \vec{u}_n sind.

$M_{\vec{p}_1\vec{p}_2\vec{q}\alpha}$ enthält unter anderem $\langle \phi_{\vec{p}_2} | \nabla V_{\text{ion}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle$.

FOURIERTRANSFORMATION DES POTENTIALS:

Wir drücken das Potential durch seine Fouriertransformierte aus und erhalten (>11.7)

$$M_{\vec{p}_1\vec{p}_2\vec{q}\alpha} = -iN \sum_{\vec{G}} \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q} + \vec{G})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}\alpha}}} \vec{e}_\alpha(\vec{q}) \cdot (\vec{q} + \vec{G}) \langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i(\vec{q}+\vec{G})\cdot\vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle.$$

MATRIXELEMENT - UMKLAPP-PROZESSE:

Das Matrixelement kann auf die Form

$$\langle \phi_{\vec{p}_2} | e^{i(\vec{q}+\vec{G})\cdot\vec{r}} | \phi_{\vec{p}_1} \rangle = \frac{N}{V} \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_1 + \vec{q} + \vec{K}(\vec{p}_1, \vec{q})} \int_{\text{EZ}} d^3r u_{\vec{p}_2}^\dagger(\vec{r}) u_{\vec{p}_1}(\vec{r}) e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{G})\cdot\vec{r}}$$

gebracht werden (>11.8). Dabei beschreibt das Kroncker-Delta Impulserhaltung bis auf einen reziproken Gittervektor $\vec{K}(\vec{p}_1, \vec{q})$. Prozesse mit $\vec{K} \neq 0$ heißen *Umklapp-Prozesse* (siehe (>11.8)).

11.3 Elektron-Elektron-Wechselwirkungen via Phononen

VEREINFACHENDE ANNAHMEN:

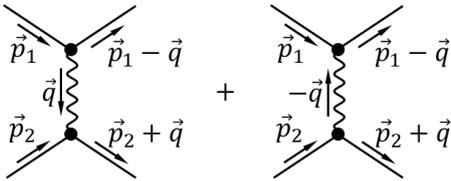
Wir wollen den Hamilton-Operator δH aus 11.2 nun etwas vereinfachen. Dazu nutzen wir zunächst die aus 11.1 bekannte auf die Abschirmung zurückzuführende Näherung für das ionische Potential $V_{\text{ion}}(\vec{q}) \approx 4\pi Qk_{\text{TF}}^{-2}$. Wir vernachlässigen \vec{G} sowie die Umklapp-Prozesse $\vec{K} \neq 0$. Außerdem betrachte wir nur die longitudinale Mode mit $\vec{e}_\alpha(\vec{q}) \parallel \vec{q}$, sodass der α -Index entfällt. Somit gilt für den Fröhlich-Hamilton-Operator (>11.9)

$$\delta H = \sum_{\vec{q}, \vec{p}} M_{\vec{q}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma}, \quad M_{\vec{q}} = -iN \frac{V_{\text{ion}}(\vec{q})}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}}.$$

Die Leiteroperatoren drücken aus, dass sein Elektron mit Impuls \vec{p} entweder ein Phonon mit Impuls \vec{q} absorbiert/vernichtet oder ein Phonon mit Impuls $-\vec{q}$ emittiert/erzeugt.

ELEKTRON-ELEKTRON-STREUUNG:

In zweiter Ordnung Störungstheorie $\sim |\delta H|^2$ kommen zwei Elektron-Phonon-Wechselwirkungen vor. Je nachdem, ob das erste oder zweite Elektron das Phonon aussendet oder absorbiert erhalten wir die Situationen



Sei E_0 die Energie zu Beginn, E_1 im Zwischenzustand nach der Emission aber vor der Absorption des Phonons und E_2 am Ende. Dann gilt (man beachte $\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}}$)

$$E_0 = \varepsilon_{\vec{p}_1} + \varepsilon_{\vec{p}_2},$$

$$E_1 = \varepsilon_{\vec{p}_1 - \vec{q}} + \varepsilon_{\vec{p}_2} + \hbar\omega_{\vec{q}} \quad \text{bzw.} \quad E_1' = \varepsilon_{\vec{p}_1} + \varepsilon_{\vec{p}_2 + \vec{q}} + \omega_{-\vec{q}},$$

$$E_2 = \varepsilon_{\vec{p}_1 - \vec{q}} + \varepsilon_{\vec{p}_2 + \vec{q}} = E_0.$$

Nach zweiter Ordnung Störungstheorie ist die Korrektur gegeben durch (>11.10)

$$\frac{|M_{\vec{q}}|^2}{E_0 - E_1} + \frac{|M_{\vec{q}}|^2}{E_0 - E_1'} = \frac{2\omega_{\vec{q}}|M_{\vec{q}}|^2}{(\varepsilon_{\vec{p}_1} - \varepsilon_{\vec{p}_1 - \vec{q}})^2 - \omega_{\vec{q}}^2}.$$

Dies ist also die Amplitude von Elektron-Elektron-Streuung via Phononen.

EFFEKTIVER HAMILTON-OPERATOR:

Effektiv, ohne die Details der Wechselwirkungen mit Phononen zu betrachten, kann man den Hamilton-Operator für die Phononen-induzierte Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$\vec{p}_1, \vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_1 + \vec{q}, \vec{p}_2 - \vec{q}$$

schreiben als

$$H_{\text{ee}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \sigma_1, \sigma_2, \vec{q}} \Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}} c_{\vec{p}_1 + \vec{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\vec{p}_2 - \vec{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma_2} c_{\vec{p}_1, \sigma_1}.$$

mit der Amplitude

$$\Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}} := \frac{2\omega_{\vec{q}}|M_{\vec{q}}|^2}{(\varepsilon_{\vec{p}_1} - \varepsilon_{\vec{p}_1 + \vec{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\vec{q}}^2}.$$

Der Faktor 1/2 ist ein Symmetrie-Faktor für die beiden identischen Elektronen im finalen Zustand.

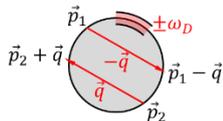
11.4 Cooper-Problem

GRUNDSÄTZLICHE ANNAHMEN:

Die Amplitude für die Wechselwirkung zweier Elektronen $\Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}}$ aus 11.3 ist negativ (also anziehend), falls

$$|\varepsilon_{\vec{p}_1} - \varepsilon_{\vec{p}_1 - \vec{q}}| < \omega_{\vec{q}}.$$

Stöße mit dieser Bedingung finden nur nahe der Fermi-Oberfläche statt, in einem Band $E_F \pm \omega_D$, wobei ω_D die Debye-Frequenz ist. Da aus $g_{\text{ph}}(\omega_{\vec{q}}) \sim \omega_{\vec{q}}^2$ folgt, dass \vec{q} typischerweise groß ist, wechseln die Impulse meist grob auf die andere Seite des Fermi-Sees (>11.11):



NÄHERUNG DER AMPLITUDE:

Wir wollen die Amplitude $\Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}}$ aus dem Hamilton-Operator H_{ee} aus 11.3 vereinfachen zu

$$\Lambda_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}} = \begin{cases} -\Lambda, & \text{falls } |\varepsilon_{\vec{p}_{1,2}} - E_F| \ll \omega_D \wedge |\varepsilon_{\vec{p}_{1,2} \pm \vec{q}} - E_F| \ll \omega_D \\ & \wedge \text{Energieerhaltung,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Entweder also Anfangs- und Endzustände liegen im Band $\pm \omega_D$ und die Energie ist erhalten – dann bekommen wir eine konstante Anziehung – oder nicht und dann liefert die Phononen-induzierte Wechselwirkung keinen Beitrag.

