Stichworte und Formeln zur Vorlesung

Theoretische Festkörperphysik

Heinz Horner

Institut für Theoretische Physik Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

WS 2002/2003



Inhalt

Ι	GRUNDLAGEN				
1	1 Lehrbücher				
2	Ziel	e und Methoden	1		
3	Besc	hreibung idealer Kristallstrukturen	2		
	3.1	Gitter	2		
	3.2	Bragg Streuung, reziprokes Gitter	3		
II	EIN ELF	TEILCHENZUSTÄNDE UND XMENTARANREGUNGEN	5		
4	Elek	tronen im periodischen Potential	5		
	4.1	Bloch Theorem	5		
	4.2	Fast freie Elektronen	6		
	4.3	Stark gebundene Elektronen	7		
	4.4	Orthogonalisierte ebene Wellen, Pseudopotentiale	9		

5	Pho	nonen in harmonischer Näherung	10
	5.1	Adiabatische Näherung	10
	5.2	Harmonischer Oszillator	11
	5.3	Phononen im Kristall	12
	5.4	Lineare Kette	15
	5.5	Langwelliger Grenzfall, Schall	16
	5.6	Inelastische Streuung von Neutronen oder γ -Quanten	17
	5.7	Inkohärente Streuung, Mössbauer-Effekt	20
6	Spin	wellen in Ferromagneten	21
III	STA	TISTISCHE PHYSIK VON QUASITEILCHEN	22
7	Pho	nonen (Bosonen)	22
	7.1	Besetzungszahldarstellung	22
	7.2	Zustandssumme, Freie Energie, Spezifische Wärme	22
	7.3	Wärmeleitung	25
8	Elek	tronen (Fermionen)	31
	8.1	Besetzungszahldarstellung für Fermionen	31
	8.2	Großkanonische Gesamtheit, Grundzustand	32
	8.3	Spezifische Wärme bei tiefen Tempeaturen	33
	8.4	Elektrische Leitfähigkeit, Wärmeleitung	35
9	Hall	oleiter	39
	9.1	Intrinsische Halbleiter	39
	9.2	Dotierte Halbleiter	40
	9.3	<i>p-n</i> -Übergang, Diode, Transistor	42
10	Tief	temperatureigenschaften von Gläsern	47
IV	WE	CHSELWIRKENDE ELEKTRONEN IN METALLEN	50
11	Har	tree-Fock Theorie	50
	11.1	Variationsrechnung, Hartree-Fock Gleichungen	50
	11.2	Elektronen in einem homogenen Potential	52
	11.3	Abschirmung (Thomas-Fermi-Näherung)	54
	11.4	Optische Eigenschaften, Plasmaschwingungen	55
	11.5	Fermi-Flüssigkeit (Landau-Theorie)	56

12	Supraleitung 5					
	12.1 Phononinduzierte Wechselwirkung	58				
	12.2 BCS-Grundzustand	59				
	12.3 Angeregte Zustände, Quasiteilchen	62				
	12.4 Ginzburg-Landau Theorie	64				
13	13 Elektronen im Magnetfeld 69					
	13.1 Einteilchenzustände	69				
	13.2 Hall Effekt	71				
	13.3 Quantisierter Hall Effekt, von Klitzing Effekt	71				

I GRUNDLAGEN

1 Lehrbücher

N. Ashcroft, D. Mermin: Solid State Physics (Holt, Rinchard, Winston)

C. Kittel: Introduction to Solid State Physics (John Wiley / Oldenurg)

C. Kittel: Quantum Theory of Solids (John Wiley / Oldenurg)

O. Madelung: Fesrkörperthheorie I+II (Springer)

J. Ziman: Electrons and Phonons (Oxford Clarendon Press)

J. Ziman: Principles of the Theory of Solids (Cambridge Univ. Press)

W. Ludwig: Festkörperphysik I+II (Akademie Verlagsges. Frankfurt)

S. Hunklinger, C. Enss: Festkörperphysik (Skriptum)

F. Wegner: Theoretische Festkörperphysik (Skriptum)

2 Ziele und Methoden

Festkörper:

Kristalle (ideal, gestört, ungeordnet, polykristallin) Gläser, Polymere, amorphe Substanzen Niedrigdimensionale Systeme (Schichten, quasi-eindimensionale Systeme) Mesoskopische Systeme Flüssige Kristalle, Gele ...

Eigenschaften:

Mechanisch (Elastizität, Plastizität, Härte, Sprödigkeit, Ultraschall) Optisch (Transparent, absorbierend, reflektierend ...) Elektrisch (Isolator, Ferroelektrikum, Halbleiter, metallischer Leiter, Supraleiter) Magnetisch (Diamagnet, Paramagnet, Ferromagnet, Antiferromagnet, Spinglas) Thermisch (Spezifische Wärme, Wärmeleitung) Phasenumwandlungen (Schmelzen, Erstarren, magnetische Phasenumwandlung ...) Oberflächen, Grenzflächen, mesoskopische Systeme, Defekte (Farbzentren) ...

Theorie:

Quantenmechanik (nichtrelativistisch) Statistische Physik (klassisch und quantenmechanisch, Transporttheorie) Spezielle Modelle zur Beschreibung von Teilaspekten

Vereinfachungen, Idealisierungen

Kristallsymmertien (Translationen) Zeitskalen (Elektronen ~ 10^{-16} sec, Ionen ~ 10^{-13} sec, Transport $1 \cdots 10^{-6}$ sec) Tiefe Temperaturen (Schwach wechselwirkende Quasiteilchen)

3 Beschreibung idealer Kristallstrukturen

3.1 Gitter



Periodische Anordnung identischer Objekte.

Gittervektor:

$$\vec{R}_i = \sum_{\alpha=1}^3 n_{i,\alpha} \, \vec{a}_\alpha \qquad (3.1)$$

 $n_{i,\alpha}$ ganzzahlig

Basisvektoren: $\vec{a}_1 \ \vec{a}_2 \ \vec{a}_3$

Beachte: Die Wahl der Basisvektoren ist nicht eindeutig, in nebenstehender Figur ist z.B. $\vec{a'}_2 = \vec{a}_2 - \vec{a}_1$ auch möglich.

Voronoi Zellen (für eine beliebige Menge von Punkten in *d*-dimensionalem Raum): Zelle Z_i um Punkt am Ort $\vec{R_i}$ so daß für alle $\vec{r} \in Z_i$: $|\vec{r} - \vec{R_i}| < |\vec{r} - \vec{R_\ell}|$ für alle $\ell \neq i$.

Primitives Gitter: Jede Voronoi Zelle hat die gleiche Form und Orientierung. Sie wird als Wigner-Seitz Zelle bezeichnet.

Volumen der Wigner-Seitz Zelle: $v = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|$

Deckoperationen: Translationen um Gittervektor, Spiegelungen, Drehungen.

Nichtprimitives Gitter:

Beispiel hexagonales Gitter. Es entspricht einem primitiven Gitter mit zwei Punkten pro Elementarzelle.

Deckoperationen: Translationen um Gittervektor, Spiegelungen, Drehungen, zusätzlich Gleitspiegelungen ...





Beispiel *NaCl*-Struktur: Zwei Atome pro Elementarzelle.

Allgemein: Gitter mit *L* Atomen pro Elementarzelle

1 14.10.02

Position eines Atoms " ℓ " in der Zelle "i":

$$\vec{R}_{i,\ell} = \sum_{\alpha=1}^{3} n_{i,\alpha} \, \vec{a}_{\alpha} \, + \, \vec{s}_{\ell} \tag{3.2}$$

Beispiel:

Kubisch flächenzentriertes Gitter (dichteste Kugelpackung)

kubisch raumzentriertes Gitter

> 100 λ [nm]

> > 10

1.0

0.1

0.01

0.1

1

1

meV





3.2 Bragg Streuung, reziprokes Gitter

Elektronen

Neutronen

Typischer Wert für Gitterkonstante $\sim 0.3 \cdots 1 \text{ nm} = 3 \cdots 10 \text{ Å}$

Licht (y

10 100

eV

1

Streuung von Licht (γ) oder Teilchen zur Bestimmung der Kristallstruktur

Wellenlänge λ und Wellenvektor \vec{k}

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} \tag{3.3}$$

Energie: Licht

$$E(k) = \hbar\omega = \hbar c \left| \vec{k} \right| \tag{3.4}$$

Teilchen:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$
 (3.5)

Elastische Streuung an einem Potential:

10 100 1000

10 100

1

°K

Energieerhaltung:



10 100 KeV

E(k)

Gestreute Welle in Born'scher Näherung, mit $k = |\vec{k}|$ und $r = |\vec{r}|$

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\,\hat{\psi}(\vartheta) \qquad \qquad \hat{\psi}(\vartheta) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\int\!\mathrm{d}^3r'\,\mathrm{e}^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\cdot\vec{r}\,'}\,V(\vec{r}\,') \tag{3.8}$$

Streuquerschnitt:

$$\frac{\mathrm{d}\,\sigma}{\mathrm{d}\,\Omega}(\vartheta) = \left|\hat{\psi}(\vartheta)\right|^2\tag{3.9}$$

Streuung an einem Kristall:

s-Wellen Streuung an einem Einzelatom " ℓ " mit Streulänge b_{ℓ} .

$$V(\vec{r}') = \sum_{i,\ell} b_{\ell} \,\delta(\vec{R}_{i,\ell} - \vec{r}')$$
(3.10)

Mit (3.2)

$$\hat{\psi}(\vartheta) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{i} e^{i\sum_{\alpha} n_{i,\alpha}(\vec{k}-\vec{k}\,')\cdot\vec{a}_{\alpha}} \sum_{\ell} b_{\ell} e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\cdot\vec{s}_{\ell}}$$
(3.11)

Konstruktive Interferenz für $(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{a}_{\alpha} = 2 n \pi$ mit ganzzahligem *n*. <u>Reziprokes Gitter:</u>

Konstruiere Basisvektoren \vec{b}_1 \vec{b}_2 \vec{b}_3 so daß

$$\vec{a}_{\alpha} \cdot \vec{b}_{\beta} = 2\pi \delta_{\alpha\beta}$$
 $\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{v}$ (3.12)

Brillouin Zone: Entspricht Wigner-Seitz Zelle im reziproken Gitter.

Konstruktive Interferenz für

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{\tau}_n = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \vec{b}_{\alpha}$$
(3.13)

Elastischer Streuquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(\vartheta) \sim \delta(|\vec{k}| - |\vec{k}'|) \sum_{n} \delta(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{\tau}_n) F_n \tag{3.14}$$

Formfaktor:

$$F_n = \left|\sum_{\ell} b_{\ell} \,\mathrm{e}^{i\vec{\tau}_n \cdot \vec{s}_{\ell}}\right|^2 \tag{3.15}$$

Beachte: $\vec{\tau}_n$ hängt nur von der Orientierung des Kristalls ab, F_n hängt nicht von der Orientierung des Kristalls ab.

Anwendung: Monochromator (ϑ fest vorgegeben).

Strukturbestimmung: Messung der Formfaktoren F_n und Rekonstruktion der Positionen der Atome innerhalb der Einheitszelle.

Problem: Die Rekonstruktion ist nicht eindeutig (inverses Problem), da die Information über die Phasen der Summe in (3.15) fehlt.

Hilfsmittel: Variation der individuellen Streulängen z.B. durch Verwendung verschiedener Isotope bei Neutronenstreuung oder Röntgenstreuung mit Energien in der Nähe atomarer Absorbtionskanten. 2 16.10.02

II EINTEILCHENZUSTÄNDE UND ELEMENTARANREGUNGEN

4 Elektronen im periodischen Potential

4.1 Bloch Theorem

Hamilton Operator für ein Elektron

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$
 (4.1)

Gitterperiodisches Potential (primitives Gitter)

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_n) \tag{4.2}$$

Translationsoperator:

$$T(\vec{R}_n) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{R}_n \cdot \vec{p}} \qquad T(\vec{R}_n) f(\vec{r}) T^{\dagger}(\vec{R}_n) = f(\vec{r} + \vec{R}_n)$$
(4.3)

$$T^{\dagger}(\vec{R}_n) = T(-\vec{R}_n) \qquad [T^{\dagger}(\vec{R}_n), \vec{p}] = 0$$
 (4.4)

Ortsdarstellung: $\vec{p} \Rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$

Übung: Zeige mit Hilfe der Ortsdarstellung, daß (4.3) gilt.

Invarianz des Hamiltonoperators mit periodischem Potential gegenüber Gittertranslationen:

$$T(\vec{R}_n) H T^{\dagger}(\vec{R}_n) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r} + \vec{R}_n) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = H$$
(4.5)

Dies gilt in einem unendlichen Kristall (Vernachlässigung von Randeffektem) oder bei periodischen Randbedingungen.

Wegen $[T(\vec{R}_n), H] = 0$ und $[T(\vec{R}_n), T(\vec{R}_{n'})] = 0$ können simultane Eigenfunktionen gefunden werden. Da $T(\vec{R}_n)$ unitär ist, sind seine Eigenwerte von der Form $e^{i\varphi}$ und wegen $T(\vec{R}_n) T(\vec{R}'_n) = T(\vec{R}_n + \vec{R}_{n'})$ sind die simultanen Eigenfunktionen von der Form

$$T(\vec{R}_n)\,\varphi_{\vec{\kappa}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{\kappa}}(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{R}_n}\,\varphi_{\vec{\kappa}}(\vec{r}) \tag{4.6}$$

Bloch Theorem:

$$\varphi_{\vec{\kappa}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\,\vec{\kappa}\cdot\vec{r}} u_{\vec{\kappa}}(\vec{r}) \qquad \text{mit} \qquad u_{\vec{\kappa}}(\vec{r}+\vec{R}_n) = u_{\vec{\kappa}}(\vec{r}) \tag{4.7}$$

 $\vec{\kappa}$ kann innerhalb der ersten Brillouin Zone gewählt werden, da $(\vec{\kappa} + \vec{\tau}_{\ell}) \cdot \vec{R}_n = \vec{\kappa} \cdot \vec{R}_n \mod 2\pi$.

Stationäre Schrödingergleichung für $u_{\vec{\kappa}}(\vec{r})$, ist innerhalb der Wigner-Seitz Zelle mit periodischen Randbedingungen (4.7) zu lösen.

$$\left\{\frac{(\vec{p}+\hbar\vec{\kappa})^2}{2m} + V(\vec{r})\right\} u_{\vec{\kappa},\ell}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{\kappa},\ell} u_{\vec{\kappa},\ell}(\vec{r})$$
(4.8)

wobei ℓ eine zusätzliche Quantenzahl (Bandindex) darstellt.



KKK

KOO

4.2 Fast freie Elektronen

<u>Freie Elektronen in Bloch Darstellung</u> Wellenvektor $\vec{k} = \vec{\kappa} + \vec{\tau}_{\ell}$

$$\epsilon_{\vec{\kappa},\ell} = \frac{\hbar^2 \left(\vec{\kappa} + \vec{\tau}_\ell\right)^2}{2m} \qquad (4.9)$$

$$\varphi_{\vec{\kappa},\ell}(\vec{r}) = e^{i(\vec{\kappa}+\vec{\tau}_{\ell})\cdot\vec{r}}$$
$$u_{\vec{\kappa},\ell}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\vec{\tau}_{\ell}\cdot\vec{r}} \qquad (4.10)$$

Fast freie Elektronen:

Lösungsansatz:

$$u_{\vec{\kappa},\ell}(\vec{r}) = e^{i\vec{\tau}_{\ell}\cdot\vec{r}} + \sum_{m\,(\neq\ell)} a_{\ell,m} \, e^{i\vec{\tau}_m\cdot\vec{r}} \tag{4.11}$$

$$\frac{1}{v} \int_{v} \mathrm{d}^{3} r \,\mathrm{e}^{-i\vec{\tau}_{n}\cdot\vec{r}} \bigg\{ \frac{\hbar^{2}(-i\vec{\nabla}+\vec{\kappa})^{2}}{2m} + V(r) - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell} \bigg\} u_{\vec{\kappa},\ell}(\vec{r}) = 0$$
(4.12)

Mit

$$V_{n,m} = \frac{1}{v} \int_{v} \mathrm{d}^{3} r \, \mathrm{e}^{-i(\vec{\tau}_{n} - \vec{\tau}_{m}) \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) \tag{4.13}$$

und (4.11)

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\kappa} + \vec{\tau}_n\right)^2 - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}\right\} \left\{\delta_{\ell,n} + a_{\ell,n}\right\} + V_{\ell,n} + \sum_{m \ (\neq\ell)} a_{\ell,m} V_{m,n} = 0$$
(4.14)

Beispiel: fcc–Gitter: Brillouin Zone ≙ Wigner-Seitz Zelle des bcc–Gitters



Störungsrechnung für schwaches Potential (nicht entartet):

0. Ordnung:

$$a_{\ell,n}^{(0)} = 0 \qquad \qquad \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \, (\vec{\kappa} + \vec{\tau}_{\ell})^2 \qquad (4.15)$$

1. Ordnung:

$$a_{\ell,n}^{(1)} = \frac{V_{\ell,n}}{\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(0)} - \epsilon_{\vec{\kappa},n}^{(0)}} \qquad \qquad \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} = \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(0)} + V_{\ell,\ell}$$
(4.16)

2. Ordnung:

$$\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(2)} = \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} + \sum_{m(\neq\ell)} a_{\ell,m}^{(1)} V_{m,\ell} = \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} - \sum_{m(\neq\ell)} \frac{|V_{\ell,m}|^2}{\epsilon_{\vec{\kappa},m}^{(0)} - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(0)}}$$
(4.17)

Entartete Störungsrechnung (2-fach entartet oder fast entartet)

Es sei $\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} \approx \epsilon_{\vec{\kappa},\ell'}^{(1)}$. $m \neq \ell, \ell'$ werde vernachlässigt. Gl.(4.14) für $n = \ell$ b.z.w. $n = \ell'$:

$$\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell} + a_{\ell,\ell'} V_{\ell',\ell} = 0$$
$$V_{\ell,\ell'} + \left\{ \epsilon_{\vec{\kappa},\ell'}^{(1)} - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell} \right\} a_{\ell,\ell'} = 0 \qquad (4.18)$$

Lösung:

$$(\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell})(\epsilon_{\vec{\kappa},\ell'}^{(1)} - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell}) - |V_{\ell,\ell'}|^2 = 0 \qquad (4.19)$$

$$\epsilon_{\vec{\kappa},\ell} = \frac{1}{2} (\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} + \epsilon_{\vec{\kappa},\ell'}^{(1)})$$

$$\pm \sqrt{\frac{1}{4} (\epsilon_{\vec{\kappa},\ell}^{(1)} - \epsilon_{\vec{\kappa},\ell'}^{(1)})^2 + |V_{\ell,\ell'}|^2}$$
(4.20)

Aufhebung der Entartungen.

4.3 Stark gebundene Elektronen

LCAO (Linear combination of atomic orbitals)

Freies Atom:

$$\overset{\circ}{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) \qquad \qquad \overset{\circ}{H} \overset{\circ}{\varphi}_{n,\mu} \left(\vec{r}\right) = \overset{\circ}{E}_n \overset{\circ}{\varphi}_{n,\mu} \left(\vec{r}\right) \qquad (4.21)$$

Hauptquantenzahl n, Nebenquantenzahl $\mu = \{l, m, s\}$.

Entwicklung der Blochfunktionen nach Atomorbitalen an jeweiligen Gitterpunkten. Beachte: Die Lösungen des atomaren Problems an einem Gitterpunkt (z.B. $\vec{R} = 0$) bilden bereits eine vollständige Basis, allerdings unter Einbeziehung von Kontinuumszuständen. In der LCAO werden nur gebundene Zustände berücksichtigt, dafür aber solche an jedem



3 22.10.02

Gitterpunkt.

$$\varphi_{\vec{\kappa},n,\lambda}(\vec{r}) = e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}} \Biggl\{ \sum_{\mu} a_{\vec{\kappa},n,\lambda,\mu} \sum_{i} \overset{\circ}{\varphi}_{n,\mu} (\vec{r} - \vec{R}_{i}) + \sum_{m(\neq n)} \sum_{\mu} b_{\vec{\kappa},n,m,\lambda,\mu} \sum_{i} \overset{\circ}{\varphi}_{m,\mu} (\vec{r} - \vec{R}_{i}) \Biggr\}$$
(4.22)

Berechne Matrixelement von (4.8) mit atomaren Zustand:

$$\int \mathrm{d}^3 r \; \overset{\circ}{\varphi}^*_{n,\mu} \left(\vec{r} \right) \left\{ \frac{p^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r} - \vec{R}_i) - \epsilon_{\vec{\kappa},n',\lambda} \right\} \varphi_{\vec{\kappa},n',\lambda} \left(\vec{r} \right) = 0 \tag{4.23}$$

mit

$$\frac{p^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r} - \vec{R}_i) = \overset{\circ}{H} + \sum_{i(\neq 0)} V(\vec{r} - \vec{R}_i)$$
(4.24)

Es sei

$$\int \mathrm{d}^3 r \; \hat{\varphi}_{n,\mu}^* \left(\vec{r} \right) \mathrm{e}^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}} \sum_i \hat{\varphi}_{n',\mu'} \left(\vec{r} - \vec{R}_i \right) = \delta_{n,n'} \delta_{\mu,\mu'} + S_{\vec{\kappa},n,n',\mu,\mu'} \tag{4.25}$$

und

$$\int d^3 r \, \overset{\circ}{\varphi}^*_{n,\mu} \, (\vec{r}) e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}} \sum_{j(\neq 0)} V(\vec{r}-\vec{R}_j) \sum_i \overset{\circ}{\varphi}_{n',\mu'} \, (\vec{r}-\vec{R}_i) = W_{\vec{\kappa},n,n',\mu,\mu'} \tag{4.26}$$

Stark lokalisierte Elektronen (innere Schalen):

$$S_{\vec{\kappa},n,n',\mu,\mu'} \ll 1 \qquad \qquad W_{\vec{\kappa},n,n',\mu,\mu'} \ll \overset{\circ}{E}_n \tag{4.27}$$

Beschränkung auf ein Band: $b_{\vec{\kappa},n,m,\lambda,\mu} \ll a_{\vec{\kappa},n,\lambda,\mu}$

Eigenwertgleichung für $\epsilon_{\vec{\kappa},n,\lambda}$:

$$\sum_{\mu'} \left[\left\{ \stackrel{\circ}{E}_n - \epsilon_{\vec{\kappa},n,\lambda} \right\} \left\{ \delta_{\mu,\mu'} + S_{\vec{\kappa},n,n,\mu,\mu'} \right\} + W_{\vec{\kappa},n,n,\mu,\mu'} \right] a_{\vec{\kappa},n,\lambda,\mu'} = 0$$
(4.28)

Speziell für ein nicht entartetes Band:

$$\epsilon_{\vec{\kappa},n} = \stackrel{\circ}{E}_n + \frac{W_{\vec{\kappa},n,n}}{1 + S_{\vec{\kappa},n,n}} \tag{4.29}$$

Schwache Dispersion für stark lokalisierte atomare Orbits (z.B. *f*-Elektronen in Übergangsmetallen), Starke Dispersion z.B. für *s*-Orbitale.