Unser Hamilton-Operator $H = H_0 + H_{\text{ee}}$ soll dann nur diese Wechselwirkung berücksichtigen, sowie die einfache kinetische Energie der Elektronen

$$H_0 = \sum_{\vec{p}, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma}.$$

DIE ZUSTÄNDE:

Wir wollen einen vollen Fermi-See sowie zwei weitere Elektronen außerhalb des Sees betrachten. Die Elektronen innerhalb des Sees bilden den Zustand

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\vec{p}, \sigma \text{ mit } |\vec{p}| \leq p_F} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger |0\rangle.$$

Wir fügen die zwei äußeren Elektronen mit einer Wellenfunktion $\psi(\vec{p}_1, \sigma_1, \vec{p}_2, \sigma_2)$ hinzu und erhalten den Gesamtzustand

$$|\phi\rangle = \sum_{\vec{p}_1, \sigma_1, \vec{p}_2, \sigma_2 \text{ mit } |\vec{p}_1, \vec{p}_2 > p_F} \psi(\vec{p}_1, \sigma_1, \vec{p}_2, \sigma_2) c_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle.$$

Während bei $|\phi_0\rangle$ jeder Impuls $< p_F$ genau einmal besetzt ist, brauchen wir hier eine Wellenfunktion ψ zur Gewichtung, welche Impulse $> p_F$ die beiden äußeren Elektronen annehmen. Damit der Gesamtimpuls des Systems verschwindet, nehmen zudem noch $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2 =: \vec{p}$ an:

$$|\phi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \vec{p} \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}, \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}, \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle,$$

wobei wir die Impulse nach obiger Überlegung auf das Band \mathcal{B} beschränken, womit wir folgende Bedingung meinen:

$$\mathcal{B}: E_F < \varepsilon_{\vec{p}} < E_F + \omega_D$$

($\varepsilon_{\vec{p}} < E_F$ ist wegen des vollen Fermi-Sees ausgeschlossen).

LÖSEN DER SCHRÖDINGER-GLEICHUNG:

Wir wollen die Schrödinger-Gleichung

$$(H_0 + H_{\text{ee}})|\phi\rangle = (E_{\text{FS}} + E)|\phi\rangle$$

lösen, wobei E_{FS} die Energie des vollen Fermi-Sees ist; wir suchen also E . Wenn wir die Formeln für $H_0, H_{\text{ee}}, |\phi\rangle$ einsetzen, erhalten wir (>11.12), (>11.13)

$$H_0|\phi\rangle = E_{\text{FS}}|\phi\rangle + \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \vec{p} \in \mathcal{B}} 2\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) \varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}, \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}, \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle,$$

$$H_{\text{ee}}|\phi\rangle = -\Lambda \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \vec{p} \in \mathcal{B}, \vec{p}' \in \mathcal{B}} \psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) c_{\vec{p}', \sigma_1}^\dagger c_{-\vec{p}', \sigma_2}^\dagger |\phi_0\rangle.$$

Wenn wir dies nun in die Schrödinger-Gleichung einsetzen und die Wellenfunktion mit einem Impuls- und einem Spin-Teil

$$\psi(\vec{p}, \sigma_1, \sigma_2) = \alpha(\vec{p}) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$$

ansetzen, finden wir schließlich (>11.14)

$$\alpha(\vec{p}) = \frac{\Lambda}{2\varepsilon_{\vec{p}} - E} \sum_{\vec{p}'} \alpha(\vec{p}').$$

Selbstkonsistenz dieser Gleichung liefert (>11.15)

$$E = 2E_F - \frac{2\omega_D}{e^{2/\Lambda g(E_F)} - 1} \approx 2E_F - 2 \underbrace{\omega_D e^{-2/\Lambda g(E_F)}}_{=:\Delta}.$$

Obwohl also die Energien der einzelnen Elektronen $> E_F$ sind, ist $E < 2E_F$. Es gibt also einen gebundenen Zustand mit Bindungsenergie Δ .

SPIN-SINGULETT-ZUSTAND:

Aus $\alpha(\vec{p}) = \alpha(-\vec{p})$ folgt $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1)$, also ein Singulett-Zustand $\chi = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ (>11.16).

12 BCS-Theorie

12.1 BCS-Theorie

DER HAMILTON-OPERATOR:

Die BCS-Theorie wird im Großkanonischen Ensemble formuliert, mit Zustandssumme $Z_G = \sum_{n,N} e^{-\beta(E_{n,N} - \mu N)}$ und Hamilton-Operator $H_G = H - \mu N$. Wir verwenden daher (>12.1)

$$H_G = \sum_{\vec{p}\sigma} \xi_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in B} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow}, \quad \xi_{\vec{p}} := \mathcal{E}_{\vec{p}} - \mu.$$

DER BCS-ZUSTAND:

Beim Cooper-Problem in 11.4 haben wir ein einziges Elektronen-Paar betrachtet ($|\phi\rangle$ enthielt zwei Elektronen über den vollen Fermi-See hinaus). Dies wollen wir nun zu beliebig vielen Elektronen - auch unter Berücksichtigung der Elektronen im Fermi-See - verallgemeinern. Man beginnt mit dem Zustand

$$|\text{BCS}\rangle := \prod_{\vec{p}} (u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger) |0\rangle.$$

Das bemerkenswerte an diesem Zustand, ist, dass die Teilchenzahl eine stochastische Größe ist (siehe auch 12.2, *Matrixelemente*): Die „Amplitude“ für ein Teilchen mit Impuls \vec{p} ist $v_{\vec{p}}$, jene für null Teilchen $u_{\vec{p}}$.

NORMIERUNG:

Gesucht sind nun $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$. Fordern wir Normierung folgt (>12.2)

$$\langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle \stackrel{!}{=} 1 \implies u_{\vec{p}}^2 + v_{\vec{p}}^2 \stackrel{!}{=} 1 \implies \begin{aligned} u_{\vec{p}} &= \cos \phi_{\vec{p}} \\ v_{\vec{p}} &= \sin \phi_{\vec{p}} \end{aligned}$$

Die Bedingung legt die oben aufgeführte Parametrisierung durch $\phi_{\vec{p}}$ nahe.

ENERGIEERWARTUNGSWERT:

Aus den Matrixelementen

$$\langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle = v_{\vec{p}}^2, \quad (>12.3)$$

$$\langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}'\uparrow} | \text{BCS} \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}'} v_{\vec{p}} v_{\vec{p}'}, \quad (>12.4)$$

folgt (>12.5)

$$E_{\text{BCS}} := \langle \text{BCS} | H_G | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^2 - \Lambda \sum_{\vec{p}\vec{p}' \in B} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} u_{\vec{p}'} v_{\vec{p}'}$$

VARIATIONSPRINZIP:

Gemäß dem Variationsprinzip wollen wir nun E_{BCS} bzgl. unseres Parameters $\phi_{\vec{p}}$ minimieren. Wir finden bei $T = 0$ (>12.6)

$$\frac{\partial E_{\text{BCS}}}{\partial \phi_{\vec{p}}} \stackrel{!}{=} 0 \iff \tan 2\phi_{\vec{p}} = \frac{\Delta}{\xi_{\vec{p}}}, \quad \Delta := \Lambda \sum_{\vec{p} \in B} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}.$$

Da $\mathcal{E}_{\vec{p}} = \mathcal{E}_{-\vec{p}}$ folgt daraus auch $u_{\vec{p}} = u_{-\vec{p}}, v_{\vec{p}} = v_{-\vec{p}}$. Die expliziten Lösungen für $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ sind gegeben durch

$$u_{\vec{p}} = \sqrt{\frac{E_{\vec{p}} + \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}}, \quad v_{\vec{p}} = \sqrt{\frac{E_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}}, \quad E_{\vec{p}} := \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}.$$

Wir können nun Δ aus der Selbstkonsistenz zu (>12.7)

$$\Delta = 2\omega_D e^{-1/\Lambda g(E_F)}$$

bestimmen.

VERGLEICH MIT FERMI-FLÜSSIGKEIT-ZUSTAND:

Wir müssen nun überprüfen, ob der $|\text{BCS}\rangle$ thermodynamisch dem „normalen“ Zustand eines vollen Fermi-Sees

$$|\text{Norm}\rangle := \prod_{\vec{p} \text{ mit } \vec{p} \leq p_F} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger |0\rangle = \left(|\text{BCS}\rangle \text{ mit } \begin{aligned} u_{\vec{p}} &= \theta(\mathcal{E}_{\vec{p}} - E_F) \\ v_{\vec{p}} &= \theta(E_F - \mathcal{E}_{\vec{p}}) \end{aligned} \right).$$

ohne den Wechselwirkungen 11.4 aus überlegen ist. Mit $E_0 := \langle \text{Norm} | H_G | \text{Norm} \rangle$ finden wir (>12.8)

$$\Delta E = E_{\text{BCS}} - E_0 = -\frac{1}{2} g(E_F) \Delta^2 < 0 \iff E_{\text{BCS}} < E_0.$$

Somit ist der Zustand $|\text{BCS}\rangle$ relevant, denn er wird vom System eingenommen. Um das Prinzip zu zeigen, haben wir hier bei $T = 0$ gerechnet; in der Realität gibt es eine kritische Temperatur, unterhalb derer $\Delta E < 0$ und oberhalb $\Delta E > 0$ ist.

12.2 Anregungen: Neue Leiteroperatoren

DEFINITION NEUER LEITEROPERATOREN:

Wir definieren

$$\begin{aligned} \alpha_{\vec{p}\sigma} &:= u_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma} - \tilde{\sigma} v_{\vec{p}} c_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger \\ \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger &= u_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger - \tilde{\sigma} v_{\vec{p}} c_{-\vec{p},-\sigma} \end{aligned} \quad \text{mit } \tilde{\sigma} := \begin{cases} 1 & \text{für } \sigma = \uparrow, \\ -1 & \text{für } \sigma = \downarrow. \end{cases}$$

Da diese Operatoren die Antikommutator-Algebra

$$\{\alpha_{\vec{p}\sigma}, \alpha_{\vec{p}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{\alpha_{\vec{p}\sigma}, \alpha_{\vec{p}'\sigma'}\} = \{\alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger, \alpha_{\vec{p}'\sigma'}^\dagger\} = 0$$

erfüllen (>12.9), sind sie „gute“ Fermionen-Leiteroperatoren.

Invertieren liefert (>12.10)

$$c_{\vec{p}\sigma} = u_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\sigma} + \tilde{\sigma} v_{\vec{p}} \alpha_{-\vec{p},-\sigma}^\dagger, \quad c_{\vec{p}\sigma}^\dagger = u_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger + \tilde{\sigma} v_{\vec{p}} \alpha_{-\vec{p},-\sigma}.$$

ANREGUNGEN DES NORMALEN ZUSTANDS:

Für den $|\text{Norm}\rangle$ -Zustand aus 12.1 verwenden wir $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ mit den entsprechenden $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ wie wir sie in 12.1 für den $|\text{Norm}\rangle$ -Zustand festgelegt haben. Für $|\vec{p}| > p_F$ ($u_{\vec{p}} = 1, v_{\vec{p}} = 0$) wird ein

Teilchen mit $\xi_{\vec{p}} > 0$ vernichtet, für $|\vec{p}| < p_F$ ($u_{\vec{p}} = 0, v_{\vec{p}} = 1$) wird ein Teilchen mit $\xi_{\vec{p}} < 0$ erzeugt - in beiden Fällen

vernichtet $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ den Energiebetrag $|\xi_{\vec{p}}|$. Entsprechend erzeugt $\alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ den Energiebetrag $|\xi_{\vec{p}}|$ durch Erzeugung eines $\xi_{\vec{p}} > 0$ -

Teilchens oder Vernichtung eines $\xi_{\vec{p}} < 0$ -Teilchens. Bezüglich $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ ist $|\text{Norm}\rangle$ ein Vakuum in dem Sinne, dass (>12.11)

$$\alpha_{\vec{p}\sigma} |\text{Norm}\rangle = 0.$$

ANREGUNGEN DES BCS-ZUSTANDS:

Wir verwenden nun dieselbe Formel für $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ mit den entsprechenden $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ des $|\text{BCS}\rangle$ -Zustands. Bezüglich dieses $\alpha_{\vec{p}\sigma}$ ist der $|\text{BCS}\rangle$ -Zustand ein Vakuum in dem Sinne, dass (>12.12)

$$\alpha_{\vec{p}\sigma} |\text{BCS}\rangle = 0.$$

BCS-MATRIXELEMENTE:

Wie bereits in 12.1 erläutert, ist die Teilchenzahl des $|\text{BCS}\rangle$ -Zustands eine stochastische Größe. Dies drückt sich etwa dadurch aus, dass

$$\langle \text{BCS} | c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger | \text{BCS} \rangle = \langle \text{BCS} | c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} | \text{BCS} \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \neq 0$$

nicht verschwinden. Dies erkennt man sofort mit (>12.13)

$$c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger = u_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}),$$

$$c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow} = u_{\vec{p}}^2 \alpha_{-\vec{p}\downarrow} \alpha_{\vec{p}\uparrow} - v_{\vec{p}}^2 \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger + u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}),$$

denn $\alpha_{\vec{p}\sigma} |\text{BCS}\rangle = \langle \text{BCS} | \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger = 0$.