4.4 Orthogonalisierte ebene Wellen, Pseudopotentiale

Leitungsbänder (LCAO ist hierfür nicht brauchbar)

Ebene Welle: $|\vec{\kappa}\rangle$ Core Zustände (LCAO): $|\bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})\rangle$

OPW-Ansatz:

$$|\varphi_{\ell}(\vec{\kappa})\rangle = |\vec{\kappa}\rangle - \sum_{n(<\ell)} |\bar{\varphi}_{n}(\vec{\kappa})\rangle \langle \bar{\varphi}_{n}(\vec{\kappa}) | \vec{\kappa}\rangle$$
(4.30)



Energie:

$$\epsilon_{\ell}(\vec{\kappa}) = \langle \varphi_{\ell}(\vec{\kappa}) | H | \varphi_{\ell}(\vec{\kappa}) \rangle \approx \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + \mathring{E}_{\ell}$$
(4.31)

 $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$: Beitrag der "glatten" Bereiche $\stackrel{\circ}{E}_{\ell}$: Beitrag im "Core"-Bereich.

Pseudopotentiale:

Verallgemeinerter OPW-Ansatz mit zunächst freien Parametern b_n :

$$|\varphi_{\ell}(\vec{\kappa})\rangle = |\vec{\kappa}\rangle - \sum_{n(<\ell)} b_n |\bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})\rangle \langle \bar{\varphi}_n(\vec{\kappa}) | \vec{\kappa}\rangle$$
(4.32)

Stationäre Schrödinger-Gleichung:

$$H |\varphi_{\ell}(\vec{\kappa})\rangle = H |\vec{\kappa}\rangle - \sum_{n(<\ell)} b_n H |\bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})\rangle \langle \bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})|\vec{\kappa}\rangle$$
$$= H |\vec{\kappa}\rangle - \sum_{n(<\ell)} b_n \epsilon_n(\vec{\kappa}) |\bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})\rangle \langle \bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})|\vec{\kappa}\rangle$$
$$= \epsilon_{\ell}(\vec{\kappa}) \left\{ |\vec{\kappa}\rangle - \sum_{n(<\ell)} b_n |\bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})\rangle \langle \bar{\varphi}_n(\vec{\kappa})|\vec{\kappa}\rangle \right\}$$
(4.33)

Äquivalente Schrödinger-Gleichung:

$$\left\{H + V_c(\epsilon_\ell(\vec{\kappa}))\right\} | \vec{\kappa} \rangle = \epsilon_\ell(\vec{\kappa}) | \vec{\kappa} \rangle$$
(4.34)

mit nichtlokalem energieabhängigen"Pseudopotentialen"

$$V_{c}(\epsilon) = \sum_{\substack{n(<\ell) \\ \circ (i)}} b_{n} \left\{ \epsilon - \epsilon_{n}(\vec{\kappa}) \right\} \left| \bar{\varphi}_{n}(\vec{\kappa}) \right\rangle \left\langle \bar{\varphi}_{n}(\vec{\kappa}) \right|$$
(4.35)

Näherung: Lokale Atomorbitale $| \breve{\varphi}_n^{(i)} \rangle$ am Gitterplatz $\vec{R_i}$

$$V_{c}(\epsilon) \approx \sum_{n(<\ell)} b_{n} \left\{ \epsilon - \stackrel{\circ}{E}_{n} \right\} \sum_{i} | \stackrel{\circ}{\varphi}{}_{n}^{(i)} \rangle \langle \stackrel{\circ}{\varphi}{}_{n}^{(i)}) |$$
(4.36)

 b_n können angepaßt werden, Pseudopotentiale sind "atomare Eigenschaft". Anwendung z.B. Legierungen.

Mit (4.34) und (4.36) erhält man "fast freie Elektronen" auch für Leitungselektronen.

4 24.10.02

5 Phononen in harmonischer Näherung

5.1 Adiabatische Näherung

Problem: Separation der elektronischen Freiheitsgrade und der Vibrations- (Rotations-) Freiheitsgrade in Festkörpern und Molekülen.

<u>Kerne (Ionen)</u>: Masse M_i , Impuls $\vec{P_i}$, Ort $\vec{X_i}$

<u>Elektronen:</u> Masse *m*, Impuls \vec{p}_{ℓ} , Ort \vec{x}_{ℓ}

Beachte: $M_i \gg m$ i.e. bei gleicher Energie ist die typische Geschwindigkeit der Elektronen groß gegen die der Kerne.

Hamiltonoperator von Elektronen und Kernen

$$H = \sum_{i} \frac{P_{i}^{2}}{2M_{i}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\vec{X}_{i} - \vec{X}_{j}) + \sum_{\ell} \frac{p_{\ell}^{2}}{2m} + \sum_{i} \sum_{\ell} W(\vec{X}_{i} - \vec{x}_{\ell}) + \frac{1}{2} \sum_{\ell,\ell'} v(\vec{x}_{\ell} - \vec{x}_{\ell'})$$
(5.1)

"Elektron-Hamiltonoperator" mit Kernpositionen als Parameter:

$$H_{el}(p,x;X) = \sum_{\ell} \frac{p_{\ell}^2}{2m} + \sum_{i} \sum_{\ell} W(\vec{X}_i - \vec{x}_{\ell}) + \frac{1}{2} \sum_{\ell,\ell'} v(\vec{x}_{\ell} - \vec{x}_{\ell'})$$
(5.2)

Schrödingergleichung für Elektronen (bei festen X)

$$H_{el}(p,x;X)\,\varphi_n(x;X) = \epsilon(X)\,\varphi_n(x;X) \tag{5.3}$$

Zeitabhängige Schrödingergleichung für zeitabhängige X(t)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,t) = H_{el}(p,x;X(t))\varphi(x,t)$$
(5.4)

Ansatz:

$$\varphi(x,t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n(X(t))t}\varphi_n(x;X(t))$$
(5.5)

Zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n(X(t))t} \varphi_n(x; X(t)) =$$

$$= \left\{ \epsilon_n(X(t)) + i\hbar \sum_i \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \vec{X}_i(t) \right) \cdot \vec{\nabla}_{X_i} \right\} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n(X(t))t} \varphi_n(x; X(t))$$

$$\approx H_{el}(p, x; X(t)) e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n(X(t))t} \varphi_n(x; X(t))$$
(5.6)

Abschätzung des Fehlers:

Typische Wellenlänge der Elektronen: $\lambda_{el} = 2\pi/k_{el}$. Typische Energie: $\epsilon_{el} \approx \frac{\hbar^2 k_{el}^2}{2m}$. Typische Geschwindigkeit $\dot{x}_{el} \approx \frac{\hbar k_{el}}{m}$. Korrektur $\sim m \dot{x} \dot{X} \ll \epsilon_{el}$ für $\dot{X} \ll \dot{x}$.

Typische Energie der Kernbewegung $E_K \approx \frac{1}{2}M\dot{X}^2$. Adiabatische Näherung ist gut für $\epsilon_{el} \gg \frac{m}{M}E_K$. Die adiabatische Näherung ist nicht gut für (fast) entartete Elektronenzustände (konische Durchschneidungen in Molekülsystemen).

Ansatz für Gesamtwellenfunktion:

$$\Psi(x,X) = \varphi_n(x;X) \Phi(X)$$
(5.7)

Schrödingergleichung:

$$H\Psi(x,X) = \left\{ \sum_{i} \frac{P_{i}^{2}}{2M_{i}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\vec{X}_{i} - \vec{X}_{j}) + H_{el}(p,x;X) \right\} \varphi_{n}(x;X) \Phi(X)$$

$$= \varphi_{n}(x;X) \left\{ \sum_{i} \frac{P_{i}^{2}}{2M_{i}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\vec{X}_{i} - \vec{X}_{j}) + \epsilon_{n}(X) \right\} \Phi(X)$$

$$- \sum_{i} \frac{\hbar^{2}}{M_{i}} \left\{ \left(\vec{\nabla}_{X_{i}} \varphi_{n}(x;X) \right) \cdot \vec{\nabla}_{X_{i}} \Phi(X) + \frac{1}{2} \left(\nabla_{X_{i}}^{2} \varphi_{n}(x;X) \right) \Phi(X) \right\}$$

$$\approx \varphi_{n}(x;X) H_{ph}(P,X) \Phi(X)$$
(5.8)

Korrektur in (5.8) ist klein für $\epsilon_{el} \gg \frac{m}{M} E_K$.

Effektiver Hamiltonoperator für Kernbewegung (Phononen)

$$H_{ph}(P,X) = \sum_{i} \frac{P_i^2}{2M_i} + W(X)$$
(5.9)

mit

$$W(X) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\vec{X}_i - \vec{X}_j) + \epsilon_n(X)$$
(5.10)

5.2 Harmonischer Oszillator

1-dimensionale Bewegung in einem Potential V(x)

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$
 (5.11)

Entwicklung des Potentials um Ruhelage R

$$V(R) = V_0 \qquad V'(x)\Big|_{x=R} = 0 \qquad V''(x)\Big|_{x=R} = \Phi$$
 (5.12)

Auslenkung u = x - R. Harmonische Näherung: $O(u^3)$ vernachlässigt:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0 + \frac{1}{2}\Phi u^2$$
(5.13)

Auf- und Absteige-Operatoren:

$$a = \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\hbar}}\,u + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\,\omega}}\,p \qquad \qquad a^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\hbar}}\,u - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\,\omega}}\,p \qquad (5.14)$$

Mit $[p, u] = -i\hbar$

$$[a, a^{\dagger}] = 1 \tag{5.15}$$



Mit (5.14)

$$u = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}} \left(a^{\dagger} + a\right) \qquad p = i\,\sqrt{\frac{\hbar m\,\omega}{2}} \left(a^{\dagger} - a\right) \tag{5.16}$$

Mit $\omega = \sqrt{\Phi/m}$

$$H = \hbar \,\omega \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) + V_0 \tag{5.17}$$

Grundzustand: $|0\rangle$ mit $H|0\rangle = E_0|0\rangle$ mit $E_0 > V_0$. Betrachte den Zustand $a|0\rangle$:

$$H a |0\rangle = a \left(H - \hbar\omega\right) |0\rangle = \left(E_0 - \hbar\omega\right) a |0\rangle$$
(5.18)

Damit wäre $|0\rangle$ nicht mehr Grundzustand, es sei denn $a|0\rangle$ ist nicht physikalisch. Dies ist der Fall für $a|0\rangle = 0$, da dieser Zustand dann keine endliche Norm besitzt. Grundzustand:

$$H |0\rangle = \left(\frac{1}{2}\hbar\,\omega + V_0\right)|0\rangle \qquad \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\,\omega + V_0 \qquad (5.19)$$

Angeregte Zustände

$$|n\rangle = c_n \left(a^{\dagger}\right)^n |0\rangle \tag{5.20}$$

Mit (5.15)

$$H a^{\dagger} = a^{\dagger} \left(H + \hbar \, \omega \right) \tag{5.21}$$

und

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle = \left((n+\frac{1}{2})\hbar\,\omega + V_0\right)|n\rangle$$
(5.22)

Besetzungszahloperator: $\hat{n} = a^{\dagger} a$ $\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle$

Normierung:

$$\langle n|n\rangle = c_n^2 \langle 0|a^n \, a^{\dagger \, n}|0\rangle = n \, c_n^2 \, \langle 0|a^{n-1} \, a^{\dagger \, n-1}|0\rangle = n \frac{c_n^2}{c_{n-1}^2} \, \langle n-1|n-1\rangle \tag{5.23}$$

$$\langle n|n\rangle = 1 \quad \text{für} \quad c_n = 1/\sqrt{n!}$$

$$\frac{1}{\sqrt{n+1}} a^{\dagger}|n\rangle = |n+1\rangle \qquad \qquad \frac{1}{\sqrt{n}} a|n\rangle = |n-1\rangle$$

$$(5.24)$$

$$5 \quad 28.10.02$$

5.3 Phononen im Kristall

Mehratomiger Kristall:

i: Zelle μ : Atom in Zelle α : Raumrichtung Ortskoordinaten:

$$X^{i}_{\alpha} = R^{i}_{\alpha} + s_{\alpha} + u^{i}_{\alpha}$$
(5.25)

Impulse: p_{α}^{i}



Hamiltonoperator:

$$H_{ph} = \sum_{i,\mu,\alpha} \frac{\left(p_{\alpha}^{i}\right)^{2}}{2m_{\mu}} + W\left(\left\{X_{\alpha}^{i}\right\}\right)$$
(5.26)

Harmonische Näherung:

$$W\left(\left\{X_{\alpha}^{i}\right\}\right) \approx W_{0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\alpha\beta} \Phi_{\alpha\beta}^{ij} \Psi_{\alpha}^{i} U_{\alpha}^{j} \Psi_{\beta}^{j}$$
(5.27)

Translations invariante Kräfte: $W(\{X_{\alpha}^{i}\}) = W(\{X_{\alpha}^{i} + \bar{u}_{\alpha}\})$. Entwicklung in erster Ordnung in \bar{u}

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j}\sum_{\mu,\nu}\sum_{\alpha\beta} \Phi^{ij}_{\mu\nu} u^{i}_{\alpha\beta} \bar{u}^{i}_{\alpha\beta} \bar{u}_{\beta} = 0 \qquad \qquad \sum_{j,\nu} \Phi^{ij}_{\alpha\beta} = 0 \qquad (5.28)$$

Vertauschungsrelation:

$$\left[p^{i}_{\alpha}, u^{j}_{\beta}\right] = -i\hbar\,\delta_{i,j}\delta_{\mu,\nu}\delta_{\alpha,\beta} \qquad \left[p^{i}_{\alpha}, p^{j}_{\beta}\right] = 0 \qquad \left[u^{i}_{\alpha}, u^{j}_{\beta}\right] = 0 \qquad (5.29)$$

1. kanonische Transformation (nur für mehratomige Gitter notwendig)

$$\pi^{i}_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} p^{i}_{\alpha} \qquad \xi^{i}_{\alpha} = \sqrt{m_{\mu}} u^{i}_{\alpha} \qquad \Psi^{ij}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}m_{\nu}}} \Phi^{ij}_{\alpha\beta} \qquad (5.30)$$

$$\left[\pi_{\alpha}^{i},\xi_{\beta}^{j}\right] = -i\hbar\,\delta_{i,j}\delta_{\mu,\nu}\delta_{\alpha,\beta} \qquad \cdots \qquad (5.31)$$

Hamiltonoperator (mit $W_0 = 0$)

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_{i,\mu,\alpha} \left(\pi^{i}_{\alpha} \right)^{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\alpha\beta} \Psi^{ij}_{\mu\nu} \xi^{i}_{\alpha} \xi^{j}_{\beta}$$
(5.32)

2. kanonische Transformation

Betrachte einen Kristall mit $N = L^3$ Elementarzellen (periodische Randbedingungen). Mögliche Wellenvektoren (n_a ganzzahlig):

$$\vec{k} = \sum_{\alpha} \frac{n_{\alpha}}{L} \vec{b}_{\alpha} \qquad \qquad n_{\alpha} = -\frac{1}{2}L \cdots \frac{1}{2}L \qquad (5.33)$$

Kanonische Transformation

$$\pi(\vec{k},\lambda) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,\mu,\alpha} \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda) e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \pi^i_{\alpha} \qquad \xi(\vec{k},\lambda) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,\mu,\alpha} \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda) e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \xi^i_{\alpha} \qquad (5.34)$$

Mit $\lambda = 1 \cdots 3z$ für einen Kristall mit z Atomen in der Elementarzelle ($\mu = 1 \cdots z$) und unitärem $\eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k}, \lambda)$

$$\sum_{\mu,\alpha} \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda)^* \, \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda') = \delta_{\lambda,\lambda'} \tag{5.35}$$

Vertauschungsrelation:

$$\left[\pi^{\dagger}(\vec{k},\lambda),\,\xi(\vec{k}',\lambda')\,\right] = -i\hbar\,\delta_{\vec{k},\vec{k}}\,\delta_{\lambda,\lambda'}\qquad \cdots \qquad (5.36)$$

Mit

$$\pi^{i}_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},\lambda} \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda)^{*} \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{i}} \pi(\vec{k},\lambda) \qquad \qquad \xi^{i}_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},\lambda} \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda)^{*} \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{i}} \xi(\vec{k},\lambda) \quad (5.37)$$

Hamiltonoperator

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\lambda} \pi^{\dagger}(\vec{k},\lambda) \pi(\vec{k},\lambda)$$

+
$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\lambda,\lambda'} \sum_{\mu,\nu,\alpha,\beta} D^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(\vec{k}) \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda) \eta^{\nu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda')^{*} \xi^{\dagger}(\vec{k},\lambda) \xi(\vec{k},\lambda')$$
(5.38)

mit "dynamischer Matrix"

$$D^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \Psi^{ij}_{\alpha\beta}$$
(5.39)

Eigenwertgleichung:

$$\sum_{\nu,\beta} D^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(\vec{k}) \eta^{\nu}_{\beta}(\vec{k},\lambda) = \omega^2(\vec{k},\lambda) \eta^{\mu}_{\alpha}(\vec{k},\lambda)$$
(5.40)

Damit

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\lambda} \left\{ \pi^{\dagger}(\vec{k},\lambda) \pi(\vec{k},\lambda) + \omega^{2}(\vec{k},\lambda) \xi^{\dagger}(\vec{k},\lambda) \xi(\vec{k},\lambda) \right\}$$
(5.41)

Der Hamiltonoperator ist eine Summe aus zN unabhängigen harmonischen Oszillatoren. Phononen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) = \sqrt{\frac{\omega(\vec{k},\lambda)}{2\hbar}} \xi^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}} \pi^{\dagger}(\vec{k},\lambda)$$
$$a(\vec{k},\lambda) = \sqrt{\frac{\omega(\vec{k},\lambda)}{2\hbar}} \xi(\vec{k},\lambda) - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}} \pi(\vec{k},\lambda)$$
(5.42)

Hamiltonoperator

$$H_{ph} = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \omega(\vec{k},\lambda) \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) a(\vec{k},\lambda) + \frac{1}{2} \right\}$$
(5.43)

Grundzustand: $a(\vec{k},\lambda) \left| 0 \right\rangle = 0$

Angeregte Zustände sind durch Besetzungszahlen $\left\{n(\vec{k},\lambda)\right\}$ charakterisiert

$$|\{n\}\rangle = \prod_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\sqrt{n(\vec{k},\lambda)!}} \left(a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)\right)^{n(\vec{k},\lambda)} |0\rangle$$
(5.44)

$$H_{ph}|\{n\}\rangle = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega(\vec{k},\lambda) \left\{ n(\vec{k},\lambda) + \frac{1}{2} \right\} |\{n\}\rangle$$
(5.45)

Die Besetzungszahldarstellung, i.e. die Angabe mit wieviel Quanten jeder mögliche Zustand besetzt ist, ist eine Darstellung der Quantenmechanik, die für Vielteilchensysteme (oder auch Quantenfeldtheorien) besonders geeignet ist.

5.4 Lineare Kette

Einatomige lineare Kette

$$\Phi^{i,i} = 2\Phi$$
 $\Phi^{i,i\pm 1} = -\Phi$ $\Phi^{i,j} = 0$ für $|i-j| \ge 2$ (5.46)

Dynamische Matrix (5.39): Gitterkonstante a: $R^i = i a$

$$D(k) = \omega^2(k) = \frac{1}{m} \sum_{j} e^{i k (R^i - R^j)} \Phi^{ij} = \frac{2\Phi}{m} \left\{ 1 - \cos(ka) \right\}$$
(5.47)



Zweiatomige lineare Kette



$$\Phi^{i,i}_{1,2} = \Phi^{i,i+1}_{2,1} = -\Phi$$

$$\Phi^{i,i}_{1,1} = \Phi^{i,i}_{2,2} = 2\Phi$$
 (5.49)

$$\Psi_{1,1}^{i,i} = \frac{2\Phi}{m_1} \qquad \qquad \Psi_{2,2}^{i,i} = \frac{2\Phi}{m_2} \qquad \qquad \Psi_{1,2}^{i,i} = \Psi_{2,1}^{i,i+1} = -\frac{\Phi}{\sqrt{m_1 m_2}} \qquad (5.50)$$

Dynamische Matrix:

$$D_{\mu,\nu}(k) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i \, k (R^i - R^j)} \Psi_{\mu,\nu}^{i,j}$$
(5.51)

$$\mathbf{D}(k) = \begin{pmatrix} \frac{2\Phi}{m_1} & \{1 + e^{i\,k\,a}\}\frac{-\Phi}{\sqrt{m_1m_1}} \\ \{1 + e^{-i\,k\,a}\}\frac{-\Phi}{\sqrt{m_1m_1}} & \frac{2\Phi}{m_2} \end{pmatrix}$$
(5.52)

Eigenwertgleichung: $\|\mathbf{D}(k) - \omega^2(k)\| = 0$

$$\omega^{2}(k) = \Phi\left\{\frac{m_{1} + m_{2}}{m_{1} m_{2}} \pm \sqrt{\left(\frac{m_{1} - m_{2}}{m_{1} m_{2}}\right)^{2} + 4\frac{\cos^{2}(\frac{1}{2} k a)}{m_{1} m_{2}}}\right\}$$
(5.53)



5.5 Langwelliger Grenzfall, Schall

Einatomiger Kristall mit Inversionssymmetrie:

$$D_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = \frac{1}{m} \sum_{j \ (\neq i)} \left\{ e^{-i \vec{k} \cdot \vec{R}^{i,j}} - 1 \right\} \Phi_{\alpha,\beta}^{i,j}$$

$$= \frac{1}{m} \sum_{j \ (\neq i)} \left\{ i \sum_{\gamma} k_{\gamma} \mathcal{R}_{\gamma}^{i,j-0} - \frac{1}{2} \sum_{\gamma \delta} k_{\gamma} k_{\delta} \mathcal{R}_{\gamma}^{i,j} \mathcal{R}_{\delta}^{i,j} \right\} \Phi_{\alpha,\beta}^{i,j} + \mathcal{O}(k^{4})$$

$$= \frac{1}{m} \sum_{\gamma,\delta} Z_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} k_{\gamma} k_{\delta}$$
(5.54)

mit $\vec{R}^{i,j} = \vec{R}^i - \vec{R}^j$. Der Beitrag linear in k verschwindet wegen $\vec{R}^{i,j} = -\vec{R}^{i,-j}$.

$$Z_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} = -\frac{1}{2m} \sum_{j \ (\neq i)} \Phi_{\alpha,\beta}^{i,j} R_{\gamma}^{i,j} R_{\delta}^{i,j}$$
(5.55)

Schallgeschwindigkeit: $\omega(\vec{k}, \lambda) = c(\vec{n}_{k,\lambda}) |\vec{k}|$ mit $\vec{n}_{k} = \vec{k}/|\vec{k}|$. Eigenwertgleichung:

$$\sum_{\beta} \left(\frac{1}{m} \sum_{\gamma \delta} Z_{\alpha \beta \gamma \delta} \, n_{\gamma} \, n_{\delta} \right) \eta_{\beta}(\vec{n}, \lambda) = c^{2}(\vec{n}, \lambda) \, \eta_{\alpha}(\vec{n}, \lambda) \tag{5.56}$$

Symmetrie:

$$Z_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} = Z_{\beta,\alpha,\gamma,\delta} = Z_{\alpha,\beta,\delta,\gamma} = Z_{\beta,\alpha,\delta,\gamma}$$
(5.57)

Rotationsinvarianz: Betrachte Auslenkungen

$$u_{\alpha}^{i} = \sum_{\gamma} \left\{ \eta_{\alpha,\gamma} + \omega_{\alpha,\gamma} \right\} R_{\gamma}^{ij}$$
(5.58)

mit "Verzerrung" $\eta_{\alpha,\gamma} = \eta_{\gamma,\alpha}$ und "infinitesimalen Rotation" $\omega_{\alpha,\gamma} = -\omega_{\gamma,\alpha}$. Die potentielle Energie darf nur von η und nicht von ω abhängen, also z.B.

$$\sum_{j \ (\neq i)} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \Phi_{\alpha,\beta}^{i,j} R_{\gamma}^{ij} R_{\delta}^{ij} \omega_{\alpha,\gamma} \eta_{\beta,\delta} = 0$$
(5.59)

Daraus folgt als weitere Symmetrie

$$Z_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} = Z_{\gamma,\beta,\alpha,\delta} = Z_{\alpha,\delta,\gamma,\beta} = Z_{\gamma,\delta,\alpha,\beta}$$
(5.60)

Weitere Einschränkungen folgen aus Kristallsymmetrien (Spiegelungen, Drehungen um $2\pi/n$ für Drehung um eine *n*-zählige Symmetrieachse).