12.3 Mean-Field-Theorie

NÄHERUNGSDIEE DER MEAN-FIELD-THEORIE:

Wir wollen nun $A := c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger$ und $B := c_{-\vec{p}\downarrow} c_{\vec{p}\uparrow}$ abkürzen, sodass in H_G aus 12.1 in der zweiten Summe AB auftaucht. Es gilt

$$AB = \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle (B - \langle B \rangle) + \langle B \rangle (A - \langle A \rangle) + (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \approx \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle B \rangle A - \langle A \rangle \langle B \rangle.$$

Dabei wurde angenommen, dass das Produkt aus zwei Abweichungen vom Mittelwert $(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) = \text{klein}^2$ ist und vernachlässigt werden kann (dies ist bei Supraleitern typischerweise eine sehr gute Näherung). Man kann nun im kompletten Hamilton-Operator die c 's durch die α 's ausdrücken ($\langle A \rangle = \langle B \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}$) und wird am Ende ein einfaches Ergebnis erhalten. Dieses Ergebnis kann man auch aber auch systematisch durch Diagonalisierung bekommen.

DIAGONALISIERUNG DES HAMILTON-OPERATORS:

Der Hamilton-Operator kann in der Mean-Field-Näherung als

$$H_G^{\text{MF}} = \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}} (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{p}\downarrow}) \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{\Delta^2}{\Lambda}$$

geschrieben werden (>12.14). Diagonalisieren liefert (>12.15)

$$H_G^{\text{MF}} = \sum_{\sigma\vec{p}} E_{\vec{p}} \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger \alpha_{\vec{p}\sigma} + \sum_{\vec{p}} (\xi_{\vec{p}} - E_{\vec{p}}) + \frac{\Delta^2}{\Lambda}, \quad E_{\vec{p}} := \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}.$$

Nur die erste Summe aus H_G^{MF} ist operatorwertig, die beiden hinteren Terme entsprechend der konstanten (negativen) Grundzustandsenergie. Dass der Hamilton-Operator, ausgedrückt durch $\alpha_{\vec{p}\sigma}$, diese Form annimmt, ist der eigentliche Grund dafür, davon zu sprechen, dass $\alpha_{\vec{p}\sigma}, \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ fermionische Quasiteilchen vernichten bzw. erzeugen.

ENERGIESPEKTRUM:

In 12.2 haben wir diskutiert, dass der neue Erzeugungsoperator beim |Norm>-Zustand Energiequanten $|\xi_{\vec{p}}|$ anregt.

Gemäß obigen Hamilton-Operator, regt er beim |BCS>-Zustand jedoch das Spektrum $E_{\vec{p}}$ an (für die Relation $\xi_{\vec{p}} \sim |\vec{p}|$ nahe der Fermi-Oberfläche siehe 9.3).

ALTERNATIVE DARSTELLUNG MIT 4 x 4-MATRIX:

Alternativ zur 2 x 2-Matrix kann man den Hamilton-Operator auch schreiben als (>12.16)

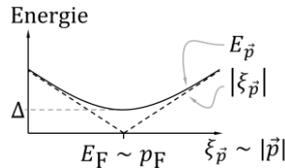
$$H_G^{\text{MF}} = \frac{\Delta^2}{\Lambda} + \sum_{\vec{p}} \xi_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger \\ c_{-\vec{p}\downarrow} \\ -c_{-\vec{p}\uparrow} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \xi_{\vec{p}} & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & \xi_{\vec{p}} & 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 & -\xi_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & -\xi_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{p}\uparrow} \\ c_{\vec{p}\downarrow} \\ c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \\ -c_{-\vec{p}\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \int d^3r \bar{\Psi} h_{\text{BdG}} \Psi + \text{const.}$$

wobei h_{BdG} der Bogolyubov-de Gennes-Hamilton-Operator ist:

$$\Psi = (\psi_\uparrow, \psi_\downarrow, \psi_\downarrow^\dagger, -\psi_\uparrow^\dagger)^T, \quad \psi_\sigma(\vec{r}) := V^{-1/2} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} c_{\vec{p}\sigma},$$

$$h_{\text{BdG}} = \xi_{\vec{p}} (\sigma_3 \otimes \sigma_0) - \Delta (\sigma_1 \otimes \sigma_0).$$

σ_i sind die Pauli-Matrizen.



12.4 Endliche Temperaturen

WAS SICH ÄNDERT:

Bisher haben wir alles bei $T = 0$ berechnet. Allerdings existiert Supraleitung bis zu einer kritischen Temperatur $T_c > 0$. Als erstes müssen wir folgenden |BCS>-Erwartungswert, den wir am Ende von 12.2 gefunden haben, korrigieren. Bei $T > 0$ verschwindet der Erwartungswert des Teilchenzahloperators nicht mehr, sondern ergibt die Fermi-Dirac-Verteilung n :

$$T = 0: \quad \langle \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} \rangle, \\ T > 0: \quad \langle \alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} \rangle = n(E_{\vec{p}}).$$

Mit $E_{\vec{p}} = E_{-\vec{p}}$ und den Formeln aus 12.2 folgt somit direkt

$$T = 0: \quad \langle c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}, \\ T > 0: \quad \langle c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \rangle = u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - 2n(E_{\vec{p}})).$$

Wir passen auch die Definition von Δ aus 12.1 an:

$$T = 0: \quad \Delta := \Lambda \sum_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} = \Lambda \sum_{\vec{p}} \langle c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \rangle, \\ T > 0: \quad \Delta := \Lambda \sum_{\vec{p}} \langle c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \rangle = \Lambda \sum_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} (1 - 2n(E_{\vec{p}})).$$

n ist temperaturabhängig und somit auch Δ - und somit nach unseren Formeln aus 12.1 auch $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$, den sie hängen von Δ ab. Dabei ist das chemische Potential μ in n null, da $E_{\vec{p}}$ bereits per Definition die Energiedifferenz zum chemischen Potential ist.

DIE KRITISCHE TEMPERATUR:

Wenn wir $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ (als Funktionen von Δ) in obige Gleichung für Δ bei $T > 0$ einsetzen und auf beiden Seiten durch Δ teilen erhalten wir die Selbstkonsistenzgleichung (>12.17)

$$1 = \Lambda \sum_{\vec{p} \in B} \frac{\tanh \beta E_{\vec{p}}/2}{2E_{\vec{p}}}, \quad E_{\vec{p}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{p}}^2}.$$

Hierdurch ist $\Delta(T)$ implizit definiert. Bei der kritischen Temperatur $T = T_c$ erwarten wir $\Delta = 0$ und erhalten (>12.17)

$$1 = \Lambda g(E_F) \int_0^{\beta c \omega_D/2} dx \frac{\tanh x}{x},$$

woraus sich T_c bestimmen lässt. Eine grobe Näherung liefert

$$2kT_c \approx \omega_D e^{-1/\Lambda g(E_F)}.$$

Erstaunlicherweise gilt also $4kT_c \approx \Delta(T = 0)$ (siehe 12.1).

Wertet man obiges Integral numerisch „exakt“ aus, erhält man

$$kT_c = 1,14 \omega_D e^{-1/\Lambda g(E_F)} = 0,59 \Delta(T = 0).$$

Für $T \approx T_c$ findet man numerisch folgendes Verhalten:

$$\Delta(T \approx T_c) \approx 3,06 kT_c \sqrt{1 - T/T_c}.$$

Diese numerischen Werte stimmen bei einigen Supraleitungen sehr gut mit dem Experiment überein.