Kubischer Kristall:

$$Z_{1111} = Z_{2222} = Z_{3333} = Z_{11}$$

$$Z_{1122} = Z_{1133} = Z_{2211} = \dots = Z_{12}$$

$$Z_{1212} = Z_{1221} = Z_{1313} = \dots = Z_{44}$$

$$Z_{\alpha\beta\gamma\delta} = 0 \qquad \text{sonst} \qquad (5.61)$$

Dynamische Matrix D(\vec{k}), Polarisationsvektoren $\eta_{\alpha}(\vec{k}'\lambda)$ und Eigenwerte c^2 für $\vec{k} = (1,0,0) k$

$$\mathbf{D}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} Z_{11} & 0 & 0 \\ 0 & Z_{12} & 0 \\ 0 & 0 & Z_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1 & 0 & 0) \\ (0 & 1 & 0) \\ (0 & 0 & 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_{11}/m & L \\ Z_{12}/m & T \\ Z_{12}/m & T \end{pmatrix}$$
(5.62)

$$\begin{aligned} & \text{für } \vec{k} = (1,1,0)/\sqrt{2} \, k \\ & \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(Z_{11}+Z_{12}) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(Z_{11}+Z_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & Z_{12} \end{pmatrix} \\ & \begin{pmatrix} (1 \ 1 \ 0 \)/\sqrt{2} & (Z_{11}+Z_{12}+2Z_{44})/2m & L \\ (1 \ -1 \ 0 \)/\sqrt{2} & (Z_{11}+Z_{12}-2Z_{44})/2m & T \\ (0 \ 0 \ 1 \) & Z_{12}/m & T \end{aligned}$$
(5.63)

für $\vec{k}=(1,1,1)/\sqrt{3}\,k$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{3}(Z_{11}+2Z_{12}) & \frac{2}{3}Z_{44} & \frac{2}{3}Z_{44} \\ \frac{2}{3}Z_{44} & \frac{1}{3}(Z_{11}+2Z_{12}) & \frac{2}{3}Z_{44} \\ \frac{2}{3}Z_{44} & \frac{2}{3}Z_{44} & \frac{1}{3}(Z_{11}+2Z_{12}) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (1 \ 1 \ 1 \ 1 \)/\sqrt{3} & (Z_{11}+2Z_{12}+2Z_{44})/3m & L \\ (1 \ -1 \ 0 \)/\sqrt{2} & (Z_{11}+2Z_{12}-2Z_{44})/3m & T \\ (2 \ -1 \ -1 \)/\sqrt{6} & (Z_{11}+2Z_{12}-2Z_{44})/3m & T \end{pmatrix}$$
(5.64)

Phononenspektrum

z.B. Argon (kubisch flächenzentriert)



5.6 Inelastische Streuung von Neutronen oder γ -Quanten



Hamiltonoperator (einatomiger Kristall)

$$H = H_n + H_{ph} + \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \sum_i b_i \,\delta(\vec{r_n} - \vec{R^i} - \vec{u^i})$$
(5.65)

Inelastische Streuung mit Energieübertrag $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n} - \frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m_n} = E' - E$ Differentieller Streuquerschnitt:

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} = \frac{\hbar}{4\pi} \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} W_{\vec{k}_n,\vec{k}'_n}$$
(5.66)

Streuwahrscheinlichkeit (Bornsche Näherung):

$$W_{\vec{k}_{n},\vec{k}_{n}'} = \sum_{E} \sum_{E'} P(E) W_{\vec{k}_{n}E,\vec{k}_{n}'E'}$$

= $\sum_{E} \sum_{E'} P(E) \delta\left(\frac{\hbar^{2}k_{n}^{2}}{2m_{n}} + E - \frac{\hbar^{2}k_{n}'^{2}}{2m_{n}} - E'\right)$
 $\times \left|\langle \vec{k}_{n}', E' | \frac{2\pi\hbar^{2}}{m_{n}} \sum_{i} b_{i} \delta(\vec{r}_{n} - \vec{R}^{i} - \vec{u}^{i}) | \vec{k}_{n}, E \rangle\right|^{2}$ (5.67)

Kohärente Streuung: $b_i = b$

Übergangsamplitude:

$$\langle \vec{k}_n', E' | \sum_i \delta(\vec{r}_n - \vec{R}^i - \vec{u}^i) | \vec{k}_n, E \rangle = \int d^3 r \, e^{i(\vec{k}_n' - \vec{k}_n) \cdot \vec{r}} \langle E' | \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{R}^i - \vec{u}^i) | E \rangle$$
$$= \sum_i e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{R}^i} \langle E' | e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{u}^i} | E \rangle \qquad \text{mit} \qquad \vec{\kappa} = \vec{k}_n' - \vec{k}_n \qquad (5.68)$$

Phonon Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$u_{\alpha}^{i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}^{i}}}{\sqrt{2m\omega(\vec{k},\lambda)}} \eta_{\alpha}(\vec{k},\lambda) \Big\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(-\vec{k},\lambda) \Big\}$$
(5.69)

Kristallzustand

$$|E\rangle = |\{n\}\rangle \qquad \hat{n}(\vec{k}'\lambda)|\{n\}\rangle = n(\vec{k}'\lambda)|\{n\}\rangle \qquad E = \sum_{\vec{k}'\lambda} \{n(\vec{k}'\lambda) + \frac{1}{2}\}\hbar\omega(\vec{k}'\lambda)$$
(5.70)

Entwicklung nach 0-, 1- und Mehrphonon Prozessen

$$e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{u}^{i}} = 1 + \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\vec{\kappa}\cdot\vec{\eta}(\vec{k},\lambda) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}^{i}}}{\sqrt{2m\omega(\vec{k},\lambda)}} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(-\vec{k},\lambda) \right\} - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k},\lambda} \sum_{\vec{k}',\lambda'} \frac{\vec{\kappa}\cdot\vec{\eta}(\vec{k},\lambda) \vec{\kappa}\cdot\vec{\eta}(\vec{k}',\lambda') e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{R}^{i}}}{2m\sqrt{\omega(\vec{k},\lambda)\omega(\vec{k}',\lambda')}} \times \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(-\vec{k},\lambda) \right\} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda') + a(-\vec{k}',\lambda') \right\} + \cdots$$
(5.71)

O-Phonon Prozeß: (Bragg-Streuung)

$$E' = E$$
 $\vec{k}_n = \vec{k}_n - \vec{k}_n = \vec{\tau}_\ell$ $|\vec{k}_n| = |\vec{k}_n'|$ (5.72)

$$W_{\vec{k}_n,\vec{k}_n'}^{(0)} = b^2 \,\delta\left(\frac{\hbar^2 \,k_n'^2}{2m_n} - \frac{\hbar^2 \,k_n^2}{2m_n}\right) \,\sum_{\ell} \delta\left(\vec{\kappa} - \vec{\tau}_{\ell}\right) \tag{5.73}$$

<u>1-Phonon Prozeß:</u>

"Stokes"-Beitrag

$$a^{\dagger}(\vec{k}'\lambda)|\{n\}\rangle = \sqrt{n(\vec{k}'\lambda) + 1} |E'\rangle \qquad E' = E + \hbar\omega(\vec{k}'\lambda)$$

$$\vec{\kappa} = \vec{k}'_n - \vec{k}_n = \vec{k} + \vec{\tau_{\ell}} \qquad \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n} + \hbar\omega(\vec{k}'\lambda) \qquad (5.74)$$

"Anti Stokes"-Beitrag

$$a(\vec{k}'\lambda)|\{n\}\rangle = \sqrt{n(\vec{k}'\lambda)} |E'\rangle \qquad E' = E - \hbar\omega(\vec{k}'\lambda)$$

$$\vec{\kappa} = \vec{k}'_n - \vec{k}_n = -\vec{k} + \vec{\tau_\ell} \qquad \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n} - \hbar\omega(\vec{k}'\lambda) \qquad (5.75)$$

Mit thermischen Erwartungswert

$$\sum_{E,E'} P(E) \left| \left\langle E' \right| \frac{a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)}{a(\vec{k},\lambda)} \left| E \right\rangle \right|^2 = \left\{ \begin{array}{c} \left\langle n(\vec{k},\lambda) + 1 \right\rangle \\ \left\langle n(\vec{k},\lambda) \right\rangle \end{array} \right\}$$
(5.76)

Übergangswahrscheinlichkeit für 1-Phonon Prozeß:

$$W_{\vec{k}_{n},\vec{k}_{n}'}^{(\pm1)} = b^{2} \sum_{\vec{k},\lambda} \delta\left(\frac{\hbar^{2} k_{n}'^{2}}{2m_{n}} - \frac{\hbar^{2} k_{n}^{2}}{2m_{n}} \mp \hbar\omega(\vec{k},\lambda)\right) \sum_{\ell} \delta\left(\vec{\kappa} - \vec{\tau}_{\ell} \mp \vec{k}\right)$$

$$\times \frac{\left(\vec{\kappa} \cdot \vec{\eta}(\vec{k},\lambda)\right)^{2}}{2m\omega(\vec{k},\lambda)} \left\{ \begin{cases} \left\langle n(\vec{k},\lambda) + 1 \right\rangle \\ \left\langle n(\vec{k},\lambda) \right\rangle \end{cases} \right\}$$
(5.77)

Messung der Phononenergie: $\hbar\omega(\vec{k},\lambda) = \left|\frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m_n} - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n}\right|$

Messung der Polarisation: $\vec{\kappa} \cdot \vec{\eta}(\vec{k}, \lambda)$ mit $\vec{\kappa} = \vec{k} + \vec{\tau}_{\ell}$: $\vec{\tau}_{\ell} = 0$: longitudinal. $\vec{\tau}_{\ell} \neq 0$: longitudinal oder transversal.

2-Phonon Prozeß:

Elastischer 2-Phonon Prozeß: $\vec{k}' = -\vec{k}$ und $\lambda' = \lambda$ in (5.71): Mit

$$w = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\left(\vec{\kappa} \cdot \vec{\eta}(\vec{k},\lambda)\right)^2}{2 \, m \, \omega(\vec{k},\lambda)} \left\{ n(\vec{k},\lambda) + \frac{1}{2} \right\} = \frac{1}{3} \left\langle |\vec{u}^i|^2 \right\rangle \, |\vec{\kappa}|^2 \tag{5.78}$$

ist $W^{(2,el)}_{\vec{k}_n,\vec{k}'_n} = -\frac{1}{3} \langle |\vec{u}^{\,i}|^2 \rangle \ |\vec{\kappa}|^2 \ W^{(0)}_{\vec{k}_n,\vec{k}'_n}.$

Entsprechende Beiträge in elastischen 4-, 6- und höheren 2n-Phonon Prozessen können aufsummiert werden: Debye-Waller Faktor

$$W_{\vec{k}_{n},\vec{k}_{n}'}^{(0)} = b^{2} e^{-\frac{1}{3} \left\langle |\vec{u}^{\,i}|^{2} \right\rangle |\vec{\kappa}|^{2}} \, \delta\left(\frac{\hbar^{2} k_{n}^{\prime 2}}{2m_{n}} - \frac{\hbar^{2} k_{n}^{2}}{2m_{n}}\right) \, \sum_{\ell} \delta\left(\vec{\kappa} - \vec{\tau}_{\ell}\right) \tag{5.79}$$

Entsprechende Korrekturen existieren auch für die 1-Phonon und höheren Prozesse. Entsprechend ist der Debye-Waller Faktor auch in (5.77) einzufügen. Inelastische 2-Phonon Beiträge:

 $=\pm\hbar\omega(\vec{k},\lambda)\pm\hbar\omega(\vec{k}',\lambda')$

 $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_n^{\prime 2}}{2m_n} - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n}$

$$\vec{\kappa} + \vec{\tau}_{\ell} = \pm \vec{k} \pm \vec{k}' \tag{5.80}$$



5.7 Inkohärente Streuung, Mössbauer-Effekt

(5.81)

Die Streulänge b_i kann von Kern zu Kern variieren, z.B falls verschiedene Isotope vorhanden sind oder bei magnetischer Streuung an Ionen mit Spin, der nicht ausgerichtet ist. Es sei

$$\overline{b_i} = b$$
 und $\overline{(b_i - b)(b_j - b)} = b_{inc}^2 \,\delta_{i,j}$ (5.82)

Inkohärenter Streuquerschnitt, mit (5.67):

$$W_{\vec{k}_{n},\vec{k}_{n}'}^{(inc)} = \sum_{E} \sum_{E'} P(E) \,\delta\left(\frac{\hbar^{2} k_{n}^{2}}{2m_{n}} + E - \frac{\hbar^{2} k_{n}'^{2}}{2m_{n}} - E'\right) \\ \times b_{inc}^{2} \sum_{i} \left|\langle \vec{k}_{n}', E' | \,\delta(\vec{r}_{n} - \vec{R}^{i} - \vec{u}^{i}) | \vec{k}_{n}, E \rangle\right|^{2}$$

$$= \sum_{E} \sum_{E'} P(E) \,\delta\left(\frac{\hbar^{2} k_{n}^{2}}{2m_{n}} + E - \frac{\hbar^{2} k_{n}'^{2}}{2m_{n}} - E'\right) b_{inc}^{2} \sum_{i} \left|\langle E' | e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{u}^{i}} | E \rangle\right|^{2}$$
(5.83)

Beiträge zu 0-, 1- und Mehrphonon Prozessen wie für kohärente Streuung, aber ohne $\sum_{\ell} \delta(\vec{\kappa} - \vec{\tau}_{\ell} - \cdots)$.

Aus dem 0-Phononprozeß erält man den Debye-Waller Faktor, aus dem 1-Phononprozeß die Zustandsdichte longitudinaler Phononen.

Beim <u>Mössbauer-Effekt</u> wird ein γ -Quant von einem radioaktiven Kern emittiert. Ein Teil der ursprünglichen Energie $\hbar \hat{\omega}_{\gamma}$ kann als Rückstoßenergie an den Kristall abgegeben werden. Die Rechnung entspricht der obigen für inkohärente Streuung mit $\vec{k} = 0$ und einer δ -Funktion für Energieerhaltung $\delta(E + \hbar \hat{\omega} - E' - \hbar c |\vec{k}'|)$. Der 0-Phononprozeß entspricht einer rückstoßenergiefreien Emission des γ -Quants.

6 Spinwellen in Ferromagneten

Hamilton-Operator eines isotropen Heisenberg-Ferromagneten:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \,\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \tag{6.1}$$

z.B. mit $J_{i,j} = J > 0$ für nächste Nachbarn und $J_{i,j} = 0$ sonst. Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

mit

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \qquad \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x \qquad \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y \qquad (6.3)$$

Eigenzustände zu σ_z

$$\sigma_{z}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \qquad \sigma_{z}|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \qquad (6.4)$$

Spinflip-Operatoren $\sigma_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\sigma_x \pm i \sigma_y \right)$

$$\sigma_{+}|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \qquad \sigma_{+}|\uparrow\rangle = 0 \qquad \sigma_{-}|\downarrow\rangle = 0 \qquad \sigma_{-}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \tag{6.5}$$

Hamilton-Operator

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \left\{ \sigma_z^i \sigma_z^j + 2\sigma_+^i \sigma_-^j + 2\sigma_-^i \sigma_+^j \right\}$$
(6.6)

Grundzustand für N Spins auf einem Gitter mit z nächsten Nachbarn (entartet)

$$|0\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\downarrow\rangle \qquad \sigma_{-}^{i}|0\rangle = 0 \qquad H|0\rangle = E_{0}|0\rangle = -zNJ|0\rangle \qquad (6.7)$$

Spinwellen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\sigma_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}^{i}} \sigma_{\pm}^{i}$$
(6.8)

Mit obigen Relationen:

$$\left[H, \sigma_{+}(\vec{k})\right] = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}^{i}} \sigma_{+}^{i} \sum_{j} J_{i,j} \left\{\sigma_{z}^{i}\sigma_{z}^{j} - e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}^{i}-\vec{R}^{j})} \left(1 - 2\sigma_{+}^{j}\sigma_{-}^{j}\right)\right\}$$
(6.9)

Damit ist für einen 1-Spinwellenzustand (mit $\sigma_z^i \sigma_z^j | 0 \rangle = | 0 \rangle$ und $(\sigma_+^j \sigma_-^j | 0 \rangle = 0)$

$$H\sigma_{+}(\vec{k})|0\rangle = \sigma_{+}(\vec{k})H|0\rangle + \left[H,\sigma_{+}(\vec{k})\right]|0\rangle = \left\{E_{0} + \epsilon(\vec{k})\right\}\sigma_{+}(\vec{k})|0\rangle$$
(6.10)

mit einer Anregungsenergie

$$\epsilon(\vec{k}) = 2\sum_{j} J_{i,j} \left\{ 1 - \cos\left(\vec{k} \cdot \vec{R}^{ij}\right) \right\}$$
(6.11)

Die 1-Spinwellen Anregungen sind Eigenzustände zu H. Dies ist für Mehr-Spinwellen-Zustände nur näherungsweise erfüllt.

III STATISTISCHE PHYSIK VON QUASITEILCHEN

7 Phononen (Bosonen)

7.1 Besetzungszahldarstellung

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\left[a(\vec{k},\lambda),a(\vec{k}',\lambda')\right] = 0 \qquad \left[a^{\dagger}(\vec{k},\lambda),a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda')\right] = 0 \tag{7.1}$$

$$\left[a(\vec{k},\lambda),a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda')\right] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\,\delta_{\lambda,\lambda'} \tag{7.2}$$

Besetzungszahloperator

$$\hat{n}(\vec{k},\lambda) = a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) a(\vec{k},\lambda)$$
(7.3)

Hamilton-Operator

$$H = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \omega(\vec{k},\lambda) \left\{ \hat{n}(\vec{k},\lambda) + \frac{1}{2} \right\}$$
(7.4)

Grundzustand, angeregte Zustände

$$a(\vec{k},\lambda)|0\rangle = 0 \qquad |\{n\}\rangle = \prod_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\sqrt{n(\vec{k},\lambda)!}} \left(a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)\right)^{n(\vec{k},\lambda)}|0\rangle \qquad (7.5)$$

Eigenzustände zu den Besetzungszahloperatoren

$$\hat{n}(\vec{k},\lambda) |\{n\}\rangle = n(\vec{k},\lambda) |\{n\}\rangle$$
(7.6)

$$H|\{n\}\rangle = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega(\vec{k},\lambda) \left\{ n(\vec{k},\lambda) + \frac{1}{2} \right\} |\{n\}\rangle$$
(7.7)

Die Zustände $|\{n\}\rangle$ bilden eine vollständige Basis.

9 11.11.02

7.2 Zustandssumme, Freie Energie, Spezifische Wärme

Zustandssumme: $(\beta = 1/k_BT)$

$$Z = \operatorname{Tr} e^{-\beta H}$$

$$= \sum_{n(\vec{k}_{1},\lambda_{1})=0}^{\infty} \cdots \sum_{n(\vec{k}_{N},\lambda_{(3\,z)})=0}^{\infty} \left\langle \{n\} \middle| e^{-\beta H} \middle| \{n\} \right\rangle$$

$$= \sum_{n(\vec{k}_{1},\lambda_{1})=0}^{\infty} \cdots \sum_{n(\vec{k}_{N},\lambda_{(3\,z)})=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar \sum_{\vec{k},\lambda} \omega(\vec{k},\lambda) \{n(\vec{k},\lambda)+\frac{1}{2}\}}$$

$$= \prod_{\vec{k},\lambda} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(\vec{k},\lambda) \{n+\frac{1}{2}\}} \right\} = \prod_{\vec{k},\lambda} \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}}$$
(7.8)

Freie Energie

$$F = -k_B T \ln Z = \sum_{\vec{k},\lambda} \left\{ \frac{1}{2} \hbar \omega(\vec{k},\lambda) + k_B T \ln \left(1 - e^{-\beta \hbar \omega(\vec{k},\lambda)} \right) \right\}$$
(7.9)

Entropie

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -k_B \sum_{\vec{k},\lambda} \left\{ \ln \left(1 - e^{-\beta \hbar \omega(\vec{k},\lambda)} \right) - \frac{\beta \hbar \omega(\vec{k},\lambda)}{e^{\beta \hbar \omega(\vec{k},\lambda)} - 1} \right\}$$
(7.10)

Energie

$$E = F + TS = \sum_{\vec{k},\lambda} \left\{ \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega(\vec{k},\lambda)} - 1} + \frac{1}{2} \right\} \hbar\,\omega(\vec{k},\lambda) \tag{7.11}$$

Spezifische Wärme

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = k_B \sum_{\vec{k},\lambda} \beta^2 \hbar^2 \omega^2(\vec{k},\lambda) \frac{\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}}{\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}\right)^2}$$
(7.12)

Es ist zweckmäßig die Zustandsdichte (pro Elementarzelle) einzuführen

$$g(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k},\lambda} \delta\left(\epsilon - \hbar\omega(\vec{k},\lambda)\right) = v \int_{B.Z.} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \delta\left(\epsilon - \hbar\omega(\vec{k},\lambda)\right)$$
(7.13)

mit v: Volumen der Einheitszelle und $v_{B.Z.} = (2\pi)^3/v$: Volumen der Brillouin-Zone. Pro Elementarzelle gibt es 3z Freiheitsgrade: Normierung:

$$\int \mathrm{d}\epsilon \, g(\epsilon) = 3 \, z \tag{7.14}$$

Spezifische Wärme (pro Elementarzelle)

$$c = \frac{C}{N} = k_B \int d\epsilon \, g(\epsilon) \beta^2 \epsilon^2 \frac{e^{-\beta\epsilon}}{\left(1 - e^{-\beta\epsilon}\right)^2}$$
(7.15)

Für hohe Temperaturen $\beta \epsilon_{max} \ll 1$: Klassischer Gleichverteilungssatz

$$c = 3 z k_B \tag{7.16}$$

Für tiefe Temperaturen: $\omega(\vec{k},\lambda) \rightarrow k c_{\lambda}(\Omega)$

$$g(\epsilon) = \frac{v}{2\pi^2} \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi} \int \mathrm{d}k \, k^2 \sum_{\lambda} \delta\left(\epsilon - \hbar \, k \, c_{\lambda}(\Omega)\right)$$
$$= \frac{v}{2\pi^2} \frac{\epsilon^2}{\hbar^3} \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi} \sum_{\lambda} \frac{1}{c_{\lambda}^3(\Omega)} \approx \frac{v}{2\pi^2} \frac{\epsilon^2}{\hbar^3} \left\{\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3}\right\}$$
(7.17)