WÄRMEKAPAZITÄT:

Aus der Entropie

$$S = -2k \sum_{\vec{p}} (n \ln n + (1 - n) \ln(1 - n))$$

ergibt sich folgende Wärmekapazität bei T_c (>12.18):

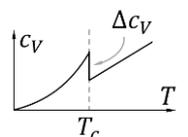
$$c_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{2\pi^2}{3} g_F k^2 T_c + \begin{cases} (3,06)^2 g_F k^2 T_c, & T \nearrow T_c \\ 0, & T \searrow T_c \end{cases}$$

Bei T_c macht c_V also einen Sprung der Höhe $\Delta c_V = (3,06)^2 g_F k^2 T_c$ und das Verhältnis

$$\frac{\Delta c_V}{c_V(T \searrow T_c)} = \frac{(3,06)^2}{2\pi^2/3} \approx 1,42$$

ist ein universeller numerischer Wert. Der typische Verlauf ist rechts abgebildet mit

$$c_V(T \rightarrow 0) \sim e^{-\beta \Delta}.$$



ISOTOPEN-EFFEKT:

Es gilt $T_c \sim \Delta(T = 0) \sim \omega_D \sim v_s \sim M^{-1/2}$ mit Ionenmasse M und Schallgeschwindigkeit v_s . Die Relation $T_c \sim M^{-1/2}$ konnte experimentell bestätigt werden; dies war ein wichtiger Beweis dafür, dass Supraleitung etwas mit Phononen zu tun hat. Den Isotopen-Effekt gibt es auch beim Magnetfeld, $H_c \sim M^{-1/2}$, siehe 13.3.

13 Elektrodynamik von Supraleitern

13.1 London-Gleichungen – Makroskopische Motivation

MAKROSKOPISCHE MOTIVATION:

Experimentell ist ein Supraleiter ein widerstandsloser Leiter; das bedeutet, dass die Bewegungsgleichung

$$m\dot{\vec{v}} = q\vec{E}$$

keinen Widerstands-/Reibungsterm enthalten. Mit dem Strom $\vec{j} = nq\vec{v}$ und einer Maxwell-Gleichung erhält man direkt (>13.1)

$$\frac{d}{dt}(\gamma\nabla \times \vec{j} + \vec{B}) = 0, \quad \gamma := \frac{m}{nq^2}.$$

Im Supraleiter stellt man allerdings $\vec{B} = \vec{j} = 0$ fest (Meißner-Ochsenfeld-Effekt). Daher haben die London-Zwillinge

$$\gamma\nabla \times \vec{j} + \vec{B} = 0$$

postuliert. Diese Gleichung lässt sich nun zugleich in den Formen

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{4\pi}{\gamma} \vec{B}, \quad \vec{j} = -\gamma^{-1} \vec{A}$$

schreiben, wobei letzter nur in der Coulomb-Eichung $\nabla \times \vec{A} = 0$ gilt (>13.2).

LONDON-EINDRINGTIEFE:

Aus ersterer folgt, dass ein äußeres Magnetfeld im inneren eines Supraleiters exponentiell mit $\sim e^{-x/\lambda_L}$ und der London-Eindringtiefe

$$\lambda_L = \sqrt{\gamma/4\pi}$$

abfällt (>13.3).

13.2 London-Gleichungen – Mikroskopische Herleitung

STÖRUNGSTHEORIE:

Wir wollen nun prüfen, ob unsere mikroskopische BCS-Theorie diese makroskopischen/experimentellen Zusammenhänge reproduzieren kann. Ohne Berücksichtigung des Spins können wir den Hamilton-Operator $H = (\vec{p} - q\vec{A})^2/2m$ in der zweiten Quantisierung schreiben als

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}))^2 \psi_{\sigma}(\vec{r}),$$

wobei $\vec{p} = -i\nabla$ der kanonische Impuls ist. Wir nehmen an, dass das Magnetfeld klein ist und multiplizieren die Klammer $(\dots)^2$ aus. Wir erhalten drei Terme, von denen wir einer $\mathcal{O}(A^2)$ ist:

$$H = H_0 + H_1 + \mathcal{O}(A^2).$$

Die nullte Ordnung liefert die übliche kinetische Energie freier Elektronen (>13.4). H_1 betrachten wir als Störung. Sei $|\phi_1\rangle$ die Korrektur zum Grundzustand $|\text{BCS}\rangle$, sodass

$$|\Phi\rangle = |\text{BCS}\rangle + |\phi_1\rangle + \mathcal{O}(A^2)$$

der korrigierte Zustand ist, so folgt aus der Störungstheorie

$$|\phi_1\rangle = \sum_{l \neq \text{BCS}} \frac{\langle l | H_1 | \text{BCS} \rangle}{E_{\text{BCS}} - E_l} |l\rangle.$$

Dabei ist $|l\rangle$ ein angeregter BCS-Zustand, also zum Beispiel

$|l\rangle \cong \alpha_{\vec{p}'\sigma'}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}\sigma}^{\dagger} |\text{BCS}\rangle$ mit zwei Anregungen.

GESAMTSTROM:

Mit dem kinematischen Impuls $\vec{p} - q\vec{A}$ folgt für den Strom

$$\vec{j} = nq\vec{v} = \frac{nq}{m} (\vec{p} - q\vec{A}) \rightarrow \frac{q}{m} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger} (\vec{p} - q\vec{A}) \psi_{\sigma} = \vec{j}_p + \vec{j}_d,$$

wobei mit \rightarrow in die zweite Quantisierung übergegangen wurde.

Der \vec{p} -Term heißt *paramagnetischer Strom* \vec{j}_p , der \vec{A} -term *diamagnetischer Strom* \vec{j}_d .

DIAMAGNETISCHER STROM:

Mit der Teilchendichte $n = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma}$ folgt sofort (>13.5)

$$\vec{j}_d = -\gamma^{-1} \vec{A},$$

mit dem γ aus 13.1. Dies ist bereits die London-Gleichung aus 13.1! Wir müssen also nur noch $\vec{j}_p = 0$ zeigen.

PARAMAGNETISCHER STROM:

Im Grundzustand $|\text{BCS}\rangle$ gibt es aufgrund der Isotropie von $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ im \vec{p} -Raum es keinen Strom, d. h. $\langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \text{BCS} \rangle = 0$. Wir müssen daher den korrigierten Zustand $|\Phi\rangle$ betrachten (>13.6):

$$\langle \Phi | \vec{j}_p | \Phi \rangle = \langle \phi_1 | \vec{j}_p | \text{BCS} \rangle + \langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \phi_1 \rangle.$$

Setzt man die Störungstheorie-Formel für $|\phi_1\rangle$ ein, erhält man

$$\langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \phi_1 \rangle = \sum_{l \neq \text{BCS}} \frac{\langle l | H_1 | \text{BCS} \rangle}{E_{\text{BCS}} - E_l} \langle \text{BCS} | \vec{j}_p | l \rangle.$$

Für das Matrixelement $\langle l | H_1 | \text{BCS} \rangle$ finden wir, dass es nur dann nicht verschwindet, wenn $|l\rangle$ ein zwei-Teilchen-Zustand mit entgegengesetztem Spin ist. In diesem Fall folgt (>13.7)

$$\langle \vec{q}_1, \sigma; \vec{q}_2, -\sigma | H_1 | \text{BCS} \rangle = \frac{q\vec{\sigma}}{m} (\vec{q}_1 \cdot \vec{a}_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2}) (u_{\vec{q}_1} v_{\vec{q}_2} - u_{\vec{q}_2} v_{\vec{q}_1}),$$

wobei $\vec{a}_{\vec{q}}$ die Fourierkomponente von \vec{A} ist. Im Grenzfall eines sich langsam ändernden Vektorpotentials \vec{A} , das heißt im Grenzfall $\vec{q} \rightarrow 0$ bzw. $\vec{q}_2 \rightarrow -\vec{q}_1$ folgt sofort (>13.8)

$$\langle \text{BCS} | \vec{j}_p | \phi_1 \rangle \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad \vec{A} \rightarrow \text{räumlich konstant.}$$

Zumindest für sich schwach ändernde Vektorpotentiale, das heißt schwache Magnetfelder, gilt somit $\vec{j}_p \ll \vec{j}_d$ und die London-Gleichung ist verifiziert.

KORRELATIONSLÄNGE:

Berechnen wir nicht den Grenzfall, sondern nur das Verhalten für $\vec{q}_2 \approx -\vec{q}_1$, erhalten wir für die Klammer des obigen Matrixelements (>13.9)

$$u_{\vec{q}_1} v_{\vec{q}_2} - u_{\vec{q}_2} v_{\vec{q}_1} \approx \frac{1}{2\Delta} (\xi_{\vec{q}_1} - \xi_{\vec{q}_1 - \vec{q}}) \leq \frac{v_F |\vec{q}|}{2\Delta} =: \frac{\pi}{2} \xi |\vec{q}|,$$

wobei $\vec{q} := \vec{q}_1 + \vec{q}_2$. Die Ungleichung folgt aus $\xi_{\vec{q}} = v_F (|\vec{q}| - p_F)$ (siehe 9.3; Gleichheit gilt für $\vec{q}_1 \parallel \vec{q}$). Dies definiert nun die Korrelationslänge

$$\xi := \frac{v_F}{\pi\Delta}.$$

Falls $\xi |\vec{q}| \ll 1$, ist $u_{\vec{q}_1} v_{\vec{q}_2} - u_{\vec{q}_2} v_{\vec{q}_1} \approx 0$ und die London-Gleichung somit gültig.

PIPPARD-GLEICHUNG:

Die Verallgemeinerung der London-Gleichung ist die Pippard-Gleichung

$$j_{\alpha}(\vec{r}) = - \int d^3r' Q_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}') A_{\beta}(\vec{r}'),$$

wobei $Q_{\alpha\beta}$ für große Argumente in irgendeiner Form abfällt.

$\vec{A}(\vec{r}')$ sorgt nun auch noch nicht-lokal an einem Ort \vec{r}' für einen Strom $\vec{j}(\vec{r}')$. Die Reichweite ξ_Q der nicht-Lokalität hängt davon ab, wie schnell $Q_{\alpha\beta}$ abfällt (bei ξ_Q ist $Q_{\alpha\beta}$ auf $1/e$ abgefallen). Im Falle $\xi_Q < \lambda_L$ (λ_L aus 13.1) spricht man vom *London-Limes*; die Reichweite ist kurz genug, sodass die London-Gleichungen gelten.

13.3 Kritische Teilchendichte und kritisches Magnetfeld

KRITISCHE TEILCHENDICHTE UND EINDRINGTIEFE:

Bei $T = 0$ ist das n aus der London-Gleichung

$$\vec{j} = -\gamma^{-1} \vec{A} = -\frac{nq^2}{m} \vec{A}$$

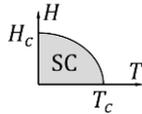
die *gesamte* Elektronendichte, auch wenn nur die Elektronen an der Fermi-Oberfläche für die Supraleitung verantwortlich sind. Für $T > 0$ muss man $n = n_S + n_N$ in „supraleitend“ und „normal“ aufteilen und in der London-Gleichung nur n_S verwenden. Es gilt

$$\frac{n_S}{n} = 2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \Rightarrow \lambda_L(T) = \sqrt{\frac{m}{4\pi q^2 n_S}} = \frac{\lambda_L(0)}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2}$$

für $T \nearrow T_c$ (ohne Beweis).

KRITISCHES MAGNETFELD:

Bei konstanter Temperatur gibt es auch einen kritischen Wert des externen Magnetfelds H_c , bei dem die Supraleitung (SC) zusammenbricht. Indem Fall ist der Supraleiter im Innern nicht mehr magnetfeldfrei.



Die freie Energie setzt sich zusammen aus einer freien Energie der Materie F_S und einer freien Energie der induzierten Ströme zusammen, die das externe Feld abschirmen. Im Allgemeinen setzt sich das Magnetfeld aus dem externen Feld H und dem induzierten Feld B_i zusammen und im Supraleiter gilt $B_i + H = 0$. Die Energie der induzierten Ströme ist gleich $B_i^2/8\pi$ ($B_i^2/2\mu$ im SI-System), mit $B_i + H = 0$ also auch $H^2/8\pi$. Die komplette freie Energie eines Supraleiters ist also $F_S + H^2/8\pi$. Für $H = H_c$ muss daher

$$F_S + \frac{1}{8\pi} H_c^2 = F_N$$

gelten, wobei F_N die freie Energie von normalem Material ist. Bei $T = 0$ gilt $F_S - F_N = -g(E_F)\Delta^2/2$ (siehe am Ende von 12.1).

Somit folgt

$$H_c(T = 0) = \sqrt{8\pi(F_N - F_S)} = 2\sqrt{\pi g(E_F)\Delta(T = 0)}.$$

Den Isotopen-Effekt aus 12.4 gibt es also auch beim Magnetfeld, $H_c \sim M^{-1/2}$. Für $T \nearrow T_c$ gilt das Verhalten (ohne Beweis)

$$H_c(T) = 1,735 H_c(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right).$$

13.4 BCS-Zustand mit Phase

In 12.1 bzw. (>12.2) haben wir der Einfachheit halber angenommen, dass $u_{\vec{p}}, v_{\vec{p}}$ reell sind. Nehmen wir nun an, es gibt eine relative Phase $e^{i\varphi}$ zwischen $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$, so müssen wir den |BCS>-Zustand schreiben als (>13.10)

$$|\text{BCS}(\varphi)\rangle := \prod_{\vec{p}} \left(u_{\vec{p}} + e^{i\varphi} v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle.$$

Dadurch ändert sich nichts an den Ergebnissen unserer bisherigen Herleitungen (>13.10). Die Fouriertransformation liefert dann einen Zustand $|\text{BCS}(N)\rangle$ mit fester Teilchenzahl N (ohne Beweis):

$$|\text{BCS}(N)\rangle := \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |\text{BCS}(\varphi)\rangle e^{-iN\varphi}.$$

Betrachten wir nun die London-Gleichung, $\vec{j} = -\gamma^{-1} \vec{A}$, so gilt diese so nur in der Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Führen wir eine Eichtransformation $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla\chi$, $\psi \rightarrow \psi e^{iq\chi}$ mit $\chi = -\varphi/2q$ durch, finde wir

$$\vec{j} = -\gamma^{-1} \left(\vec{A} - \frac{1}{2q} \nabla\varphi \right).$$

Man beachte, dass nach der Diskussion aus 13.3 klar ist, dass γ im Allgemeinen $\gamma = m/n_s q^2$ ist mit n_s statt n . Dabei ist ψ die makroskopische Wellenfunktion.