Spezifische Wärme bei tiefer Temperatur, mit $x = \beta \epsilon$ in (7.15)

$$c = k_B^4 T^3 \frac{v}{2\pi^2} \frac{1}{\hbar^3} \left\{ \frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right\} \int_0^\infty dx \, x^4 \frac{e^{-x}}{\left(1 - e^{-x}\right)^2}$$
$$= \frac{2\pi^2}{15} \frac{k_B^4}{\hbar^3} v \left\{ \frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right\} T^3$$
(7.18)

Debye Näherung (einatomiger Kristall)

Die Debye-Temperatur $\Theta_D = \hbar \omega_D / k_B$ wird aus der Normierung (7.14) bestimmt:

$$\Theta_D = \sqrt[3]{\frac{18\,\pi^2\,\hbar^3}{\left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3}\right)v^2k_B^3}}\tag{7.20}$$

Damit ist

$$g(\epsilon) = \frac{9}{k_B^3 \Theta_D^3} \epsilon^2 \quad \text{für} \quad \epsilon < k_B \Theta_D \qquad g(\epsilon) = 0 \quad \text{für} \quad \epsilon > k_B \Theta_D \tag{7.21}$$

Spezifische Wärme

$$c = 9 k_B \frac{T^3}{\Theta_D^3} \int_0^{\Theta_D/T} dx \, x^4 \frac{e^{-x}}{\left(1 - e^{-x}\right)^2}$$
$$\xrightarrow[T \ll \Theta_D]{} \frac{12}{5} \pi^4 \frac{T^3}{\Theta_D^3} k_B \qquad \xrightarrow[T \gg \Theta_D]{} 3 k_B \qquad (7.22)$$



Debye Temperatur:	$\Theta_D[\mathbf{K}]$
He	20
Pb	88
Na	127
NaCl	281
Al	394
Si	674
C(Diamant)	1860



10 13.11.02

7.3 Wärmeleitung

Transportvorgänge auf makroskopischer Skala, Boltzmanngleichung

 $\label{eq:Feldoperatoren} \mbox{Feldoperatoren} \mbox{ (Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren) für Wellenpakete mit Breite Δ (Gitterkonstante $<\Delta < $<$ makroskopische Skala$)}$

$$a^{\dagger}(\vec{r},\vec{k},\lambda) = \left(\frac{\Delta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \mathrm{d}^{3}\kappa \ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Delta^{2} (\vec{k}-\vec{\kappa})^{2}} \ \mathrm{e}^{i(\vec{k}-\vec{\kappa})\cdot\vec{r}} a^{\dagger}(\vec{\kappa},\lambda)$$
$$a(\vec{r},\vec{k},\lambda) = \left(\frac{\Delta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \mathrm{d}^{3}\kappa \ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Delta^{2} (\vec{k}-\vec{\kappa})^{2}} \ \mathrm{e}^{-i(\vec{k}-\vec{\kappa})\cdot\vec{r}} a(\vec{\kappa},\lambda)$$
(7.23)

Besetzungszahloperator

$$\hat{n}(\vec{r},\vec{k},\lambda) = a^{\dagger}(\vec{r},\vec{k},\lambda) a(\vec{r},\vec{k},\lambda)$$
(7.24)

(7.26)

Hamilton Operator

$$H = \stackrel{\circ}{H} + V \qquad \stackrel{\circ}{H} = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \omega(\vec{k},\lambda) \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) a(\vec{k},\lambda) + \frac{1}{2} \right\}$$
(7.25)

Heisenberg-Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{i}{\hbar}[H, \hat{A}]$

$\begin{array}{l} \underline{\text{Ungestörtes Problem:}} & H \approx \stackrel{\circ}{H} \\ \hline \text{Mit } [\stackrel{\circ}{H}, a^{\dagger}(\vec{k}, \lambda)] = \hbar \omega(\vec{k}, \lambda) \ a^{\dagger}(\vec{k}, \lambda) \ \text{und } [\stackrel{\circ}{H}, a(\vec{k}, \lambda)] = -\hbar \omega(\vec{k}, \lambda) \ a(\vec{k}, \lambda) \\ \\ \frac{i}{\hbar} \left[\stackrel{\circ}{H}, a^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, \lambda) \right] = i \left(\frac{\Delta}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int \mathrm{d}^{3} \kappa \ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Delta^{2} (\vec{k} - \vec{\kappa})^{2}} \ \mathrm{e}^{i(\vec{k} - \vec{\kappa}) \cdot \vec{r}} \ \omega(\vec{\kappa}, \lambda) \ a^{\dagger}(\vec{\kappa}, \lambda) \end{array}$

Entwicklung:

$$\omega(\vec{\kappa},\lambda) = \omega(\vec{k},\lambda) + (\vec{\kappa}-\vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k},\lambda) \cdots \quad \text{mit} \quad \vec{v}(\vec{k},\lambda) = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \, \omega(\vec{k},\lambda) \quad (7.27)$$

Damit:

$$\frac{i}{\hbar} \begin{bmatrix} \mathring{H}, a^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, \lambda) \end{bmatrix} = \left\{ i \,\omega(\vec{k}, \lambda) - \vec{v}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\nabla}_r \right\} a^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, \lambda)$$
$$\frac{i}{\hbar} \begin{bmatrix} \mathring{H}, a(\vec{r}, \vec{k}, \lambda) \end{bmatrix} = \left\{ -i \,\omega(\vec{k}, \lambda) - \vec{v}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\nabla}_r \right\} a(\vec{r}, \vec{k}, \lambda)$$
(7.28)

und

$$\frac{i}{\hbar} \left[\stackrel{\circ}{H}, \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, \lambda) \right] = -\vec{v}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\nabla}_r \, \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, \lambda) \tag{7.29}$$

Verteilungsfunktion (Boltzmann-Verteilung)

$$f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = \left\langle \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, \lambda) \right\rangle_t$$
(7.30)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{0} f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = -\vec{v}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\nabla}_{r} f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t)$$
(7.31)

Energiedichte

$$\rho_E(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \,\omega(\vec{k},\lambda) \,f(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) \tag{7.32}$$

Energiestromdichte

$$\vec{j}_E(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda} \vec{v}(\vec{k},\lambda) \hbar \,\omega(\vec{k},\lambda) \,f(\vec{r},\vec{k},\lambda,t)$$
(7.33)

Kontinuitätsgleichung (Energie Erhaltung)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{0}\rho_{E}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}_{r}\cdot\vec{j}_{E}(\vec{r},t)$$
(7.34)

Zeitliche Änderung der Energiestromdichte

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{0} j_{E,\alpha}(\vec{r},t) = -\sum_{\beta} \nabla_{\beta} \pi_{E,\alpha,\beta}(\vec{r},t)$$
(7.35)

$$\pi_{E,\alpha,\beta}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda} v_{\alpha}(\vec{k},\lambda) v_{\beta}(\vec{k},\lambda) \hbar \,\omega(\vec{k},\lambda) \,f(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) \approx \frac{1}{3} \overline{v^2} \,\delta_{\alpha,\beta} \,\rho_E(\vec{r},t) \tag{7.36}$$

Zeitliche Entwicklung des gestörten Problems: Fermi's goldene Regel:

Anfangszustand $|\,i\,\rangle,$ Endzustand $|\,f\,\rangle\,$ (Eigenzustände zu $\overset{\circ}{H}$), Störung V Übergangsrate

$$W_{i,f} = \frac{1}{\hbar} \,\delta(\overset{\circ}{E}_{i} - \overset{\circ}{E}_{f}) \left| \left\langle f \,|\, V \,|\, i\,\right\rangle \right|^{2} \tag{7.37}$$

Zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes einer Observablen $\langle A(t) \rangle = \sum_i \langle i | A | i \rangle P_i(t)$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{V} \langle A(t) \rangle = \sum_{i,f} \left\{ \langle f | A | f \rangle - \langle i | A | i \rangle \right\} P_{i}(t) W_{i,f}$$
(7.38)

Elastische Streuung an Verunreinigungen: (z.B. nicht isotopenreine Kristalle)

Verunreinigung am Ort \vec{r}

$$V = \sum_{\vec{k}',\lambda',\vec{k}'',\lambda''} w(\vec{k}',\lambda',\vec{k}'',\lambda'') \left\{ a^{\dagger}(\vec{r},\vec{k}',\lambda') a(\vec{r},\vec{k}'',\lambda'') + a(\vec{r},\vec{k}',\lambda') a^{\dagger}(\vec{r},\vec{k}'',\lambda'') \right\}$$
(7.39)

In der folgenden Rechnung werden wir das Argument " \vec{r} " weglassen. Es sei $A = \hat{n}(\vec{k}, \lambda), |i\rangle = |\{n\}\rangle$ und $|f\rangle = |\{n'\}\rangle$.

Nicht verschwindende Beiträge in (7.38) für $n'(\vec{k},\lambda) = n(\vec{k},\lambda) \pm 1$ und für einen weiteren Zustand $\{\vec{k}',\lambda'\}$ mit $\omega(\vec{k}',\lambda') = \omega(\vec{k},\lambda)$ $n'(\vec{k}',\lambda') = n(\vec{k}',\lambda') \mp 1$. Damit

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t}\Big|_{V} \left\langle \hat{n}(\vec{k},\lambda) \right\rangle_{t} &= \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{\vec{k}',\lambda'} \delta\left(\omega(\vec{k}',\lambda') - \omega(\vec{k},\lambda) \right) \left| w(\vec{k}',\lambda',\vec{k},\lambda) \right|^{2} \\ & \left\{ \left\langle a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda')a(\vec{k},\lambda)\hat{n}(\vec{k},\lambda)a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)a(\vec{k}',\lambda') \right\rangle_{t} \\ & + \left\langle a(\vec{k}',\lambda')a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)\hat{n}(\vec{k},\lambda)a(\vec{k}',\lambda')\hat{n}(\vec{k},\lambda') \right\rangle_{t} \\ & - \left\langle a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda')a(\vec{k},\lambda)a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)a(\vec{k}',\lambda')\hat{n}(\vec{k},\lambda) \right\rangle_{t} \\ & - \left\langle a(\vec{k}',\lambda')a^{\dagger}(\vec{k},\lambda)a(\vec{k},\lambda)a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda')\hat{n}(\vec{k},\lambda) \right\rangle_{t} \right\} \\ &= \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{\vec{k}',\lambda'} \delta\left(\omega(\vec{k}',\lambda') - \omega(\vec{k},\lambda) \right) \left| w(\vec{k}',\lambda',\vec{k},\lambda) \right|^{2} \\ & \left\{ \left\langle \left(\hat{n}(\vec{k},\lambda) + 1 \right) \hat{n}(\vec{k}',\lambda') \right\rangle_{t} - \left\langle \hat{n}(\vec{k},\lambda) \left(\hat{n}(\vec{k}',\lambda') + 1 \right) \right\rangle_{t} \right\} \end{split}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{V} f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{\vec{k}', \lambda'} \delta\left(\omega(\vec{k}', \lambda') - \omega(\vec{k}, \lambda)\right) \left|w(\vec{k}', \lambda', \vec{k}, \lambda)\right|^{2} \left\{f(\vec{r}, \vec{k}', \lambda', t) - f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t)\right\}$$
(7.41)

Stationäre Lösung:

$$f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = f_0((\omega(\vec{k}, \lambda)))$$
(7.42)

Abweichung vom lokalen Gleichgewicht:

$$f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = f_0 \left((\omega(\vec{k}, \lambda)) + g(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) \right)$$
(7.43)

mit $f_0(\omega)$ so daß

$$\sum_{\vec{k},\lambda} \delta\left(\omega - \omega(\vec{k},\lambda)\right) f(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) = f_0(\omega) \sum_{\vec{k},\lambda} \delta\left(\omega - \omega(\vec{k},\lambda)\right)$$
(7.44)

und damit

$$\sum_{\vec{k}',\lambda'} \delta\left(\omega - \omega(\vec{k},\lambda)\right) g(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) = 0$$
(7.45)

Stoßzahlansatz: Für $w(\vec{k}', \lambda', \vec{k}, \lambda) = w_0$ verschwindet der Beitrag $\sim g(\vec{r}, \vec{k}', \lambda', t)$ in (7.41), damit

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{V} g(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = -\frac{1}{\tau} g(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t)$$
(7.46)

mit der mittleren Stoßfrequenz

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\vec{k}',\lambda'} \delta\left(\omega(\vec{k}',\lambda') - \omega(\vec{k},\lambda)\right) \left|w(\vec{k}',\lambda',\vec{k},\lambda)\right|^2$$
(7.47)

Die Annahme einer konstanten Stoßfrequenz ist nicht notwendig, vereinfacht aber die folgende Rechnung deutlich.

Energiedichte (7.32)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{V} \rho_{E}(\vec{r},t) = 0$$
(7.48)

Zeitliche Änderung der Energiestromdichte in Relaxationszeitnäherung

$$\vec{j}_E(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda} \vec{v}(\vec{k},\lambda) \,\hbar\,\omega(\vec{k},\lambda) \,g(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) \qquad \frac{\partial}{\partial t} \bigg|_V \vec{j}_E(\vec{r},t) = -\frac{1}{\tau} \,\vec{j}_E(\vec{r},t) \quad (7.49)$$

Wärmeleitung

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_E(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}_r \cdot \vec{j}_E(\vec{r},t)$$
(7.50)

Energiestrom (Wärmestrom)

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{j}_E(\vec{r},t) = -\frac{1}{3}\overline{v^2}\,\vec{\nabla}\,\rho_E(\vec{r},t) - \frac{1}{\tau}\vec{j}_E(\vec{r},t) \tag{7.51}$$

Stationärer Fall mit (Spezifische Wärme c)

$$\delta \rho_E(\vec{r}) = c \,\delta T(\vec{r}) \tag{7.52}$$

Wärmeleitung

$$\vec{j}_E(\vec{r}) = -\kappa \,\vec{\nabla} \,T(\vec{r}) \qquad \kappa = \frac{1}{3} \overline{v^2} \,\tau \,c \tag{7.53}$$

Anharmonische Wechselwirkung

$$V = \frac{1}{12} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \Phi^{i,j}_{\alpha,\beta,\gamma} \left(u^i_\alpha - u^j_\alpha \right) \left(u^i_\beta - u^j_\beta \right) \left(u^i_\gamma - u^j_\gamma \right)$$
(7.54)

mit

$$u_{\alpha}^{i} - u_{\alpha}^{j} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},\lambda} \eta_{\alpha}(\vec{k},\lambda) \left\{ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{i}} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{j}} \right\} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\vec{k},\lambda)}} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(-\vec{k},\lambda) \right\}$$
(7.55)

Damit erhält man

$$V_{3} = \frac{1}{3!} \sum_{\vec{k},\lambda,\vec{k}',\lambda',\vec{k}'',\lambda''} w(\vec{k},\lambda,\vec{k}',\lambda',\vec{k}'',\lambda'') \sum_{\ell} \delta(\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}''-\vec{\tau}_{\ell})$$
(7.56)

$$\times \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(-\vec{k},\lambda) \right\} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k}',\lambda') + a(-\vec{k}',\lambda') \right\} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k}'',\lambda'') + a(-\vec{k}'',\lambda'') \right\}$$

und entsprechend der vorherigen Rechnung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\Big|_{V_{3}} &\langle \hat{n}(\vec{k},\lambda) \rangle_{t} = \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{\vec{k}',\lambda',\vec{k}'',\lambda''} \left\{ \delta \left(\omega(\vec{k},\lambda) - \omega(\vec{k}',\lambda') - \omega(\vec{k}'',\lambda'') \right) \\ &\times \left| w(\vec{k},\lambda,-\vec{k}',\lambda',-\vec{k}'',\lambda'') \right|^{2} \sum_{\ell} \delta(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}''+\vec{\tau}_{\ell}) \\ &\times \left[\left\langle \left(\hat{n}(\vec{k},\lambda) + 1 \right) \hat{n}(\vec{k}',\lambda') \hat{n}(\vec{k}'',\lambda'') \right\rangle_{t} \\ &- \left\langle \hat{n}(\vec{k},\lambda) \left(\hat{n}(\vec{k}',\lambda') + 1 \right) \left(\hat{n}(\vec{k}'',\lambda'') + 1 \right) \right\rangle_{t} \right] \\ &+ \delta \left(\omega(\vec{k},\lambda) - \omega(\vec{k}',\lambda') + \omega(\vec{k}'',\lambda'') \right) \\ &\times \left| w(\vec{k},\lambda,-\vec{k}',\lambda',+\vec{k}'',\lambda'') \right|^{2} \sum_{\ell} \delta(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{k}''+\vec{\tau}_{\ell}) \\ &\times \left[\left\langle \left(\hat{n}(\vec{k},\lambda) + 1 \right) \hat{n}(\vec{k}',\lambda') \left(\hat{n}(\vec{k}'',\lambda'') + 1 \right) \right\rangle_{t} \right] \right\} \end{aligned}$$
(7.57)

Faktorisierungsnäherung

$$\left\langle \hat{n}(\vec{k},\lambda)\,\hat{n}(\vec{k}',\lambda')\,\hat{n}(\vec{k}'',\lambda'')\right\rangle_{t} = f(\vec{r},\vec{k},\lambda,t)\,f(\vec{r},\vec{k}',\lambda',t)\,f(\vec{r},\vec{k}'',\lambda'',t)$$
(7.58)

Damit ist

$$\frac{\partial}{\partial t} \Big|_{V_{3}} f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) = \frac{1}{\hbar^{2}_{\vec{k}', \lambda', \vec{k}'', \lambda''}} \left\{ \delta \left(\omega(\vec{k}, \lambda) - \omega(\vec{k}', \lambda') - \omega(\vec{k}'', \lambda'') \right) \right. \\
\times \Big| w(\vec{k}, \lambda, -\vec{k}', \lambda', -\vec{k}'', \lambda'') \Big|^{2} \sum_{\ell} \delta(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{k}'' + \vec{\tau}_{\ell}) \\
\times \Big[\Big(f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) + 1 \Big) f(\vec{r}, \vec{k}', \lambda', t) f(\vec{r}, \vec{k}'', \lambda'', t) \\
- f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) \Big(f(\vec{r}, \vec{k}', \lambda', t) + 1 \Big) \Big(f(\vec{r}, \vec{k}'', \lambda'', t) + 1 \Big) \Big] \\
+ \delta \Big(\omega(\vec{k}, \lambda) - \omega(\vec{k}', \lambda') + \omega(\vec{k}'', \lambda'') \Big) \\
\times \Big| w(\vec{k}, \lambda, -\vec{k}', \lambda', +\vec{k}'', \lambda'') \Big|^{2} \sum_{\ell} \delta(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{k}'' + \vec{\tau}_{\ell}) \\
\times \Big[\Big(f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) + 1 \Big) f(\vec{r}, \vec{k}', \lambda', t) \Big(f(\vec{r}, \vec{k}'', \lambda'', t) + 1 \Big) \\
- f(\vec{r}, \vec{k}, \lambda, t) \Big(f(\vec{r}, \vec{k}', \lambda', t) + 1 \Big) f(\vec{r}, \vec{k}'', \lambda'', t) \Big] \Big\}$$
(7.59)

Stationäre Verteilung: Langsam veränderliche Temperatur $T(\vec{r},t)$

$$f_0(\vec{k},\lambda) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\vec{r},t)\hbar\omega(\vec{k},\lambda)} - 1} \qquad f_0(\vec{k},\lambda) + 1 = \frac{\mathrm{e}^{\beta(\vec{r},t)\hbar\omega(\vec{k},\lambda)}}{\mathrm{e}^{\beta(\vec{r},t)\hbar\omega(\vec{k},\lambda)} - 1} \tag{7.60}$$

Relaxationszeitnäherung

$$f(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) = f_0(\vec{k},\lambda) + g(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) \qquad \frac{\partial}{\partial t} \bigg|_{V_3} g(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) = -\frac{1}{\tau} g(\vec{r},\vec{k},\lambda,t) \quad (7.61)$$

Normalprozesse: $\tau_{\ell} = \vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{k}'' = 0$ Umklapprozesse: $\tau_{\ell} = \vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{k}'' \neq 0$.

Temperaturabhängigkeit der Relaxationszeit für Umklapprozesse: Typische Wellenzahl der beteiligten Phononen $|\vec{k}| + |\vec{k'}| + |\vec{k''}| \ge |\vec{\tau_\ell}|$. Typische Frequenz $\hbar \overline{\omega} \sim k_B \Theta_D$. Damit ist

$$\tau_U \sim \mathrm{e}^{\Theta_D/T} \tag{7.62}$$

i.e. für tiefe Temperaturen verschwindet der Beitrag der Umklapprozesse und die mittlere freie Weglänge $\ell = \overline{v} \tau_U$ wächst bei tiefen Temperaturen ebenfalls stark an. Die Wärmeleitung (7.53) wächst bei tiefen Temperaturen ebenfalls $\sim T^3 e^{\Theta_D/T}$ stark an. Bei sehr tiefen Temperaturen ist die Wärmeleitung durch Streuung an Verunreinigungen oder durch

Streuung an den Oberflächen des Kristalls begrenzt, und damit $\kappa \sim c \sim T^3$.



Für $T \gg \Theta_D$ ist $\tau_U \sim T^{-2}$ und c konstant. Damit wird $\kappa \sim T^{-2}$.

8

An Normalprozessen können Phononen beliebiger Wellenzahl teilnehmen, sie sind damit bei tiefen Temperaturen nicht stark unterdrückt. Für $\tau_V \gg \tau_N$ und $\tau_U \gg \tau_N$ ist auch die Summe der Wellenvektoren erhalten und

$$f_{\vec{u}}^{(0)}(\vec{k},\lambda) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\{\omega(\vec{k},\lambda) - \vec{u}\cdot\vec{k}\}} - 1} = f_0(\omega(\vec{k},\lambda) - \vec{u}\cdot\vec{k})$$
(7.63)

ist stationär.

Für kleine \vec{u} ist

$$f_{\vec{u}}^{(0)}(\vec{k},\lambda) \approx \left\{ 1 - \vec{u} \cdot \vec{k} \frac{\partial}{\partial \omega} \right\} f_0(\omega) \Big|_{\omega(\vec{k},\lambda)}$$
(7.64)

und mit (7.27)

$$\vec{v}(\vec{k},\lambda) f_{\vec{u}}^{(0)}(\vec{k},\lambda) \approx \left\{ \vec{v}(\vec{k},\lambda) - \left(\vec{u}\cdot\vec{k}\right)\vec{\nabla}_{\vec{k}} \right\} f_0(\omega(\vec{k},\lambda))$$
(7.65)

Mit (7.33) erhält man nach partieller Integration die Energiestromdichte

$$j_{E,\alpha} = -\sum_{\beta} u_{\beta} \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \,\omega(\vec{k},\lambda) \,k_{\beta} \frac{\partial}{\partial \,k_{\alpha}} f_0 \Big(\omega(\vec{k},\lambda) \Big)$$
$$= u_{\alpha} \stackrel{\circ}{\rho}_E + \sum_{\beta} u_{\beta} \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \,v_{\alpha}(\vec{k},\lambda) \,k_{\beta} \,f_0 \Big(\omega(\vec{k},\lambda) \Big)$$
$$\approx \frac{4}{3} \,u_{\alpha} \stackrel{\circ}{\rho}_E \tag{7.66}$$

wobei die letzte Zeile für tiefe Temperaturen gilt, da hier nur langwellige Phononen mit $\omega(\vec{k},\lambda) \approx \vec{k} \cdot \vec{v}(\vec{k},\lambda)$ beitragen. Unter Vernachlässigung von Verunreinigungsstreuung und Streuung durch Umklapprozesse kann ein Energiestrom (Wärmestrom) ohne Temperaturgradient auftreten, i.e. der Wärmeleitungskoeffizient κ divergiert.