14 Supraleiter in Landau-Theorie

14.1 Idee

Alternativ zur mikroskopischen BCS-Theorie kann man den Phasenübergang der Supraleitung auch mit der phänomenologischen Landau-Theorie beschreiben. Als Ordnungsparameter nutzen wir die makroskopische supraleitende Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$, von der wir annehmen, dass der Erwartungswert $\langle \psi(\vec{r}) \rangle$ oberhalb von T_c verschwindet und unterhalb nicht. Sei $F[\psi(\vec{r})]$ ein Funktional, das die Differenz der freien Energie zwischen dem supraleitenden und normalen Zustand ergibt, die wir mit \mathcal{F} beschreiben wollen:

$$\mathcal{F} = \int d^3r F[\psi(\vec{r})] \begin{cases} > 0, & \text{für } T > T_c, \\ < 0, & \text{für } T < T_c, \\ = 0, & \text{für } T = T_c. \end{cases}$$

14.2 Landau-Theorie (ohne Ortsabhängigkeit)

Nehmen wir an, dass ψ ortsunabhängig ist. Nach dem Standard-Verfahren der Landau-Theorie entwickeln wir F nahe T_c , also für kleine ψ , und behalten aus Symmetriegründen nur gerade Ordnungen:

$$F[\psi] = a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4, \quad b > 0.$$

$b > 0$ ist nötig, damit die F nach unten beschränkt ist. Ableiten nach ψ^* (oder ψ) und gleich null setzen liefert (>14.1)

$$|\psi| = 0 \quad \text{oder} \quad |\psi| = \sqrt{-a/b}.$$

Ersteres ist der normale Zustand, letzteres der supraleitende Zustand $\psi \neq 0$. Dieser soll nur für $T < T_c$ existieren, also muss $a \leq 0$ sein für $T \leq T_c$; im einfachsten Fall

$$a = \alpha(T - T_c) \quad \Rightarrow \quad |\psi| \sim \sqrt{T_c - T} \quad \text{für } T < T_c.$$

14.3 Ginsburg-Landau-Theorie (mit Ortsabhängigkeit)

DAS LANDAU-FUNKTIONAL:

Um räumliche Fluktuationen von $\psi(\vec{r})$ symmetrisch mit zu berücksichtigen, fügt man in der Ginsburg-Landau-Theorie einen Term $\sim |\nabla\psi(\vec{r})|^2$ hinzu. Um die Energie einer Wellenfunktion zu beschreiben, können wir dies schreiben als $|\vec{p}\psi(\vec{r})|^2/4m$. Statt $2m$ steht hier $4m$, da ein Elektron-Cooper-Paar die Masse $2m$ hat. Den Impulsoperator \vec{p} ersetzen wir nun weiter durch die minimale Kopplung:

$$F[\psi(\vec{r}), \vec{A}(\vec{r})] = a|\psi(\vec{r})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\vec{r})|^4 + \frac{1}{4m} |(-i\nabla - 2q\vec{A})\psi(\vec{r})|^2 + \frac{B_i^2}{8\pi},$$

wobei die Cooper-Paar-Ladung $2q$ verwendet wurde. $B_i^2/8\pi$ ist einfach die Energie des magnetischen Feldes (siehe auch 13.3).

MINIMIERUNG BZGL. ψ :

Das Minimum von F findet man nun über die Euler-Lagrange-Gleichungen der Feldtheorie. Die Gleichung für ψ^* liefert (>13.2)

$$a\psi + b\psi|\psi|^2 + \frac{1}{4m} (-i\nabla - 2q\vec{A})^2 \psi = 0.$$

DER SUPRALEITENDE STROM:

Die Minimierung bzgl. \vec{A} liefert den Strom (>13.3)

$$\vec{j} = -\frac{iq}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{2q^2}{m} \vec{A} |\psi|^2.$$

Man kann zeigen (hier ohne Beweis), dass $|\psi(\vec{r})|^2 = n_s/2$, wobei n_s die supraleitende Elektronendichte ist. Im Allgemeinen können wir daher

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{n_s}{2}} e^{i\varphi(\vec{r})}$$

schreiben. Falls n_s ist räumlich konstant, folgt für den Strom

$$\vec{j} = \frac{qn_s}{2m} \nabla \varphi - \frac{q^2 n_s}{m} \vec{A} = -\gamma^{-1} \left(\vec{A} - \frac{1}{2q} \nabla \varphi \right).$$

Somit haben wir die London-Gleichung aus 13.4 nun noch einmal mittels Landau-Theorie hergeleitet.

14.4 Kohärenzlänge

VARIATION EINER REELLEN WELLENFUNKTION:

Nehmen wir an, ψ sei reell, und betrachten wir kleine Variationen $\delta\psi$ zu einer Lösung ψ_0 der Euler-Lagrange-Gleichung aus 14.3, also $\psi \rightarrow \psi_0 + \delta\psi$. Dann folgt aus ebendieser Euler-Lagrange-Gleichung für $\vec{A} = 0$ (>14.4)

$$(a + 3b\psi_0^2)\delta\psi = \frac{1}{4m} \nabla^2 \delta\psi.$$

KOHÄRENZLÄNGE DES NORMALEN ZUSTANDS:

Im normalen Zustand $\psi_0 = 0$ folgt daraus in einer Dimension (>14.5)

$$\delta\psi \sim e^{\pm x/\xi}, \quad \xi := \frac{1}{\sqrt{4m|a|}}$$

wobei ξ als Kohärenzlänge bezeichnet wird, wobei im normalen Zustand $a > 0$ ist (siehe 14.2).

KOHÄRENZLÄNGE DES SUPRALEITENDEN ZUSTANDS:

Im supraleitenden Zustand $\psi_0 = \sqrt{-a/b}$ folgt daraus in einer Dimension (>14.5)

$$\delta\psi \sim e^{\pm \sqrt{2}x/\xi}, \quad \xi := \frac{1}{\sqrt{4m|a|}}$$

wobei ξ dieselbe Kohärenzlänge ist, wie oben, und im supraleitenden Zustand $a < 0$ ist (siehe 14.2). An der Oberfläche eines Supraleiters klingt der Ordnungsparameter ψ also auf der Längenskala ξ von 1 auf 0 ab (siehe auch 14.7).

14.5 Externes Magnetfeld

ÄNDERUNG DES LANDAU-FUNKTIONALS:

Wenn wir ein externes Magnetfeld \vec{H} hinzuschalten, so wird aus dem Term $B_i^2/8\pi$ des Landau-Funktional aus 14.3 $\vec{B}^2/8\pi$, wobei $\vec{B} = \vec{H} + \vec{B}_i$ die Überlagerung aus externem und induziertem Magnetfeld ist. Zudem müssen wir einen Term $-\vec{H} \cdot \vec{B}/4\pi$ hinzufügen. Diese beiden Terme liefern dann (>14.7)

$$F = \dots + \frac{1}{8\pi} (\vec{B}^2 - 2\vec{H} \cdot \vec{B}) = \dots + \frac{1}{8\pi} (\vec{B}_i^2 - \vec{H}^2),$$

wobei $\vec{H} = \text{const}$, sodass sich die Euler-Lagrange-Gleichungen nicht ändern. Die Punkte \dots stehen stellvertretend für die ψ -abhängigen Terme, in denen \vec{B}_i nicht vorkommt.

KRITISCHES MAGNETFELD:

Im normalen Zustand $\psi = 0$, ohne Supraleitung, gibt es kein induziertes Magnetfeld und daher gilt $\vec{B} = \vec{H}$. Setzen wir dies in F ein, verschwinden wegen $\psi = 0$ die obigen \dots -Terme und wir erhalten

$$F = \frac{1}{8\pi} (\vec{H}^2 - 2\vec{H} \cdot \vec{H}) = -\frac{1}{8\pi} H^2.$$

Für den supraleitenden Zustand $\psi = \sqrt{-a/b}$ (im räumlich konstanten Fall, also ohne ∇ -Term) gilt $\vec{B} = 0$, also

$$F = a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 = -\frac{a^2}{2b}.$$

Supraleitung gibt es, solange

$$-\frac{a^2}{2b} < -\frac{1}{8\pi} H^2 \quad \Rightarrow \quad H_c = \sqrt{\frac{4\pi a^2}{b}},$$

woraus sich das kritische Feld ergibt.

14.6 Reduzierte Größen, Ginsburg-Landau-Parameter

DIMENSIONSLÖSE GRÖSSEN UND GINSBURG-LANDAU-PARAMETER:

Wir definieren die dimensionslosen Größen

$$\tilde{\psi} := \psi/\psi_0, \quad \tilde{r} := \vec{r}/\lambda_L, \quad \tilde{B}_i := \vec{B}_i/\sqrt{2}H_c,$$

$$\tilde{A} := \vec{A}/\sqrt{2}H_c\lambda_L, \quad \tilde{F} := 4\pi F/H_c^2.$$

Außerdem führen wir den Ginsburg-Landau-Parameter

$$\kappa := \lambda_L/\xi$$

ein.

REDUZIERTER FREIE ENERGIE I:

Damit folgt für die reduzierte freie Energie (>14.8)

$$\tilde{F} = -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \left|(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A})\tilde{\psi}\right|^2 + \tilde{B}_i^2.$$

REDUZIERTER EULER-LAGRANGE-GLEICHUNGEN:

Die Euler-Lagrange-Gleichungen aus 14.3 lassen sich nun schreiben als (>14.9)

$$-\tilde{\psi} + \tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2 + \left(-i\kappa^{-1}\tilde{\nabla} - \tilde{A}\right)^2 \tilde{\psi} = 0$$

sowie (>14.9)

$$\tilde{\vec{j}} := \frac{m\xi}{q\psi_0^2}\vec{j} = -\frac{i}{2\kappa}(\tilde{\psi}^*\tilde{\nabla}\tilde{\psi} - \tilde{\psi}\tilde{\nabla}\tilde{\psi}^*) - \tilde{A}|\tilde{\psi}|^2,$$

wobei

$$\tilde{\vec{j}} = 8\pi q\xi\lambda_L^2\vec{j} = \tilde{\nabla} \times (\tilde{\nabla} \times \tilde{A}).$$

REDUZIERTER FREIE ENERGIE II:

Den dritten Term in obigem \tilde{F} können wir durch partielle Integration so modifizieren, dass wir die Euler-Lagrange-Gleichung einsetzen können, um einfach (>14.10)

$$\tilde{F} = -\frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \tilde{B}_i^2$$

zu erhalten. Dabei ist, wie in 14.5 erläutert, \tilde{B}_i das durch den supraleitenden Strom induzierte Magnetfeld.

14.7 Oberflächenenergie

$\tilde{F} = 0$ BEI $H = H_c$:

Man betrachte ein Metall bei exakt $H = H_c$; hier ist $\tilde{F} = 0$, und zwar sowohl aus Sicht der supraleitenden als auch der normalen Phase (da sich die beiden Phasen hier treffen). Wie erwartet finden wir bei $H = H_c$ (>14.11)

$$\text{normale Phase: } \tilde{\psi} = 0, \quad \tilde{B} = \tilde{H} \quad \Rightarrow \quad \tilde{F} = 0,$$

$$\text{supraleitende Phase: } \tilde{\psi} = 1, \quad \tilde{B} = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{F} = 0.$$

OBERFLÄCHE VON SUPRALEITERN:

Man betrachte ein Metall sehr nahe bei $H = H_c$. Angenommen, es gibt einen Bereich mit $H = H_c + \epsilon$ (normal, links) und einen angrenzenden Bereich mit $H = H_c - \epsilon$ (supraleitend, rechts).

- Magnetfeld mit Eindringtiefe λ_L :

Links gilt $\tilde{B} = \tilde{H} = 1/\sqrt{2}$, rechts $B = 0$. Allerdings dringt das Magnetfeld auf einer Längenskala λ_L rechts ein (siehe 14.4). Da generell $B = H + B_i$ gilt und H überall konstant ist, muss B im Supraleiter durch B_i kompensiert werden. Ebenso, wie B rechts abfällt, steigt B_i also an.

- Ordnungsparameter mit Korrelationslänge ξ :

Links gilt $\psi = 0$, rechts $\psi = 1$. In 14.4 haben wir allerdings gesehen, dass ψ auf einer Längenskala ξ zum Rand des Supraleiters hin abfällt.

OBERFLÄCHENERGIE - SUPRALEITER VOM TYP I UND II:

Die Energiedifferenz zwischen normalem und supraleitendem Zustand ist gegeben durch das Raumintegral über \tilde{F} , das in seiner einfachsten Form am Ende von 14.6 gegeben ist. Man unterscheidet nun zwei Arten von Supraleitern:

- Typ I: $\lambda_L \ll \xi \Leftrightarrow \kappa \ll 1$:

In diesem Fall ist das Integral über \tilde{F} durch die grün hinterlegte Fläche gegeben. Da das Integral über \tilde{B}_i positiv und das über $\tilde{\psi}$ negativ ist, gilt in diesem Fall $\tilde{F} > 0$ sowie außerdem grob $\tilde{F} \sim \xi$.

- Typ II: $\xi \ll \lambda_L \Leftrightarrow \kappa \gg 1$:

In diesem Fall ist das Integral über \tilde{F} durch die rot hinterlegte Fläche gegeben. Da das Integral über \tilde{B}_i positiv und das über $\tilde{\psi}$ negativ ist, gilt in diesem Fall $\tilde{F} < 0$ sowie außerdem grob $\tilde{F} \sim \lambda_L$.