Für die Verteilung (7.63) verschwindet der Beitrag aufgrund der Störung und (7.35) gilt für die gesamte zeitliche Änderung. Mit (7.34) erhält man eine Wellengleichung für die Energiedichte

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho_E(\vec{r}, t) = \frac{1}{3} \overline{v^2} \,\Delta \rho_E(\vec{r}, t) \tag{7.67}$$

Dieses Phänomen, 2.Schall, konnte in NaJ beobachtet werden, und tritt auch in super-fluidem He^4 auf.

8 Elektronen (Fermionen)

8.1 Besetzungszahldarstellung für Fermionen

Einteilchenzustände $|\vec{k}, n, s\rangle$ mit Wellenvektor \vec{k} , Bandindex n, Spin sEinteilchenenergien $H_1 |\vec{k}, n, s\rangle = \epsilon(\vec{k}, n, s) |\vec{k}, n, s\rangle$ Vielteilchenzustand $|(\vec{k}_1, n_1, s_1), (\vec{k}_2, n_2, s_2), \cdots, (\vec{k}_N, n_N, s_N)\rangle$ Energie für nicht wechselwirkende Teilchen

$$H \left| (\vec{k}_{1}, n_{1}, s_{1}), (\vec{k}_{2}, n_{2}, s_{2}), \cdots, (\vec{k}_{N}, n_{N}, s_{N}) \right\rangle$$

= $\sum_{i=1}^{N} \epsilon(\vec{k}_{i}, n_{i}, s_{i}) \left| (\vec{k}_{1}, n_{1}, s_{1}), (\vec{k}_{2}, n_{2}, s_{2}), \cdots, (\vec{k}_{N}, n_{N}, s_{N}) \right\rangle$ (8.1)

Fermi Statistik

$$\left|\cdots, (\vec{k}_i, n_i, s_i), \cdots, (\vec{k}_j, n_j, s_j), \cdots\right\rangle = -\left|\cdots, (\vec{k}_j, n_j, s_j), \cdots, (\vec{k}_i, n_i, s_i), \cdots\right\rangle \quad (8.2)$$

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen $c^{\dagger}(\vec{k}, n, s)$ und $c(\vec{k}, n, s)$ Vakuum (Kein Fermion)

$$c(\vec{k},n,s) \mid 0 \rangle = 0 \tag{8.3}$$

Vielteilchenzustand

$$\left| (\vec{k}_1, n_1, s_1), (\vec{k}_2, n_2, s_2), \cdots, (\vec{k}_N, n_N, s_N) \right\rangle$$

= $c^{\dagger}(\vec{k}_1, n_1, s_1) c^{\dagger}(\vec{k}_2, n_2, s_2) \cdots c^{\dagger}(\vec{k}_N, n_N, s_N) \mid 0 \rangle$ (8.4)

Fermi-Statistik (Pauli Prinzip)

$$c^{\dagger}(\vec{k},n,s) c^{\dagger}(\vec{k}',n',s') = -c^{\dagger}(\vec{k}',n',s') c^{\dagger}(\vec{k},n,s)$$
(8.5)

Antikommutator $\{c, c'\} = c c' + c' c$

$$\left\{ c^{\dagger}(\vec{k},n,s), c^{\dagger}(\vec{k}',n',s') \right\} = 0 \qquad \left\{ c(\vec{k},n,s), c(\vec{k}',n',s') \right\} = 0 \\ \left\{ c^{\dagger}(\vec{k},n,s), c(\vec{k}',n',s') \right\} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \, \delta_{n,n'} \, \delta_{s,s'}$$

$$(8.6)$$

Speziell für $(\vec{k'}, n', s') = (\vec{k}, n, s)$: Pauli Prinzip

$$c^{\dagger}(\vec{k},n,s) c^{\dagger}(\vec{k},n,s) = 0$$
 $c(\vec{k},n,s) c(\vec{k},n,s) = 0$ (8.7)

Besetzungszahloperator

$$\hat{n}(\vec{k},n,s) = c^{\dagger}(\vec{k},n,s) c(\vec{k},n,s) \qquad 1 - \hat{n}(\vec{k},n,s) = c(\vec{k},n,s) c^{\dagger}(\vec{k},n,s)$$
(8.8)

Eigenwerte des Besetzungszahloperators: $n(\vec{k}, n, s) = \{1, 0\}$

Hamilon-Operator für nicht wechselwirkende Fermionen

$$H = \sum_{\vec{k},n,s} \epsilon(\vec{k},n,s) \,\hat{n}(\vec{k},n,s) \tag{8.9}$$

Gesamtteilchenzahl

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k},n,s} \hat{n}(\vec{k},n,s)$$
(8.10)

8.2 Großkanonische Gesamtheit, Grundzustand

Zustandssumme (Temperatur T, Volumen V, chemisches Potential μ)

$$Z(T, V, \mu) = \text{Tr } e^{-\beta (H-\mu \hat{N})}$$

$$= \prod_{\vec{k}, n, s} \left(\sum_{n(\vec{k}, n, s)=0}^{1} \right) \left\langle \{n\} | e^{-\beta (H-\mu \hat{N})} | \{n\} \right\rangle = \prod_{\vec{k}, n, s} \left\{ 1 + e^{-\beta \{\epsilon(\vec{k}, n, s)-\mu\}} \right\}$$
(8.11)

Großkanonisches Potential

$$J(T, V, \mu) = -k_B T \ln Z(T, V, \mu) = -k_B T \sum_{\vec{k}, n, s} \ln \left(1 + e^{-\beta \{ \epsilon(\vec{k}, n, s) - \mu \}} \right)$$
(8.12)

Teilchenzahl

$$N = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \sum_{\vec{k}, n, s} \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\{\epsilon(\vec{k}, n, s) - \mu\}} + 1} = \sum_{\vec{k}, n, s} \left\langle \hat{n}(\vec{k}, n, s) \right\rangle$$
(8.13)

Energie

$$E = J - T\frac{\partial J}{\partial T} + \mu N = \sum_{\vec{k}, n, s} \frac{\epsilon(\vec{k}, n, s)}{\mathrm{e}^{\beta\{\epsilon(\vec{k}, n, s) - \mu\}} + 1} = \sum_{\vec{k}, n, s} \epsilon(\vec{k}, n, s) \left\langle \hat{n}(\vec{k}, n, s) \right\rangle \tag{8.14}$$

Mittlere Besetzungszahl

$$\left\langle \hat{n}(\vec{k},n,s) \right\rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\{\epsilon(\vec{k},n,s)-\mu\}} + 1}$$
 (8.15)

<u>Grundzustand:</u> $T \rightarrow 0$: Fermienergie $\mu = \epsilon_F$

$$\left\langle \hat{n}(\vec{k},n,s)\right\rangle \xrightarrow[T\to0]{} \left\{ \begin{array}{c} 1\\ \\ 0 \end{array} \right\} \quad \text{für} \quad \left\{ \begin{array}{c} \epsilon(\vec{k},n,s) < \mu\\ \\ \epsilon(\vec{k},n,s) > \mu \end{array} \right\}$$
(8.16)

Fermiflächen:



14 27.11.02

μ

Ê

8.3 Spezifische Wärme bei tiefen Tempeaturen

Zustandsdichte pro Volumen

$$g(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, n, s} \delta\left(\epsilon - \epsilon(\vec{k}, n)\right)$$
(8.17)

Energie

Teilchenzahl

$$E = V \int d\epsilon \, g(\epsilon) \, \frac{\epsilon}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \qquad \qquad N = V \int d\epsilon \, g(\epsilon) \, \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \tag{8.18}$$

Grundzustandsenergie

$$E_0 = V \int d\epsilon \, g(\epsilon) \, \epsilon \, \Theta(\mu - \epsilon) \qquad \qquad N_0 = V \int d\epsilon \, g(\epsilon) \, \Theta(\mu - \epsilon) \tag{8.19}$$

Es sei

$$f(x) = \frac{1}{e^x + 1} - \Theta(-x)$$
 (

mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = 0 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx x f(x) = \frac{\pi^2}{6} \quad (8.21)$$

Entwicklung für tiefe Temperaturen:

$$g(\epsilon) = g(\mu) + (\epsilon - \mu) g'(\mu) + \cdots$$
(8.22)

Damit:

$$N - N_0 \approx V \int d\epsilon \{ g(\mu) + (\epsilon - \mu) g'(\mu) \} f(\beta(\epsilon - \mu))$$

= $\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 V g'(\mu)$
$$E - E_0 \approx \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 V \{ g(\mu) + \mu g'(\mu) \}$$
 (8.23)

Beachte: Bei fester Teilchenzahl ist $\mu = \mu(T) \ \mu(0) = \epsilon_F$

$$N_0(\mu) \approx N_0(\epsilon_F) + Vg(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F) \qquad E_0(\mu) \approx E_0(\epsilon_F) + V\epsilon_F g(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F)$$
(8.24)

Mit
$$N = N_0(\epsilon_F)$$

$$N = N_0(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 V g'(\mu) = N + V g(\epsilon_F) (\mu - \epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 V g'(\epsilon_F)$$
 (8.25)

$$\mu - \epsilon_F = -\frac{\pi^2}{6} \left(k_B T\right)^2 \frac{g'(\epsilon_F)}{g(\epsilon_F)}$$
(8.26)

Damit

$$E(T, V, N) = E(0, V, N) + \frac{\pi^2}{6} Vg(\epsilon_F) (k_B T)^2$$
(8.27)

Spezifische Wärme

$$c = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{\pi^2}{3} \frac{V}{N} g(\epsilon_F) k_B^2 T$$
(8.28)


Suszeptibilität:

In einem Magnetfeld B: (Gyromagnetisches Verhältnis $g_{el} = 2.02$, Bor'sches Magneton μ_B , magnetisches Moment $m = g_{el}\mu_B s$)

$$\epsilon(\vec{k}, n, s) = \epsilon(\vec{k}, n) - g_{el}\mu_B \, s \, B \tag{8.29}$$

Magnetisierung, Suszeptibilität

$$M = \frac{1}{2} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) g_{el} \mu_B B \qquad \chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_{T,N,V}$$
(8.30)

Für T = 0

$$\chi = \frac{1}{4} \left(g_{el} \mu_B \right)^2 V g(\epsilon_F) \tag{8.31}$$

Damit hat man eine zweite Methode zur Bestimmung der Zustandsdichte $g(\epsilon_F)$ an der Fermikante.

Zustandsdichte

$$g(\mu) = \int_{B.Z.} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \sum_{n,s} \delta(\epsilon(\vec{k}, n) - \mu)$$
(8.32)

Betrachte Schicht im *k*-Raum mit $\mu < \epsilon(\vec{k}, n) < \mu + \delta \mu$ Dicke der Schicht $\delta \mu = \vec{n}(\vec{k}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}, n) \delta k$. Damit ist

$$g(\epsilon_F) = 2\sum_n \int_{F_n} \frac{\mathrm{d}^2 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\left|\vec{n}(\vec{k}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}, n)\right|}$$
(8.33)



Freie Elektronen

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \qquad \vec{n}(\vec{k}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \ \epsilon(\vec{k}, n) = \frac{\hbar^2 k}{m} \qquad (8.34)$$

$$g(\epsilon) = \frac{k m}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{\sqrt{2m^3}}{\hbar^3 \pi^2} \sqrt{\epsilon}$$
(8.35)

Elektronendichte

$$\frac{N_0}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 = \int_0^{\epsilon_F} \mathrm{d}\epsilon \, g(\epsilon) = \frac{2}{3} \, g(\epsilon_F) \, \epsilon_F \tag{8.36}$$

Fermitemperatur: $\Theta_F = \epsilon_F/k_B$ Spezifische Wärme

$$c = \frac{\pi^2}{2} \frac{N}{V} k_B \frac{T}{\Theta_F}$$
(8.37)

Beispiel: Natrium: $\Theta_F = 37\,700\,K$ Aluminium: $\Theta_F = 136\,000\,K$

8.4 Elektrische Leitfähigkeit, Wärmeleitung

Darstellung eines Einteilchenoperators \hat{A} (z.B. Einteilchenenergie $\overset{\circ}{H}$)

$$\hat{A} = \sum_{\vec{k}, n, \vec{k}', n'} c^{\dagger}(\vec{k}, n, s) \left\langle \vec{k}, n, s \right| A \left| \vec{k}', n', s' \right\rangle c(\vec{k}', n', s')$$
(8.38)

Speziell: Funktion des Ortes

$$\hat{\Phi} = \sum_{i} \Phi(\vec{x}_{i}) \qquad \left\langle \vec{k}, n, s \right| \Phi(\vec{x}) \left| \vec{k}', n', s' \right\rangle = \int d^{3}r \; \varphi^{*}_{\vec{k}, n}(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}', n'}(\vec{r}) \, \delta_{s, s'}$$
(8.39)

Lokale Feldoperatoren, mit (4.7)

$$\psi^{\dagger}(\vec{r},s) = \sum_{\vec{k},n} \varphi^{*}_{\vec{k},n}(\vec{r}) c^{\dagger}(\vec{k},n,s) = \sum_{\vec{k},n} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} u^{*}_{\vec{k},n}(\vec{r}) c^{\dagger}(\vec{k},n,s)$$
$$\psi(\vec{r},s) = \sum_{\vec{k},n} \varphi_{\vec{k},n}(\vec{r}) c(\vec{k},n,s) = \sum_{\vec{k},n} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k},n}(\vec{r}) c(\vec{k},n,s)$$
(8.40)

Antikommutatoren

$$\left\{\psi^{\dagger}(\vec{r},s),\psi^{\dagger}(\vec{r}',s')\right\} = 0 \qquad \left\{\psi(\vec{r},s),\psi(\vec{r}',s')\right\} = 0 \tag{8.41}$$

$$\left\{\psi^{\dagger}(\vec{r},s),\psi(\vec{r}',s')\right\} = \delta(\vec{r}-\vec{r}')\,\delta_{s,s'}$$
(8.42)

Damit

$$\hat{\Phi} = \int \mathrm{d}^3 r \, \sum_s \, \psi^{\dagger}(\vec{r}, s) \Phi(\vec{r}) \psi(\vec{r}, s) \tag{8.43}$$

Darstellung eines Zweiteilchenoperators \hat{W} (z.B. Wechselwirkung)

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} W(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$

= $\frac{1}{2} \int dr \, dr' \sum_{s,s'} \psi^{\dagger}(\vec{r},s) \psi^{\dagger}(\vec{r}',s') W(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}',s') \psi(\vec{r},s)$ (8.44)
15 2.12.02

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Wellenpakete, siehe (7.23) und (4.7)

$$c^{\dagger}(\vec{r},\vec{k},n,s) = \left(\frac{\Delta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^{3}\kappa \ e^{-\frac{1}{2}\Delta^{2}(\vec{k}-\vec{\kappa})^{2}} \ e^{i(\vec{k}-\vec{\kappa})\cdot\vec{r}} \ c^{\dagger}(\vec{\kappa},n,s)$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\Delta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^{3}\kappa \ e^{-\frac{1}{2}\Delta^{2}(\vec{k}-\vec{\kappa})^{2}} \int d^{3}r' \ e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} u_{\vec{\kappa},n}(\vec{r}')\psi^{\dagger}(\vec{r}',s)$$

$$\approx (2\pi\Delta)^{-\frac{3}{2}} \int d^{3}r' \ e^{-\frac{1}{2\Delta^{2}}(\vec{r}-\vec{r}')^{2}} \ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} u_{\vec{k},n}(\vec{r}')\psi^{\dagger}(\vec{r}',s)$$

$$c(\vec{r},\vec{k},n,s) = \left(\frac{\Delta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^{3}\kappa \ e^{-\frac{1}{2}\Delta^{2}(\vec{k}-\vec{\kappa})^{2}} \ e^{-i(\vec{k}-\vec{\kappa})\cdot\vec{r}} \ c(\vec{\kappa},n,s)$$

$$\approx (2\pi\Delta)^{-\frac{3}{2}} \int d^{3}r' \ e^{-\frac{1}{2\Delta^{2}}(\vec{r}-\vec{r}')^{2}} \ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} u_{\vec{k},n}^{*}(\vec{r}')\psi(\vec{r}',s)$$
(8.45)

wobei $u_{\vec{\kappa},n}(\vec{r}') \approx u_{\vec{k},n}(\vec{r}')$ gesetzt wurde.

Besetzungszahloperator:

$$\hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) = c^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) c(\vec{r}, \vec{k}, n, s)$$
(8.46)

Hamiltonoperator in Gegenwart eines langsam veränderlichen Potentials $\Phi(\vec{r})$

$$\overset{\circ}{H} = \sum_{\vec{k},n,s} c^{\dagger}(\vec{k},n,s) \epsilon(\vec{k},n,s) + \int d^3r \sum_{s} \psi^{\dagger}(\vec{r},s) \Phi(\vec{r}) \psi(\vec{r},s)$$
(8.47)

Zur Berechnung von $[\overset{\circ}{H}, \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, n, s)]$: Für langsam veränderliches Potential (Skala $L \gg \Delta$ wird $\Phi(\vec{r}')$ um $\Phi(\vec{r})$ entwickelt

$$\begin{split} \left[\hat{\Phi}, c^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, n, s)\right] &= (2\pi\Delta)^{-\frac{3}{2}} \int \mathrm{d}^{3}r' \,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2\Delta^{2}}(\vec{r} - \vec{r}\,')^{2}} \,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} \,u_{\vec{k}, n}(\vec{r}\,')\psi^{\dagger}(\vec{r}\,', s) \,\Phi(\vec{r}\,') \\ &\approx \left\{\Phi(\vec{r}) - \left(\vec{r} + i\vec{\nabla}_{\vec{k}}\right) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \,\Phi(\vec{r})\right\} c^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \\ \left[\hat{\Phi}, c(\vec{r}, \vec{k}, n, s)\right] &\approx -\left\{\Phi(\vec{r}) - \left(\vec{r} - i\vec{\nabla}_{\vec{k}}\right) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \,\Phi(\vec{r})\right\} c(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \end{split}$$
(8.48)

$$\frac{i}{\hbar} \Big[\hat{\Phi}, \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \Big] = \frac{i}{\hbar} \left(\Big[\hat{\Phi}, c^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \Big] c(\vec{r}, \vec{k}, n, s) + c^{\dagger}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \Big[\hat{\Phi}, c(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \Big] \right)$$

$$\approx \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, n, s)$$
(8.49)

Damit erhält man in Analogie zu (7.29) mit $f(\vec{r}, \vec{k}, n, s, t) = \left\langle \hat{n}(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \right\rangle_t$ und

$$\vec{v}(\vec{k},n) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \,\epsilon(\vec{k},n) \approx \frac{\hbar \vec{k}}{m^*} \tag{8.50}$$

den "Driftterm" der Boltzmann-Gleichung (Effektive Masse m^*)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{0} f(\vec{r},\vec{k},n,s,t) = -\vec{v}(\vec{k},n)\cdot\vec{\nabla}_{r}f(\vec{r},\vec{k},n,s,t) + \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\Phi(\vec{r})\cdot\vec{\nabla}_{\vec{k}}f(\vec{r},\vec{k},n,s,t)$$
(8.51)

Für geladene Teilchen im elektrischen Feld: $\vec{\nabla}_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}) = -q\vec{E}(\vec{r}).$

Lokale Gleichgewichtsverteilung

$$f_0(\vec{r}, \vec{k}, n, s, t) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\vec{r}, t) \, (\epsilon(\vec{k}, n) - \epsilon_F)} + 1}$$
(8.52)

Relaxationszeitansatz

$$f(\vec{r}, \vec{k}, n, s, t) = f_0(\vec{r}, \vec{k}, n, s, t) + g(\vec{r}, \vec{k}, n, s, t)$$
(8.53)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{V}g(\vec{r},\vec{k},n,s,t) = -\frac{1}{\tau}g(\vec{r},\vec{k},n,s,t)$$
(8.54)

Stationärer Fall $\frac{\partial}{\partial t}f(\vec{r},\vec{k},n,s,t)=0$

$$g(\vec{r}, \vec{k}, n, s) = -\tau \left\{ \vec{v}(\vec{k}, n) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f_0(\vec{r}, \vec{k}, n, s) + \frac{1}{\hbar} q \vec{E}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0(\vec{r}, \vec{k}, n, s) \right\}$$

$$\approx -\tau \beta \, \vec{v}(\vec{k}, n) \cdot \left\{ \left(\epsilon(\vec{k}, n) - \epsilon_F \right) \beta k_B \vec{\nabla}_{\vec{r}} T(\vec{r}) - q \, \vec{E}(\vec{r}) \right\}$$

$$\times f_0(\vec{k}, n, s) \left(1 - f_0(\vec{k}, n, s) \right)$$
(8.55)

Elektrische Stromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}) = q \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},n,s} \vec{v}(\vec{k},n) f(\vec{r},\vec{k},n,s) = q \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},n,s} \vec{v}(\vec{k},n) g(\vec{r},\vec{k},n,s)$$
$$= \underline{\sigma} \Big\{ \vec{E}(\vec{r}) - \underline{P} \vec{\nabla} T(\vec{r}) \Big\}$$
(8.56)

Elektrische Leitfähigkeit (Fermigeschwindigkeit $v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*}$)

$$\underline{\underline{\sigma}} = \tau \beta q^2 \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},n,s} \vec{v}(\vec{k},n) \otimes \vec{v}(\vec{k},n) f_0(\vec{k},n,s) \left(1 - f_0(\vec{k},n,s)\right)$$
$$\approx \tau \beta q^2 \frac{1}{3} v_F^2 g(\epsilon_F) \underline{\underline{1}} \int d\epsilon \frac{e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)}}{\left(e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} + 1\right)^2} = \tau q^2 \frac{1}{3} v_F^2 g(\epsilon_F) \underline{\underline{1}}$$
(8.57)

Peltier Koeffizient

$$\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{P}} \approx \tau q \beta^2 k_B \frac{1}{3} v_F^2 \underline{\underline{1}} \int d\epsilon \, g(\epsilon) \, (\epsilon - \epsilon_F) \frac{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)}}{\left(\mathrm{e}^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} + 1\right)^2} \\ = \tau q \, \frac{\pi^2}{9} \, v_F^2 \, g'(\epsilon_F) \, k_B^2 \, T \, \underline{\underline{1}}$$
(8.58)

Wärmestromdichte ($Q = E - \mu N$)

$$\vec{j}_Q(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},n,s} \vec{v}(\vec{k},n) \left(\epsilon(\vec{k},n) - \epsilon_F \right) g(\vec{r},\vec{k},n,s)$$
$$= -\underline{\kappa} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T(\vec{r}) + \underline{\sigma} \underline{P} \vec{E}(\vec{r})$$
(8.59)

Wärmeleitfähigkeit

$$\underline{\underline{\kappa}} = \tau \beta^2 k_B \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},n,s} \vec{v}(\vec{k},n) \otimes \vec{v}(\vec{k},n) \left(\epsilon(\vec{k},n) - \epsilon_F\right)^2 f_0(\vec{k},n,s) \left(1 - f_0(\vec{k},n,s)\right)$$
$$\approx \tau \frac{\pi^2}{9} v_F^2 g(\epsilon_F) k_B^2 T \underline{1} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{q^2} \underline{\sigma}$$
(8.60)

Wiedemann-Franz Gesetz $\kappa \sim T\sigma$.

Relaxationszeit für Verunreinigungsstreuung

Entsprechend (7.47)

$$\frac{1}{\tau_{\rm v}}g(\vec{r},\vec{k},n,s,t) = \frac{1}{\hbar}\sum_{\vec{k}',n'} \delta\left(\epsilon(\vec{k}',n') - \epsilon(\vec{k},n)\right) \left|w(\vec{k}',n',\vec{k},n)\right|^2 g(\vec{r},\vec{k},n,s,t)$$
(8.61)

mit $\epsilon(\vec{k},n) \approx \epsilon_F$, da $g(\vec{r},\vec{k},n,s,t) \to 0$ für $|\epsilon(\vec{k},n) - \epsilon_F| \gg k_B T$ und $k_B T \ll \epsilon_F$

16 4.12.02

Relaxationszeit für Elektron-Phonon Streuung

Normalprozesse: (Nur ein Band, fast freie Elektronen)

$$\frac{1}{\tau_{el-ph}}g(\vec{r},\vec{k},n,s,t) = \frac{1}{\hbar}\sum_{\vec{k},n',\lambda} \left\{ \delta\left(\epsilon(\vec{k},n) - \epsilon(\vec{k}-\vec{\kappa},n') - \hbar\omega(\vec{\kappa},\lambda)\right) \times \left| w(\vec{k},n,-\vec{k}+\vec{\kappa},n',-\vec{\kappa},\lambda) \right|^{2} \times \left[1 - f_{0}(\vec{k}-\vec{\kappa},n') + f_{0}^{(ph)}(\vec{\kappa},\lambda) \right] + \delta\left(\epsilon(\vec{k},n) - \epsilon(\vec{k}+\vec{\kappa},n') + \hbar\omega(\vec{\kappa},\lambda)\right) \times \left| w(\vec{k},n,-\vec{k}-\vec{\kappa},n',\vec{\kappa},\lambda) \right|^{2} \times \left[f_{0}(\vec{k}+\vec{\kappa},n') + f_{0}^{(ph)}(\vec{\kappa},\lambda) \right] \right\} g(\vec{r},\vec{k},n,s,t)$$
(8.62)

Temperaturabhängigkeit:

Für $T \gg \Theta_D$ ist $f_0^{(ph)}(\vec{\kappa}, \lambda) \approx k_B T / \hbar \omega(\vec{\kappa}, \lambda) \gg 1$, also $\rho = \frac{1}{\sigma} \sim \frac{1}{\tau_{el-ph}} \sim T$ (8.63)

Für $T \ll \Theta_D$ tragen vorwiegend $\vec{\kappa}$ -Werte mit $\hbar\omega(\vec{\kappa},\lambda) < k_B T$ bei, also für eine kugelförmige Fermifläche $\kappa < \kappa_T = k_B T / \hbar c_{ph}$.

Wegen $\hbar\omega(\vec{\kappa},\lambda) < k_B \Theta_D \ll \epsilon_F$ ist $\epsilon(\vec{k},n) \approx \epsilon(\vec{k}-\vec{\kappa},n') \approx \epsilon_F$. Wegen $a^{\dagger}(\vec{\kappa},\lambda) + a(\vec{\kappa},\lambda) \sim \sqrt{\omega(\vec{\kappa},\lambda)} u(\vec{\kappa},\lambda)$ ist $w(\vec{k},n,-\vec{k}\mp\vec{\kappa},n',\pm\vec{\kappa},\lambda) \sim \sqrt{\kappa}$. Damit ist

$$\rho \sim T \int_0^{\kappa_T} \mathrm{d}^2 \kappa \frac{\kappa}{c_{ph} \kappa} \sim T^3 \tag{8.64}$$

Umklapprozesse bringen keine qualitative Veränderung, da der "Quasiimpuls" der Elektronen auch für Normalprozesse nicht erhalten ist.

Für sehr tiefe Temperaturen dominiert die temperaturunabhängige Verunreinigungsstreuung (Restwiderstand).



9 Halbleiter

9.1 Intrinsische Halbleiter



Beispiele: Ge, Si, GaAs (Diamantstruktur)

Kovalente Bindung: s, p^3 Hybridorbitale

Bindungszustand: Symmetrische Superposition von Orbitalen benachbarter Ionen.

Antibindungszustand: Antisymmetrische Superposition von Orbitalen benachbarter Ionen.



Energielücke: $\sim 1 eV \cong 11\,600 \, K$

Energie für Elektronen und Löcher (vereinfacht)

Si
$$\epsilon_e(\bar{k}$$

Si 1.1 eV Effekt
Zustar
 $g_{e,p}$
Mittle

[KKK]

0

$$\epsilon_e(\vec{k}) \approx \epsilon_L + \frac{\hbar^2 |\vec{k} - \vec{k}_0|^2}{2m_e^*} \qquad \epsilon_p(\vec{k}) \approx \epsilon_V - \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m_p^*}$$
(9.1)

Effektive Massen (Si): $m_e \approx (1.0-0.2)m \ m_p \approx (0.5-0.2)m$ Zustandsdichte, siehe (8.35)

$$g_{e,p}(\epsilon) = \frac{m_{e,p}^{*,3/2}}{\hbar^3 \pi^2} \sqrt{2 |\epsilon - \epsilon_{L,V}|} \quad \text{für } \epsilon > \epsilon_L \text{ b.z.w. } \epsilon < \epsilon_V$$
(9.2)

Mittlere Besetzungszahlen

$$n_e(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \qquad n_p(\epsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$
(9.3)

Für $\epsilon_L - \mu \gg k_B T$ und $\mu - \epsilon_V \gg k_B T$

 $[\kappa 00]$

$$n_e(\epsilon) \approx e^{-\beta(\epsilon-\mu)}$$
 für $\epsilon > \epsilon_L$ $n_p(\epsilon) \approx e^{-\beta(\mu-\epsilon)}$ für $\epsilon < \epsilon_V$ (9.4)

Gesamtzahl der Leitungselektronen und Löcher

$$\frac{N_e}{V} = \int_{\epsilon_L}^{\infty} d\epsilon \, g_e(\epsilon) \, \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)} = \frac{\sqrt{2} \left(k_B \, T \, m_e^*\right)^{3/2}}{\hbar^3 \pi^2} \, \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_L-\mu)} \int_0^{\infty} dx \, \sqrt{x} \, \mathrm{e}^{-x}$$

$$= 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \, \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_L-\mu)} = \frac{2}{\lambda_e(T)^3} \, \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_L-\mu)}$$

$$\frac{N_p}{V} = 2 \left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \, \mathrm{e}^{-\beta(\mu-\epsilon_V)} = \frac{2}{\lambda_p(T)^3} \, \mathrm{e}^{-\beta(\mu-\epsilon_V)} \tag{9.5}$$

Thermische de Broglie Wellenlänge $\lambda_x(T) = \sqrt{2\pi\hbar^2/m_x^*k_BT}$ Beispiel: T = 300 K: $\lambda(300) \approx 5$ nm Beachte: $N_e N_p$ hängt nicht von μ ab:

Massenwirkungsgesetz, gilt auch für dotierte Halbleiter.

$$\sqrt{N_e N_p} = N_i = 2 N \frac{v}{\left(\lambda_e(T) \lambda_p(T)\right)^{3/2}} e^{-\frac{1}{2}\beta(\epsilon_L - \epsilon_V)}$$
(9.6)

mit v = V/N (N Gitterplätze)

Beispiel: Si (Zimmertemperatur) $\sqrt{N_e N_p}/V = 1.5 \cdot 10^{10} \,\mathrm{cm}^{-3}$, $v \cdot \left(\lambda_e(T) \lambda_p(T)\right)^{-3/2} \approx 3 \cdot 10^{-4}$

Ladungsneutralität: μ so daß $N_e = N_p$

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\epsilon_L + \epsilon_V \right) + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_p^*}{m_e^*} \right)$$
(9.7)

Leitfähigkeit:

Entsprechend (8.57) mit $\vec{v}_e(\vec{k}) \approx \hbar \vec{k}/m_e^*$ und $|\vec{v}_e(\vec{k})|^2 \approx (\epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_L)/m_e^*$

$$\sigma_{e} = 2 \tau_{e} q^{2} \frac{\sqrt{2m_{e}^{*}}}{3\hbar^{3}\pi^{2}} \left(k_{B}T\right)^{3/2} e^{-\beta(\epsilon_{L}-\mu)} \int_{0}^{\infty} dx \, x^{3/2} e^{-x}$$

$$= 2 \tau_{e} q^{2} \left(\frac{k_{B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2} \sqrt{m_{e}^{*}} e^{-\beta(\epsilon_{L}-\mu)} = \frac{\tau_{e} q^{2}}{m_{e}^{*}} \frac{N_{e}}{V}$$

$$\sigma_{p} = 2 \tau_{p} q^{2} \left(\frac{k_{B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2} \sqrt{m_{p}^{*}} e^{-\beta(\mu-\epsilon_{V})} = \frac{\tau_{p} q^{2}}{m_{p}^{*}} \frac{N_{p}}{V}$$
(9.8)

Die Leitfähigkeit wächst mit steigender Temperatur, im Gegensatz zu Metallen. Auch bei moderaten Temperaturen geringe Leitfähigkeit.

Typische Werte (Zimmertemperatur): Metalle $\rho \sim 10^{-6} \,\Omega$ cm, Isolatoren $\rho \sim 10^{22} \,\Omega$ cm, Halbleiter $\rho \sim 10^{-3} \cdots 10^9 \,\Omega \,\mathrm{cm}$.

9.2 **Dotierte Halbleiter**

Donatoren (5 Valenzelektronen): P, As, Sb, Bi

Akzeptoren (3 Valenzelektronen): B, Al, Ga, In, Tl

Donor:

Überschußladungadung e, Dielektrizitätskonstante ϵ , Beispiel Si: $\epsilon_{Si} \approx 20$. Coulombwechselwirkung in einem Dielektrikum: $V(r) = q^2/\epsilon r$ Donorsystem: Wasserstoffatom mit effektiver Ladung $e/\sqrt{\epsilon}$: Bohr'scher Radius $a = \hbar^2 \epsilon / m_e^* e^2$ Beispiel Si: $a \approx 20 \text{ Å}$ Bindungsenergie $E_0 = m_e^* e^4 / \hbar^2 \epsilon^2$ Beispiel Si: $E_0 \approx 0.05 \, \text{eV} \approx k_B \cdot 600 \, \text{K}$

Entsprechendes gilt für das Akzeptorsystem.

Einfaches Modell:

Jeweils nur ein gebundener Donor- b.z.w. Akzeptorzustand

Ladungsneutralität:

Elektronen im Leitungsband + Elektronen auf Donatorplätzen - Donatoren = Löcher im Valenzband + Löcher auf Akzeptorplätzen - Akzeptoren.

(v = V/N, N Gitterplätze, mit (9.5))

$$2\frac{v}{\lambda_e^3} e^{-\beta(\epsilon_L - \mu)} - c_D \frac{1}{1 + e^{-\beta(\epsilon_D - \mu)}} = 2\frac{v}{\lambda_p^3} e^{-\beta(\mu - \epsilon_V)} - c_A \frac{1}{1 + e^{-\beta(\mu - \epsilon_A)}}$$
(9.9)

gilt für $\epsilon_L - \mu \gg k_B T$ und $\mu - \epsilon_V \gg k_B T$.

Es sei μ_i das chemische Potential des undotierten Halbleiters, (9.7). Dann ist mit (9.6)

$$N_e = e^{\beta(\mu - \mu_i)} N_i$$
 $N_p = e^{-\beta(\mu - \mu_i)} N_i$ (9.10)

n-dotierter Halbleiter: $c_D \gg c_A$. Damit sind die Beiträge der rechten Seite von (9.9) vernachlässigbar.

Mit $\mathring{n}_e = 2v/\lambda_e^3$, $n_e = N_e/N$ und n_D = Zahl der an Donatoren gebundenen Elektronen pro Gitterplatz:

$$n_{c} = \stackrel{\circ}{n_{c}} e^{-\beta(\epsilon_{L}-\mu)} = c_{D} - n_{D} = \frac{c_{D}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_{D}-\mu)}} \quad (9.11)$$





Für $c_D < \stackrel{\circ}{n_e} e^{-\beta(\epsilon_L - \epsilon_D)}$ sind die Donatorniveaus unbesetzt und $n_e = c_D$. Bei sehr hohen Temperaturen dominiert die Eigenleitung.

Figur: n_e und μ als Funktion von β .

Entsprechende Rechnung gilt für *p*-dotierte Halbleiter $(c_D \ll c_A)$

Ladungskompensierte Halbleiter mit $c_D \approx c_A$ verhalten sich wie intrinsische Halbleiter.

18 11.12.02

Leitfähigkeit (9.8):

$$\sigma_e = \frac{\tau_e \, q^2}{m_e^* \, v} \, n_e \tag{9.12}$$

Diffusion: Mit $\mu = \mu(\vec{r})$ und (8.55)

$$g_e(\vec{r}, \vec{k}) = -\tau \,\beta \,\vec{v}_e(\vec{k}) \cdot \vec{\nabla}_r \mu(\vec{r}) \,f_e^{(0)}(\vec{k}) \tag{9.13}$$

für $\epsilon_L - \mu \gg k_B T$. Teilchenstromdichte

$$\vec{j}_{n_e} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},s} \vec{v}_e(\vec{k}) g_e(\vec{r},\vec{k}) = -\tau \beta \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},s} \vec{v}_e(\vec{k}) \left(\vec{v}_e(\vec{k}) \cdot \vec{\nabla}_r \mu(\vec{r}) \right) f_e^{(0)}(\vec{k})$$
(9.14)



Diffusionsgleichung: $\vec{j}_{n_e} = -D_e \vec{\nabla}_r n_e(\vec{r})$. Diffusionskonstante:

$$D_e = \tau_e \frac{k_B T}{m_e^*} \qquad \qquad \sigma_e = \beta \, q^2 \, D_e \, n_e \tag{9.15}$$

Gesamter Teilchenstrom (Elektronen) mit $\vec{j}(\vec{r}) = -q \, \vec{j}_{n_e}(\vec{r})$

$$\vec{j}_{n_e}(\vec{r}) = -\beta q D_e n_e(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) - D_e \vec{\nabla}_{\vec{r}} n_e(\vec{r}) = \vec{j}_{n_e}^{(drift)}(\vec{r}) + \vec{j}_{n_e}^{(diff)}(\vec{r})$$
(9.16)

Entsprechende Rechnung für p-dotierte Halbleiter.

9.3 *p*-*n*-Übergang, Diode, Transistor

Räumliche Inhomogenitäten auf einer Längenskala $L \gg a$. Wellenpakete der Breite $a \ll \Delta \ll L$. Elektrisches Potential $\Phi(\vec{r})$. Einteilchenenergien

$$\epsilon_e(\vec{r}, \vec{k}) = \epsilon_L - q \,\Phi(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 |\vec{k} - \vec{k_0}|^2}{2m_e^*} \qquad \epsilon_p(\vec{r}, \vec{k}) = \epsilon_V + q \,\Phi(\vec{r}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \qquad (9.17)$$

Elektrochemisches Potential

$$\mu_e(\vec{r}) = \mu + q \Phi(\vec{r}) \tag{9.18}$$

i.e. die vorher hergeleiteten Relationen gelten für $\mu \rightarrow \mu_e(\vec{r})$.

Im Gleichgewicht ist, (9.11), $n_e(\vec{r}) = \stackrel{\circ}{n_e} e^{-\beta(\epsilon_L - \mu_e(\vec{r}))}$. Mit $\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r})$ verschwindet also der Gesamtstrom $\vec{j}_{n_{e,p}}(\vec{r}) = 0$, (9.16).

<u>*p*-*n*-Übergang</u> (*y*-*z*-Ebene): $c_D(x) = \Theta(x) c_D$ und $c_A(x) = \Theta(-x) c_A$. Gleichgewicht: Für $x \to \infty$: $n_e(x) \to \overline{n}_e$; $\mu_e(x) \to \overline{\mu}_n = \mu + q \overline{\Phi}_n$ Für $x \to -\infty$: $n_p(x) \to \overline{n}_p$; $\mu_e(x) \to \overline{\mu}_p = \mu + q \overline{\Phi}_p$



Elektrisches Potential, Poissongleichung:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Phi(x) = -\frac{4\pi}{\epsilon}\rho(x) \tag{9.19}$$

Ladungsdichte

$$\rho(x) = q \left\{ n_p(x) - n_e(x) - c_A(x) + c_D(x) \right\}$$
(9.20)

Vereinfachtes Modell:

$$\rho(x) = -q c_A \quad \text{für} \quad -d_p < x < 0$$

$$\rho(x) = q c_D \quad \text{für} \quad 0 < x < d_D$$

$$\rho(x) = 0 \quad \text{sonst} \quad (9.21)$$

Potential:

$$\Phi(x) = \overline{\Phi}_p + \frac{2\pi}{\epsilon} q c_A (d_p + x)^2 \quad \text{für } -d_p < x < 0$$

$$\Phi(x) = \overline{\Phi}_n - \frac{2\pi}{\epsilon} q c_D (d_n - x)^2 \quad \text{für } 0 < x < d_n \qquad (9.22)$$

Abschätzung: $\overline{\Phi}_n \approx \frac{1}{2q} (\epsilon_L - \epsilon_V); \quad \overline{\Phi}_p \approx -\frac{1}{2q} (\epsilon_L - \epsilon_V); \quad \Phi(0) \approx 0$

$$d_n = \sqrt{\frac{\epsilon_L - \epsilon_V}{4\pi c_D q^2/\epsilon}} \qquad \qquad d_p = \sqrt{\frac{\epsilon_L - \epsilon_V}{4\pi c_A q^2/\epsilon}} \tag{9.23}$$

Beispiel: $\epsilon_L - \epsilon_V \approx 1 \text{ eV}$: $d_{n,p} \approx 3000 / \sqrt{c_{D,A}} \text{ cm}$. Für $c = 10^{14} \cdots 10^{18}$: $d \approx 10^4 \cdots 10^2 \text{ Å}$ (Verarmungsschicht)

p-*n*-Übergang mit angelegter Spannung:

19 16.12.02



Durchgangsrichtung

Sperrichtung

Dicke der Verarmungsschicht für $\overline{\Phi}_{n,p} \rightarrow : \overline{\Phi}_{n,p} \mp \frac{1}{2}V$, mit $\Delta \overline{\Phi} = \overline{\Phi}_n - \overline{\Phi}_p$

$$d_{n,p}(V) = d_{n,p}(0)\sqrt{1 - \frac{V q}{\Delta \overline{\Phi}}}$$
(9.24)

Beachte: Der Widerstand in der Verarmungsschicht ist viel größer als für $x > d_n$ oder $x < -d_p$. Damit ist $\Phi(d_n) \approx \overline{\Phi}_n - \frac{1}{2}V$ und $\Phi(-d_p) \approx \overline{\Phi}_p + \frac{1}{2}V$. Mit (9.11) und $n_e(d_n) \approx \overline{n}_e$ b.z.w. $n_p(-d_p) \approx \overline{n}_p$

$$n_e(-d_p) \approx e^{-\beta q(\Delta \overline{\Phi} - V)} \overline{n}_e \qquad \qquad n_p(d_n) \approx e^{-\beta q(\Delta \overline{\Phi} - V)} \overline{n}_p \qquad (9.25)$$

Damit ist für V > 0 (V < 0) die Zahl der Minoritätsladungsträger (Löcher im *n*-Bereich, Elektronen im *p*-Bereich) größer (kleiner) als im Gleichgewicht, und thermische Anregung und Rekombination von Elektron-Loch Paaren sind nicht mehr ausgeglichen.

Rekombination von Elektron-Loch Paaren:

Bei Rekombinationsprozessen dind Energie und Quasiimpuls (\vec{k} -Vektor) erhalten. Beispiel: Rekombination unter Aussendung eines Photons (bei 1ev $\lambda \sim 1.2\mu$), Photon + Phonon (vorwiegend bei indirekter Lücke), strahlungsloser Übergang (Ausendung mehrere Phononen), "Rekombinationszentren" (Verunreinigungen mit Zuständen in der Mitte der Bandlücke), e.t.c.

Relaxationszeitansatz: (Gleichgewichtsverteilung $\stackrel{\circ}{n}_{e,p}(x)$)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{\rm rec} n_e(x) = \frac{\partial}{\partial t}\Big|_{\rm rec} n_p(x) = -\frac{1}{\tau_r} \Big\{ n_e(x) n_p(x) - \mathring{n}_e(x) \mathring{n}_e(x) \Big\}$$
(9.26)

Typische Werte für $\tau_{r,e} = \tau_r / \overline{n}_p$ oder $\tau_{r,p} = \tau_r / \overline{n}_e \sim 10^{-3} \cdots 10^{-8}$ sec. Zum Vergleich: Stoßzeiten für Elektronen oder Löcher $\tau_{e,p} \sim 10^{-12} \cdots 10^{-13}$ sec.

Kontinuitätsgleichung für Elektronen, $x < -d_p$ (entsprechend für Löcher, $x > d_n$): Mit (9.16) und (9.26) und $\delta n_p(x) \ll \overline{n}_p$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{\rm rec}\delta n_e(x) = -\frac{1}{\tau_{r,e}}\delta n_e(x) = \frac{\partial}{\partial x}j_{n_e,x}(x) = -D_e\frac{\partial^2}{\partial x^2}\delta n_e(x)$$
(9.27)

mit $\delta n_e(x) = n_e(x) - \overline{n}_e e^{-\beta q \Delta \overline{\Phi}}$ und (9.25)

$$\delta n_e(-d_p) = e^{-\beta q \Delta \overline{\Phi}} \left\{ e^{\beta q V} - 1 \right\} \overline{n}_e$$
(9.28)

und für $x < -d_n$

$$\delta n_e(x) = e^{-\beta q \Delta \overline{\Phi}} \left\{ e^{\beta q V} - 1 \right\} e^{(d_p + x)/L_e} \overline{n}_e \qquad \qquad L_e = \sqrt{\tau_{r,e} D_e} \qquad (9.29)$$

Entsprechende Rechnung für $\delta n_p(x)$ und $x > d_n$. Beispiel: *Si* bei Zimmertemperatur, $L_e \sim 0.08 \text{ mm}$ $L_p \sim 0.03 \text{ mm}$. Stromdichte: Mit (9.27)

$$j_{n_e,x}(-d_p) = -\frac{n_e}{L_e \tau_{r,e}} e^{-\beta q \Delta \overline{\Phi}} \Big\{ e^{\beta q V} - 1 \Big\}$$
$$j_{n_p,x}(d_n) = \frac{\overline{n_p}}{L_p \tau_{r,p}} e^{-\beta q \Delta \overline{\Phi}} \Big\{ e^{\beta q V} - 1 \Big\}$$
(9.30)

 $\frac{\text{Strom-Spannungscharakteristik}}{(\text{mit } j \approx -q \, j_{n_e,x}(-d_p) + q \, j_{n_p,x}(d_n))}$

$$j = j_s \left\{ e^{\beta qV} - 1 \right\} \tag{9.31}$$

Sättigungsstrom in Sperrichtung:

$$j_s = \left\{ \frac{\overline{n}_e}{L_e \tau_{r,e}} + \frac{\overline{n}_p}{L_p \tau_{r,p}} \right\} q e^{-\beta q \Delta \overline{\Phi}}$$
(9.32)





Dicke der Basis $L = (x_{BK} - x_{EB}) \ll L_e$ (Diffusionslänge). Dotierung der *p*-Schicht sei klein (vernachlässigbare Löcherleitung)

Gleichgewicht: $V_E = 0, U = 0, J_e = 0, J_B = 0, J_k = 0$

$$n_e(x) = \overline{n}_e^{(B)} \quad \text{für} \quad x_{EB} < x < x_{BK} \tag{9.33}$$

$$n_e(x) = \overline{n}_e^{(E)} = e^{\beta q \Delta \overline{\Phi}_{EB}} \overline{n}_e^{(B)} \approx c_D^{(E)} \quad \text{für} \quad x < x_{EB}$$
$$n_e(x) = \overline{n}_e^{(K)} = e^{\beta q \Delta \overline{\Phi}_{BK}} \overline{n}_e^{(B)} \approx c_D^{(K)} \quad \text{für} \quad x > x_{BK} \quad (9.34)$$

Funktionsweise: $V_{E,B} \neq 0, U \neq 0$

$$\Delta \Phi_{EB} = \Delta \overline{\Phi}_{EB} - V_E \qquad \Delta \Phi_{BK} = \Delta \overline{\Phi}_{BK} + V_K \qquad (9.35)$$

$$V_K = U - R J_K \tag{9.36}$$

 $V-V_{BK}$

Elektronendichte im Basisbereich:

$$n_e(x_{EB}) = e^{\beta q V_E} \overline{n}_e^{(B)} \qquad n_e(x_{BK}) = e^{-\beta q V_K} \overline{n}_e^{(B)} \qquad (9.37)$$

Rekombinationsstrom = Basisstrom J_B (Querschnitt F, Länge L der Basis)

$$J_B \approx qFL \frac{1}{\tau_r} \delta n_e(x_{EB}) = qFL \frac{1}{\tau_r} \overline{n}_e^{(B)} \left\{ e^{\beta qV_E} - 1 \right\}$$
(9.38)

Diffusionsstrom in der Basis (für $J_B \ll J_K$ i.e. $L \ll L_e$)

$$J_{K} = q \frac{F D_{e}}{L} \left\{ n_{e}(x_{EB}) - n_{e}(x_{BK}) \right\}$$

= $q \frac{F D_{e}}{L} \overline{n}_{e}^{(B)} \left\{ e^{\beta q V_{E}} - e^{-\beta q V_{K}} \right\}$
= $\frac{1}{R} \left\{ U - V_{K} \right\}$ (9.39)
- $V_{EB} - V_{EB}$

20 18.12.02

Zur weiteren Rechnung: Widerstand der Basis:

$$\frac{1}{R_B} = \sigma \frac{F}{L} = \beta q^2 D_e \overline{n}_e^{(B)} \frac{F}{L}$$
(9.40)

Thermische Spannung

$$U_T = \frac{k_B T}{q}$$
 $U_T = 0.026 \,\mathrm{V}$ für $T = 300 \,\mathrm{K}$ (9.41)

Damit ist

$$J_K = \left\{ e^{V_E/U_T} - e^{-V_K/U_T} \right\} \frac{U_T}{R_B} = \frac{U - V_K}{R}$$
(9.42)

und

$$J_B = \frac{\tau_e}{\tau_{r,e}} \frac{L^2}{L_e^2} \left\{ e^{V_E/U_T} - 1 \right\} \frac{U_T}{R_B}$$
(9.43)

Verstärkung:

$$\frac{\delta J_K}{\delta J_B} \sim \frac{\tau_{r,e}}{\tau_e} \frac{L_e^2}{L^2} \tag{9.44}$$

MOSFET (metal-oxyde-semiconductor field effect transistor)



Sperrbereich:

Gatespannung $V_G < (\epsilon_L - \mu)/q$ Verarmungsschicht (Löcher), mit (9.23)

$$\Phi(x) = \frac{(d-x)^2}{d^2} V_G$$
 (9.45)

für x < d und

$$d = \sqrt{\frac{V_G}{4\pi c_A q/\epsilon}} \tag{9.46}$$

Es existieren Oberflächenzustände im Leitungsband mit Energie $\epsilon_o(\kappa) < \epsilon_L$

$$\varphi_{\vec{\kappa}}(\vec{r}) \approx e^{i(\kappa_y y + \kappa_z z)} \varphi_{\gamma}(x)$$
 (9.47)

mit

$$\varphi_{\gamma}(x) \sim e^{-\gamma x}$$
 für $x > d$ (9.48)

und

$$\epsilon_o(\vec{\kappa}) = \epsilon_L + \frac{\hbar^2(\kappa_y^2 + \kappa_z^2 - \gamma^2)}{2m_e^*}$$
 (9.49)

Durchlaßbereich: $V_G > (\epsilon_L - \mu)/q$

Die Oberflächenzustände werden bis zur Fermienergie $\epsilon_F = \mu$ besetzt und bilden hier ein zweidimensionales entatetes Fermigas mit metallischer Leitfähigkeit. Die Dicke der Schicht ist etwa

$$D \sim \frac{1}{2} \frac{qV_G - \mu}{qV_G} d \tag{9.50}$$

Sie bestimmt die Leitfähigkeit im Durchlaßbereich. Bei schwacher Dotierung im p-Bereich wird d und damit D groß, und man erhält eine gute Leitfähigkeit.

10 Tieftemperatureigenschaften von Gläsern



Tunnelmodell:

In Gläsern existieren (meta-)stabile Konfigurationen, die durch quantenmechanisches Tunneln von wenigen Teilchen ineinander übergehen können (Tunnelzentren).

 $\frac{1}{2}\hbar\Omega$

Tunnelaufspaltung (für $\Delta = 0$):

$$\Delta_0 = \hbar \Omega e^{-\lambda} \tag{10.1}$$

$$\lambda = \frac{d}{2}\sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}} \tag{10.2}$$

Hamiltonoperator (Zweizustandsmodell, Spin $\frac{1}{2}$)

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \Delta_0 \\ \Delta_0 & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\Delta_0}{2} \sigma_x + \frac{\Delta}{2} \sigma_z$$
(10.3)

Tunnelaufspaltung für asymmetrisches Doppelpotential:

d

$$\epsilon = \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta^2} \tag{10.4}$$

Erwartungswert der Energie und spezifische Wärme eines Tunnelzentrums

I

$$E(\epsilon) = -\frac{1}{2}\epsilon \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon\right) \qquad c(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{4k_BT^2}\frac{1}{\cosh^2(\frac{1}{2}\beta\epsilon)}$$
(10.5)

Angenommene Verteilung der Tunnelparameter Δ, λ b.z.w. ϵ, λ

$$P(\Delta, \lambda) = \overline{P} \qquad P(\epsilon, \lambda) = \frac{\mathrm{d}\Delta}{\mathrm{d}\epsilon} P(\Delta, \lambda) = \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - (\hbar\Omega \mathrm{e}^{-\lambda})^2}} \overline{P} \qquad (10.6)$$

für $\Delta/k_B \sim 1 \text{ K}$ b.z.w. $\epsilon > \hbar \Omega e^{-\lambda}$ und $\lambda < \lambda_{\text{max}}$. Ein Maximalwert λ_{max} ist notwendig um Singularitäten zu vermeiden. Tunnelsysteme mit sehr großem λ haben

eine sehr kleine Tunnelfrequenz. Durch Wechselwirkung mit Phononen oder anderen Freiheitsgraden wird die Kohärenz für diese sehr langsamen Tunnelsysteme zerstört, und sie tragen damit nicht mehr bei.

Zustandsdichte:

$$g(\epsilon) = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} d\lambda \, P(\epsilon, \lambda) = \frac{1}{\epsilon} \operatorname{artanh} \sqrt{1 - \left(\frac{\hbar\Omega}{\epsilon}\right)^2 e^{-2\lambda}} \Big|_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}}$$
(10.7)

mit $\lambda_{\min} = \ln(\frac{\hbar\Omega}{\epsilon})$. Für $\lambda_{\max} \gg \ln(\frac{\hbar\Omega}{\epsilon})$

$$g(\epsilon) \approx \overline{P} \left\{ \lambda_{\max} - \ln \left(\frac{\hbar\Omega}{2\epsilon} \right) + \mathcal{O}(e^{-2\lambda_{\max}}) \right\} \approx \lambda_{\max} \overline{P}$$
(10.8)

Spezifische Wärme

$$c = \int d\epsilon g(\epsilon) c(\epsilon) = 2k_B^2 T \lambda_{\max} \overline{P} \int_0^\infty dx \, \frac{x^2}{\cosh^2(x)} = \frac{\pi^2}{3} \lambda_{\max} \overline{P} k_B^2 T \tag{10.9}$$

Typischer Wert für die Zahl der Tunnelzustände $k_B \lambda_{\max} \overline{P} \sim 10^{16} \; [K^{-1} cm^{-3}].$

21 8.1.03

Wärmeleitung

Wechselwirkung zwischen Tunnelsystem und elastischen Verzerrungen η

$$H_{\rm int} = \left(\underline{\gamma} \cdot \underline{\eta}\right) \sigma_z \tag{10.10}$$

Verzerrungstensor

$$\eta_{\alpha,\beta}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_{\alpha}(\vec{r})}{\partial r_{\beta}} + \frac{\partial u_{\beta}(\vec{r})}{\partial r_{\alpha}} \right\}$$
(10.11)

$$\eta_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\vec{k},\lambda)}} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(\vec{k},\lambda) \right\} \frac{1}{2} \left\{ k_{\alpha}\eta_{\beta}(\vec{k},\lambda) + k_{\beta}\eta_{\alpha}(\vec{k},\lambda) \right\}$$
(10.12)

Mit $\omega(\vec{k},\lambda) \approx c_{\lambda}k$ und

$$\gamma_{\lambda} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{\alpha,\beta} \left\{ n_{\alpha}(\vec{k}) \eta_{\beta}(\vec{k},\lambda) + n_{\beta}(\vec{k}) \eta_{\alpha}(\vec{k},\lambda) \right\}$$
(10.13)

wobei $\vec{n}(\vec{k})$ ein Einheitsvektor in \vec{k} -Richtung ist, erhält man

$$\left(\underline{\gamma} \cdot \underline{\eta}(\vec{k})\right) \approx \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar k}{2mc_{\lambda}}} \left\{ a^{\dagger}(\vec{k},\lambda) + a(\vec{k},\lambda) \right\}$$
(10.14)

Berechnung der Relaxationszeit für Phononen: $g(\vec{k},\lambda) = f(\vec{k},\lambda) - f_0(\vec{k},\lambda)$

$$\frac{1}{\tau(\vec{k},\lambda)}g(\vec{k},\lambda) = \frac{1}{\hbar}\sum_{i,f} \left\{ P_i - P_i^{(0)} \right\} \delta(E_i - E_f) \left| W_{i,f} \right|^2 \left\{ n_i(\vec{k},\lambda) - n_f(\vec{k},\lambda) \right\}$$
(10.15)

a) Resonante Absorption eines Phonons mit Energie $\hbar\omega(\vec{k},\lambda) = \epsilon$ und Anregung eines Tunnelsystems mit Energie ϵ :

$$P_i - P_i^{(0)} = g(\vec{k}, \lambda) \frac{1}{1 + e^{-\beta\epsilon}} \qquad n_i(\vec{k}, \lambda) - n_f(\vec{k}, \lambda) = 1 \qquad (10.16)$$

b) Relaxation eines Tunnelsystems mit Energie ϵ und Anregung eines Phonons mit Energie $\hbar\omega(\vec{k},\lambda) = \epsilon$:

$$P_i - P_i^{(0)} = g(\vec{k}, \lambda) \frac{1}{e^{\beta \epsilon} + 1} \qquad n_i(\vec{k}, \lambda) - n_f(\vec{k}, \lambda) = -1 \qquad (10.17)$$

Matrixelement

$$W_{i,f} = \gamma_{\lambda} \frac{\Delta}{\epsilon} \sqrt{\frac{\hbar k}{2mc_{\lambda}}}$$
(10.18)

Damit ist

$$\tau(\vec{k},\lambda) \sim \frac{1}{k} \tag{10.19}$$

Hauptbeitrag zur spezifischen Wärme von Phononen mit Energie $\hbar\omega(\vec{k},\lambda) \approx k_B T$ und Wellenzahl $k \approx \frac{k_B}{\hbar c} T$. Damit ist $\tau \sim T^{-1}$ und mit (7.53) und (7.22) ist $\kappa \sim T^2$ für tiefe Temperaturen. Bei Temperaturen T > 1 K werden andere Prozesse, z.B. lokalisierte Phononzustände, wichtig.

IV WECHSELWIRKENDE ELEKTRONEN IN METALLEN

11 Hartree-Fock Theorie

11.1 Variationsrechnung, Hartree-Fock Gleichungen

Einteilchenzustände

$$\varphi_{\vec{k},n}(\vec{r}) \tag{11.1}$$

Feldoperatoren (Fermionen), siehe (8.40)

$$\psi^{\dagger}(\vec{r},s) = \sum_{\vec{k},n} \varphi^{*}_{\vec{k},n}(\vec{r}) c^{\dagger}(\vec{k},n,s) \qquad \qquad \psi(\vec{r},s) = \sum_{\vec{k},n} \varphi_{\vec{k},n}(\vec{r}) c(\vec{k},n,s) \qquad (11.2)$$

Hamiltonoperator mit Zweiteilchenwechselwirkung

$$H = H_{0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} W(\vec{x}_{i} - \vec{x}_{j})$$

$$= \sum_{\vec{k},n,s,\vec{k}',n',s'} c^{\dagger}(\vec{k},n,s) \langle \vec{k},n,s | H_{0} | \vec{k}',n',s' \rangle c(\vec{k}',n',s')$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \psi^{\dagger}(\vec{r},s) \psi^{\dagger}(\vec{r}',s') W(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}',s') \psi(\vec{r},s)$$

$$= \sum_{\vec{k},n,s,\vec{k}',n',s'} c^{\dagger}(\vec{k},n,s) \langle \vec{k},n,s | H_{0} | \vec{k}',n',s' \rangle c(\vec{k}',n',s')$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},n,s,\vec{k}',n',s'} \sum_{\vec{k}'',n'',s'',\vec{k}''',n''',s'''} c^{\dagger}(\vec{k},n,s) c^{\dagger}(\vec{k}',n',s') \qquad (11.3)$$

$$\times \langle \vec{k},n,s;\vec{k}',n',s' | W | \vec{k}'',n'',s''; \vec{k}''',n''',s''' \rangle c(\vec{k}'',n'',s'') c(\vec{k}''',n''',s''')$$

mit

$$\left\langle \vec{k}, n, s \right| H_0 \left| \vec{k}', n', s' \right\rangle = \delta_{s,s'} \int \mathrm{d}^3 r \, \varphi^*_{\vec{k},n}(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{r}) \right\} \varphi_{\vec{k}',n'}(\vec{r}) \tag{11.4}$$

$$\left\langle \vec{k}, n, s; \vec{k'}, n', s' \right| W \left| \vec{k''}, n'', s''; \vec{k'''}, n''', s''' \right\rangle = \\ = \delta_{s,s'''} \delta_{s',s''} \int d^3r \, d^3r' \varphi^*_{\vec{k},n}(\vec{r}) \varphi^*_{\vec{k'},n'}(\vec{r'}) W(\vec{r} - \vec{r'}) \varphi_{\vec{k}'',n''}(\vec{r'}) \varphi_{\vec{k}''',n'''}(\vec{r'})$$
(11.5)

Rietz'sche Ungleichung, Variationsrechnung

$$E_0 \le \langle \Phi | \{ H_0 + W \} | \Phi \rangle \quad \text{mit} \quad \langle \Phi | \Phi \rangle = 1$$
(11.6)

Variationsrechnung mit Nebenbedingung $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$ (Lagrangeparameter ϵ)

$$\left\langle \delta \Phi \right| \left\{ H_0 + W - \epsilon \right\} \left| \Phi \right\rangle = 0 \tag{11.7}$$

Testwellenfunktion

$$|\Phi\rangle = \prod_{\vec{k},n,s} \left(c^{\dagger}(\vec{k},n,s) \right)^{n(\vec{k},n,s)} |0\rangle$$
(11.8)

Erwartungswert

$$\langle \Phi | \left\{ H_0 + W - \epsilon \right\} | \Phi \rangle = \sum_{\vec{k}, n, s} n(\vec{k}, n, s) \left\langle \vec{k}, n, s \right| H_0 \left| \vec{k}, n, s \right\rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, n, s; \vec{k'}, n', s'} n(\vec{k}, n, s) n(\vec{k'}, n', s') \times$$

$$\times \left\{ \left\langle \vec{k}, n, s; \vec{k'}, n', s' \right| W \left| \vec{k'}, n', s'; \vec{k}, n, s \right\rangle -$$

$$- \left\langle \vec{k}, n, s; \vec{k'}, n', s' \right| W \left| \vec{k}, n, s; \vec{k'}, n', s' \right\rangle \right\}$$
(11.9)

Variation: $\langle \delta \Phi | \rightarrow \delta \varphi^*_{\vec{k},n}(\vec{r})$. Mit (11.4) und (11.5) erhält man die "Hartree-Fock Gleichungen"

$$\left\{-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\vec{r}) + \overline{W}(\vec{r})\right\}\varphi_{\vec{k},n}(\vec{r}) - \int d^3r' \,\overline{W}_{\text{ex}}\left(\vec{r} - \vec{r}'\right)\varphi_{\vec{k},n}(\vec{r}') = \epsilon(\vec{k},n)\varphi_{\vec{k},n}(\vec{r}) \quad (11.10)$$

wobei

$$\overline{W}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}',n',s'} \int d^3 r' W(\vec{r} - \vec{r}') \left| \varphi_{\vec{k}',n'}(\vec{r}') \right|^2 n(\vec{k}',n',s')$$

$$\overline{W}_{ex}(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_{\vec{k}',n'} W(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_{\vec{k}',n'}(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}',n'}^*(\vec{r}') n(\vec{k}',n',s)$$
(11.11)

22 13.1.03

Die Hartree-Fock Gleichungen sind vom Typ einer Einteilchen-Schrödingergleichung, allerdings mir selbstkonsistent zu bestimmenden nichtlokalen Potentialen. Erwartungswert der Energie:

$$E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{\vec{k}, n, s} \frac{1}{2} \left\{ \left\langle \vec{k}, n, s \right| H_0 \left| \vec{k}, n, s \right\rangle + \epsilon(\vec{k}, n) \right\} n(\vec{k}, n, s)$$
(11.12)

Besetzungszahlen: $n(\vec{k}, n, s) = \{0, 1\}$ so daß E minimal und $\sum_{\vec{k}, n, s} n(\vec{k}, n, s) = N$. Angeregte Zustände, e.g.

$$\left|\Psi(\vec{k},n,s;\vec{k}',n',s')\right\rangle = c^{\dagger}(\vec{k},n,s) c(\vec{k}',n',s') \left|\Phi\right\rangle$$
(11.13)

 $\mbox{ mit } n(\vec{k},n,s) = 0 \ \mbox{ und } n(\vec{k'},n',s') = 1.$ Anregungsenergie

$$\delta E = \left\langle \Psi(\vec{k}, n, s; \vec{k}', n', s') \middle| H_0 + W \middle| \Psi(\vec{k}, n, s; \vec{k}', n', s') \right\rangle - \left\langle \Phi \middle| H_0 - W \middle| \Phi \right\rangle$$

= $\epsilon(\vec{k}, n) - \epsilon(\vec{k}', n', s') - \left\{ \left\langle \vec{k}, n, s; \vec{k}', n', s' \middle| W \middle| \vec{k}', n', s'; \vec{k}, n, s \right\rangle - \left\langle \vec{k}, n, s; \vec{k}', n', s' \middle| W \middle| \vec{k}, n, s; \vec{k}', n', s' \right\rangle \right\}$
 $\approx \epsilon(\vec{k}, n) - \epsilon(\vec{k}', n', s')$ (11.14)

11.2 Elektronen in einem homogenen Potential

Ladungshintergrund $V(\vec{r}) = V_0$

Wellenfunktion

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{11.15}$$

Besetzungszahlen

$$n(\vec{k},s) = \begin{cases} 1\\ 0 \end{cases} \quad \text{für} \quad \begin{cases} k < k_F\\ k > k_F \end{cases}$$
(11.16)

Hartree Potential

$$\overline{W}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},s} n(\vec{k},s) \, \frac{1}{V} \int \mathrm{d}^3 r' \, W(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{N}{V} \int \mathrm{d}^3 r' \, W(\vec{r}\,') = \overline{W} \tag{11.17}$$

Austauschpotential

$$\int d^3 r' \, \overline{W}_{\text{ex}}(\vec{r} - \vec{r}\,') \frac{1}{\sqrt{V}} \, \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} = \int d^3 r' \, \overline{W}_{\text{ex}}(\vec{r}\,') \mathrm{e}^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} \frac{1}{\sqrt{V}} \, \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}} = \overline{W}_{\text{ex}}(\vec{k}) \, \frac{1}{\sqrt{V}} \, \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}$$
(11.18)

mit

$$\overline{W}_{\text{ex}}(\vec{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}'} n(\vec{k}', s) \int d^3 r \, W(\vec{r}) \, \mathrm{e}^{-i\,(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \int_{k' < k_f} \frac{\mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} \, W(\vec{k}-\vec{k}') \tag{11.19}$$

und

$$W(\vec{k}) = \int d^3 r \, W(\vec{r}) \, e^{-i \, \vec{k} \cdot \vec{r}}$$
(11.20)

Für $V_0 = -\overline{W}$

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \overline{W}_{\text{ex}}(\vec{k})$$
(11.21)

Coulomb Wechselwirkung:

$$W(\vec{r}) = \frac{q^2}{|\vec{r}|} \qquad \Delta W(\vec{r}) = -4\pi \, q^2 \, \delta(\vec{r}) \tag{11.22}$$

$$W(\vec{k}) = \frac{1}{k^2} \int d^3 r \, W(r) \, k^2 \, e^{-i \, \vec{k} \cdot \vec{r}} = -\frac{1}{k^2} \int d^3 r \, W(r) \, \Delta \, e^{-i \, \vec{k} \cdot \vec{r}}$$
$$= -\frac{1}{k^2} \int d^3 r \, e^{-i \, \vec{k} \cdot \vec{r}} \, \Delta \, W(r) = \frac{4\pi \, q^2}{k^2}$$
(11.23)

Mit (11.19)

$$\overline{W}_{\rm ex}(k) = \frac{q^2 k_F}{\pi} \left\{ 1 + \frac{1 - (k/k_f)^2}{2 k/k_f} \ln \left| \frac{k + k_F}{k - k_F} \right| \right\}$$
(11.24)



23 15.1.03

Grundzustandsenergie (11.12)

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{3}{4\pi} q^2 k_F$$
(11.28)

Gleichgewicht:

$$\frac{\partial E/N}{\partial k_F} = 0 \qquad k_F = \frac{5}{4\pi} \frac{m q^2}{\hbar^2} = \frac{5}{4\pi a_B} \qquad (11.29)$$

Dichte

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{1}{3\pi^3} k_F^3 \tag{11.30}$$

Mit $a_B = 0.529 \cdot 10^{-8}$ cm: $k_F \approx 0.75 \cdot 10^8$ cm⁻¹. Vergleich $Li: 1.1 \cdot 10^8$ $Na: 0.9 \cdot 10^8$ $K: 0.73 \cdot 10^8$ $Cu: 1.35 \cdot 10^8$ $Ag: 1.2 \cdot 10^8$

Korrelationsfunktion

$$g(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_{s,s'} \langle \Phi | \psi^{\dagger}(\vec{r},s)\psi^{\dagger}(\vec{r}',s')\psi(\vec{r},s)\psi^{\dagger}(\vec{r}',s')\psi(\vec{r},s) | \Phi \rangle$$

= $\rho^{2} \left\{ 1 - \left[\frac{3}{2} \frac{\sin(k_{F}|\vec{r} - \vec{r}'|) - k_{F}|\vec{r} - \vec{r}'|\cos(k_{F}|\vec{r} - \vec{r}'|)}{\left(k_{F}|\vec{r} - \vec{r}'|\right)^{3}} \right]^{2} \right\}$ (11.31)



Energie

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \int d^3 r \, W(r) \left(g(r) - 1\right)$$
$$= \frac{E_0}{N} - \frac{W_c}{N}$$
(11.32)

Intrinsischer Ferromagnetismus:

$$k_{F,\uparrow} = \sqrt[3]{1+x} k_F \qquad k_{F,\Downarrow} = \sqrt[3]{1-x} k_F$$
$$\rho_{\uparrow} = \frac{1}{2} (1+x) \rho \qquad \rho_{\Downarrow} = \frac{1}{2} (1-x) \rho$$

Energie

$$E(x) = \frac{1}{2} E_0 \left\{ (1+x)^{5/3} + (1-x)^{5/3} \right\} - \frac{1}{2} W_c \left\{ (1+x)^{7/3} + (1-x)^{7/3} \right\}$$
(11.33)

Für $W_c < \frac{5}{14}E_0$: E(x) ist für x = 0 minimal: Paramagnet Für $W_c > \frac{5}{14}E_0$: E(x) ist für $x \neq 0$ minimal: Intrinsischer Ferromagnet.

11.3 Abschirmung (Thomas-Fermi-Näherung)

Testladung -Zq am Ort $\vec{r} = 0$.



Positive Überschussladung durch verringerte Elektronendichte in der Nähe der negativen Testladung.

Potential $V_s(\vec{r})$

$$\Delta V_s(\vec{r}) = -4\pi q^2 \left\{ Z\delta(\vec{r}) - \rho(\vec{r}) + \overline{\rho} \right\}$$
(11.34)

Einteilchenenergien für Elektronen mit effektiver Masse m^* in einem langsam veränderlichen Potential $V_s(\vec{r})$

$$\epsilon(\vec{k},\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + V_s(\vec{r})$$
(11.35)

Lokaler Fermiimpuls $k_F(r)$

$$\frac{\hbar^2 k_F(\vec{r})^2}{2m^*} + V_s(\vec{r}) = \epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$$
(11.36)

Lokale Dichte

$$\rho(\vec{r}) = \frac{k_F(\vec{r})^3}{3\pi^3} \approx \overline{\rho} + \frac{k_F^2}{\pi^3} \left\{ k_F(r) - k_F \right\} \approx \overline{\rho} - \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 k_F} V_s(\vec{r})$$
(11.37)

Lösung der Poissongleichung (11.34)

$$V_s(\vec{r}) = \frac{Z q^2}{|\vec{r}|} e^{-r/\ell_s}$$
(11.38)

Abschirmlänge (Bohr'scher Radius $a_B=\hbar^2/mq^2$)

$$\ell_s = \sqrt{\frac{\epsilon_F}{6\pi\overline{\rho}q^2}} = \sqrt{\frac{\pi a_B}{4k_F}}$$
(11.39)

Mittlerer Elektronenabstand

$$r_0 = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi\bar{\rho}}} = \sqrt[3]{\frac{9\pi}{4}} \frac{1}{k_F} \qquad \qquad \ell_s = \frac{1}{2}\sqrt[3]{\frac{\pi}{3}} \sqrt{a_B r_0} \qquad (11.40)$$

Typische Werte für Metalle: $\ell_s \sim r_0 \sim a_B$. Hartree-Fock Rechnung mit abgeschirmtem Potential, (11.23)

$$W(\vec{k}) = \frac{4\pi q^2}{k^2 + \kappa_s^2} \qquad \qquad \kappa_s = \frac{1}{\ell_s} \tag{11.41}$$

Mit (11.19)

$$\overline{W}_{ex}(k) = \frac{q^2 k_F}{\pi} \left\{ 1 + \frac{k_F^2 - k^2 + \kappa_s^2}{4kk_F} \ln\left(\frac{(k+k_f)^2 + \kappa_s^2}{(k-k_f)^2 + \kappa_s^2}\right) - \frac{\kappa_s}{k_F} \operatorname{arctanh}\left(\frac{2k_F\kappa_s}{k_F^2 + \kappa_s^2 - k^2}\right) \right\}$$
(11.42)

Damit sind $\overline{W}_{\rm ex}(k)$ und seine Ableitungen für $k = k_F$ nicht singulär, und die effektive Masse und die Zustandsdichte an der Fermikante sind endlich. Typischerweise findet man $m^* \approx m$.

11.4 Optische Eigenschaften, Plasmaschwingungen

Äußeres elektrisches Feld $\vec{E}_0(\vec{r},t)$, Polarisation $\vec{P}(\vec{r},t)$.

Kraft auf ein Elektron

$$\vec{K}(\vec{r},t) = -q \left\{ \vec{E}_0(\vec{r},t) + 4\pi \vec{P}(\vec{r},t) \right\}$$
(11.43)

Poissongleichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{P}(\vec{r}, t) = -q \Big\{ n(\vec{r}, t) - \overline{n} \Big\}$$
(11.44)

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t)$$
(11.45)

Newton'sches Gesetz: $m \frac{\partial}{\partial t} \vec{v}(\vec{r},t) = K(\vec{r},t)$, Strom $\vec{j}(\vec{r},t) = \vec{v}(\vec{r},t) n(\vec{r},t)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{j}(\vec{r},t) = -\frac{q}{m} \left\{ \vec{E}_0(\vec{r},t) + 4\pi \vec{P}(\vec{r},t) \right\} n(\vec{r},t)$$
(11.46)

Mit (11.44) und (11.45)

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{P}(\vec{r}, t) = q \, \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) \qquad \qquad \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}(\vec{r}, t) = q \, \vec{j}(\vec{r}, t) \tag{11.47}$$

Mit (11.46)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\vec{P}(\vec{r},t) \approx -\frac{q^2\,\overline{n}}{m} \left\{ \vec{E}_0(\vec{r},t) + 4\pi\vec{P}(\vec{r},t) \right\}$$
(11.48)

Frequenzabhängige Dielektrizitätskonstante: $4\pi \vec{P}(\omega) = \{\epsilon(\omega) - 1\} \vec{E}_0(\omega)$

$$\epsilon(\omega) = \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_P^2} \qquad \qquad \omega_P = \sqrt{\frac{4\pi q^2 \overline{n}}{m}} \qquad (11.49)$$

Plasmafrequenz ω_P .

Plasmaschwingungen (kollektive Anregungen) für $\omega = \omega_P$.

Lichtgeschwindigkeit:

$$c^{2}(\omega) = \frac{c_{0}^{2}}{\epsilon(\omega)}$$
(11.50)

Keine Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen für $\omega < \omega_P$ (totalreflektierend), transparent für $\omega > \omega_P$.

11.5 Fermi-Flüssigkeit (Landau-Theorie)

Betrachte

$$H(\lambda) = \sum_{i} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\lambda \sum_{i,j} W(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$
(11.51)

 $\lambda = 0$: freies Fermigas, $\lambda = 1$: wechselwirkendes Fermigas.

Bei adiabatischem Einschalten der Wechselwirkung erhält man eine eindeutige Zuordnung von Zuständen des freien Systems zu Zuständen des wechselwirkenden Systems

$$|\stackrel{\circ}{\Phi}_n\rangle \leftrightarrow |\Phi_n(\lambda)\rangle \leftrightarrow |\Psi_n\rangle$$
 (11.52)

z.B. Grundzustand

$$| \stackrel{\circ}{\Phi}_{0} \rangle \leftrightarrow | \Psi_{0} \rangle \qquad \stackrel{\circ}{E}_{0} \leftrightarrow E_{0} \qquad \text{mit} \qquad | \stackrel{\circ}{\Phi}_{0} \rangle = \prod_{|\vec{k}| < k_{F}, s} c^{\dagger}(\vec{k}, s) | 0 \rangle \quad (11.53)$$

Einquasiteilchenzustand $(|\vec{k}| > k_F)$

$$c^{\dagger}(\vec{k},s)|\stackrel{\circ}{\Phi}_{0}\rangle = |\stackrel{\circ}{\Phi}_{\vec{k},s}\rangle \leftrightarrow |\Psi_{\vec{k},s}\rangle = \tilde{c}^{\dagger}(\vec{k},s)|\Psi_{0}\rangle \quad (11.54)$$

Einquasilochzustand ($|\vec{k}| < k_F$)

$$c(\vec{k},s)|\stackrel{\circ}{\Phi}_{0}\rangle = |\stackrel{\circ}{\Phi}_{\vec{k},s}\rangle \leftrightarrow |\Psi_{\vec{k},s}\rangle = \tilde{c}(\vec{k},s)|\Psi_{0}\rangle \quad (11.55)$$



Impuls: $\vec{P} = \sum_{i} \vec{p_i}$. Wegen [P, W] = 0

$$\vec{P} \mid \stackrel{\circ}{\Phi}_{\vec{k},s} \rangle = \hbar \vec{k} \mid \stackrel{\circ}{\Phi}_{\vec{k},s} \rangle \qquad \qquad \vec{P} \mid \Psi_{\vec{k},s} \rangle = \hbar \vec{k} \mid \Psi_{\vec{k},s} \rangle \qquad (11.56)$$

Energie (großkanonisch) für $|\vec{k}| > k_F$

$$\left\{ H - \mu N \right\} | \stackrel{\circ}{\Phi}_{\vec{k},s} \rangle = \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + \stackrel{\circ}{E}_0 - \mu N \right\} | \stackrel{\circ}{\Phi}_{\vec{k},s} \rangle$$

$$\left\{ H - \mu N \right\} \left| \Psi_{\vec{k},s} \right\rangle = \left\{ \epsilon(\vec{k}) - \mu + E_0 - \mu N \right\} \left| \Psi_{\vec{k},s} \right\rangle$$

$$(11.57)$$

Entsprechend für Quasilochzustand mit $|\vec{k}| < k_F$. Für $|\vec{k}| \rightarrow k_F \ \epsilon(\vec{k}) \rightarrow \epsilon_F = \mu$ und für $|\vec{k}| \approx k_F$ ist

$$\epsilon(\vec{k}) \approx \epsilon_F + \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} \left(|\vec{k}| - k_F \right) \tag{11.58}$$

Zweiquasiteilchenzustand ($|\vec{k}| > k_F; |\vec{k'}| > k_F$)

$$\left|\Psi_{\vec{k},s;\vec{k}',s'}\right\rangle = \tilde{c}^{\dagger}(\vec{k}',s')\,\tilde{c}^{\dagger}(\vec{k},s)\left|\Psi_{0}\right\rangle \tag{11.59}$$

Energieerwartungswert

$$\left\langle \Psi_{\vec{k},s;\vec{k}',s'} \middle| \left\{ H - \mu N \right\} \middle| \Psi_{\vec{k},s;\vec{k}',s'} \right\rangle - \left\langle \Psi_0 \middle| \left\{ H - \mu N \right\} \middle| \Psi_0 \right\rangle$$

= $\epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k}') - 2\,\mu + f(\vec{k},s;\vec{k}',s')$ (11.60)

Entsprechend für Quasiteilchenlochzustand und Zweiquasilochzustand.

Für $|\vec{k}| \approx k_F$ und $|\vec{k}'| \approx k_F$ hägt $f(\vec{k}, s; \vec{k}', s')$ nur vom Winkel ϑ zwischen \vec{k} und \vec{k}' und vom gemeinsamen Spinzustand (Singulet oder Triplet) ab. Entwickelt man die Wechselwirkungsparameter nach Potenzen von $\cos \vartheta$,

$$f(\vec{k}, s; \vec{k}', s') = \sum_{\ell} f_{\text{singulet/triplet}}^{(\ell)} \cos^{\ell}(\vartheta)$$
(11.61)

kann man die führenden Koeffizienten aus Experimenten, z.B. zur Kompressibilität und magnetischer Suszeptibilität bestimmen. Aus diesen Parametern, die auch die Streuung von Quasiteilchen beschreiben, lassen sich dann auch Transportkoeffizienten berechnen.

12 Supraleitung

12.1 Phononinduzierte Wechselwirkung

Elektron Phonon Wechselwirkung: Ortskoordinate eines Elektrons $\vec{x_i}$; Ruhelage eine Gitterions $\vec{R_n}$; Auslenkung

$$\vec{U}_n = \vec{X}_n - \vec{R}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q},\lambda} \vec{\eta}(\vec{q},\lambda) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega(\vec{q},\lambda)}} \Big\{ a^{\dagger}(\vec{q},\lambda) + a(-\vec{q},\lambda) \Big\}$$
(12.1)

Elektron Phonon Wechselwirkung

$$W_{\rm el,ph} = \sum_{i,n} \left\{ W(\vec{x}_i - \vec{X}_n) - W(\vec{x}_i - \vec{R}_n) \right\}$$

= $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, s, \vec{q}, \lambda} F(\vec{q}, \lambda) c^{\dagger}(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}, s) c(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}, s)$
 $\times \left\{ a^{\dagger}(\vec{q}, \lambda) + a(-\vec{q}, \lambda) \right\}$ (12.2)
 $k - \frac{1}{2}q$

mit

$$F(\vec{q},\lambda) = \frac{N}{V} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega(\vec{q},\lambda)}} \int d^3r \, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \, \vec{\eta}(\vec{q},\lambda) \cdot \vec{\nabla}W(\vec{r})$$
(12.3)

Störungsrechnung für Zeitentwicklungsoperator:

Es sei $H = \overset{\circ}{H} + W$ und $\overset{\circ}{H} |A\rangle = \overset{\circ}{E}_A |A\rangle = \hbar \omega_A |A\rangle$. Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \qquad \qquad \stackrel{\circ}{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\stackrel{\circ}{H}t} \qquad (12.4)$$

25 22.1.03

Störungsrechnung:

$$U(t) = \overset{\circ}{U}(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} dt' \overset{\circ}{U}(t-t') W \overset{\circ}{U}(t') - \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} dt'' \overset{\circ}{U}(t-t') W \overset{\circ}{U}(t'-t'') W \overset{\circ}{U}(t'') + \cdots$$
(12.5)

Mit $W_{A,B} = \langle A | W | B \rangle$

$$\langle A | U(t) | B \rangle = e^{-i\omega_A t} \delta_{A,B} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \, e^{-i\omega_A(t-t')} \, W_{A,B} \, e^{-i\omega_B t'}$$

$$- \sum_C \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \, e^{-i\omega_A(t-t')} \, W_{A,C} \, e^{-i\omega_C(t'-t'')} \, W_{C,B} \, e^{-i\omega_B t''} + \cdots$$
(12.6)

Fouriertransformierte

$$\langle A | U(\omega) | B \rangle = -i \lim_{\gamma \to 0} \int_0^\infty dt \, e^{(i\omega - \gamma)t} \langle A | U(t) | B \rangle$$
(12.7)

$$\langle A | U(\omega) | B \rangle = \frac{\delta_{A,B}}{\omega - \omega_A + i\gamma} + \frac{1}{\omega - \omega_A + i\gamma} W_{A,B} \frac{1}{\omega - \omega_B + i\gamma}$$
(12.8)
+ $\sum_C \frac{1}{\omega - \omega_A + i\gamma} W_{A,C} \frac{1}{\omega - \omega_C + i\gamma} W_{C,B} \frac{1}{\omega - \omega_B + i\gamma} + \cdots$

Effektive Wechselwirkung $W_{\rm eff}$ (Fröhlich): $W_{\rm eff}(\omega)$ so daß 1.Ordnung in $W_{\rm eff} \approx 2.$ Ordnung in $W_{\rm el,ph}$

$$W_{\text{eff},A,B}(\omega) = \sum_{C} W_{\text{el ph},A,C} \frac{1}{\omega - \omega_{C} + i\gamma} W_{\text{el ph},C,B}$$
(12.9)



Für die gezeigten Diagramme ist $W_{\text{el ph},A,C} = F(\vec{q},\lambda)$ und $\hbar\omega_C = \epsilon(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}) + \epsilon(\vec{k'} - \frac{1}{2}\vec{q}) + \hbar\omega(\vec{q},\lambda)$ b.z.w. $\hbar\omega_C = \epsilon(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) + \epsilon(\vec{k'} + \frac{1}{2}\vec{q}) + \hbar\omega(-\vec{q},\lambda)$ und $\hbar\omega_A = \epsilon(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) + \epsilon(\vec{k'} - \frac{1}{2}\vec{q})$ sowie $\hbar\omega_B = \epsilon(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}) + \epsilon(\vec{k'} + \frac{1}{2}\vec{q}).$

Für die Supraleitung entscheidend ist, wie gezeigt wird, die Wechselwirkung von Elektronen mit $|\epsilon(\vec{k}) - \mu| \sim \Delta$ mit $\Delta \sim k_B T_c \ll k_B \Theta_D$. Damit ist für $|\hbar\omega - 2\mu| \sim \Delta$ mit (12.2)

$$W_{\text{eff}}(\vec{q}) \approx -\frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{F(\vec{q}, \lambda)^2}{\omega(\vec{q}, \lambda)}$$
 (12.10)

12.2 BCS-Grundzustand

Hamiltonoperator (Großkanonisch)

$$H - \mu N = \sum_{\vec{k},s} c^{\dagger}(\vec{k},s) \Big\{ \epsilon_0(\vec{k}) - \mu \Big\} c(\vec{k},s)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},s,s'} c^{\dagger}(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q},s) c^{\dagger}(\vec{k}' + \frac{1}{2}\vec{q},s') W(\vec{k},\vec{k}',\vec{q}) c(\vec{k}' - \frac{1}{2}\vec{q},s') c(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q},s)$$
(12.11)

 $\text{mit } W(\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}) < -\frac{1}{V}G < 0 \ \text{für } |\epsilon_0(\vec{k} \pm \frac{1}{2}\vec{q}) - \mu| < \hbar\omega_D \ \text{und } |\epsilon_0(\vec{k}' \pm \frac{1}{2}\vec{q}) - \mu| < \hbar\omega_D.$

Es sei Hartree-Fock Grundzustand $|\Phi_0\rangle$, Hartree-Fock Einteilchenenergien $\epsilon_0(\vec{k})$ Fermienergie $\epsilon_0(k_F) = \mu$.

Betrachte Hartree-Fock Grundzustand + "gebundenes Paar" mit Gesamtimpuls 0 und Gesamtspin 0 (Cooper)

$$|\Psi\rangle = \sum_{\vec{k}} v(\vec{k}) c^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{k}) c^{\dagger}_{\downarrow}(-\vec{k})$$
(12.12)

mit $v(\vec{k}) = \tilde{v}(|\vec{k}| - k_F)$ und $\tilde{v}(\kappa) = 0$ für $\kappa < 0$ oder $\kappa > K$, wobei $K \sim \frac{m\omega_D}{\hbar k_F} \ll k_F$ sei.

Energiedifferenz, mit $\epsilon_0(\vec{k}) - \mu \approx \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} (|\vec{k}| - k_F)$ $\Delta E = \langle \Psi | \{ H - \mu \hat{N} \} | \Psi \rangle - \langle \Phi_0 | \{ H - \mu \hat{N} \} | \Phi_0 \rangle$ $= 2 \sum_{\vec{k}} v(\vec{k})^2 \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} (|\vec{k}| - k_F) + \sum_{\vec{k}, \vec{q}} v(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) v(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}) W(\vec{k}, -\vec{k}, \vec{q}) \quad (12.13)$ Abschätzung für $K \ll k_F$

$$\frac{1}{V}\Delta E < \frac{\hbar^2 k_F^3}{\pi^2 m^*} \int_0^K \mathrm{d}\kappa \,\kappa \,\tilde{v}(\kappa)^2 - \frac{G}{(2\pi)^6} \left(\int_0^K \mathrm{d}\kappa \,\tilde{v}(\kappa)\right)^2 \tag{12.14}$$

Durch geeignete Wahl von $\tilde{v}(\kappa)$, z.B. $\tilde{v}(\kappa) \sim \kappa^{-1+\eta} \min \eta \to 0$, kann man erreichen, daß $\Delta E < 0$ ist. Damit ist gezeigt, daß der Hartree-Fock Grundzustand für attraktive Wechselwirkung (G > 0) nicht der tatächliche Grundzustand ist.

BCS-Testwellenfunktion (Bardeen, Cooper, Schrieffer, 1957): Gebundene Paare (Cooper-Paare)

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\vec{k}} \left\{ u(\vec{k}) + v(\vec{k})c^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{k})c^{\dagger}_{\downarrow}(-\vec{k}) \right\} |0\rangle$$
(12.15)

Normierung:

$$u(\vec{k})^2 + v(\vec{k})^2 = 1$$
(12.16)

Mittlere Teilchenzahl

$$\left\langle \hat{N} \right\rangle = \sum_{\vec{k}} \left\langle \Psi_0 \right| \left\{ c^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{k}) c_{\uparrow}(\vec{k}) + c^{\dagger}_{\downarrow}(-\vec{k}) c_{\downarrow}(-\vec{k}) \right\} \left| \Psi_0 \right\rangle = 2 \sum_{\vec{k}} v(\vec{k})^2$$
(12.17)

Varianz

$$\sqrt{\left\langle \hat{N}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{N} \right\rangle^2} = \sqrt{4 \sum_{\vec{k}} \left\{ v(\vec{k})^2 - v(\vec{k})^4 \right\}} \sim \sqrt{N}$$
(12.18)

Damit sind die relativen Schwankungen der Teilchenzahl im thermodynamischen Grenzfall vernachlässigbar. **26** 27.1.03

Erwartungswert der Energie: Zur Berechnung von $\langle W \rangle$ betrachte

$$\langle \Psi_0 | c^{\dagger}(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}, s) c^{\dagger}(\vec{k}' + \frac{1}{2}\vec{q}, s') W(\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}) c(\vec{k}' - \frac{1}{2}\vec{q}, s') c(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}, s) | \Psi_0 \rangle$$
(12.19)

Nichtverschwindende Beiträge nur für $\vec{k}' = -\vec{k}$ und s' = -s. In $|\Psi_0\rangle$, (12.15), ist der Beitrag $\sim v(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) u(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q})$, in $\langle \Psi_0 |$ ist der Beitrag $\sim u(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) v(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q})$ zu wählen.

$$E - \mu N = 2 \sum_{\vec{k}} v(\vec{k})^2 \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} (|\vec{k}| - k_F) + \sum_{\vec{k}, \vec{q}} u(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) v(\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}) u(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}) v(\vec{k} - \frac{1}{2}\vec{q}) W(\vec{k}, -\vec{k}, \vec{q})$$
(12.20)

Vereinfachtes Modell:

$$W(\vec{k}, -\vec{k}, \vec{q}) = \begin{cases} -\frac{1}{V}G\\ 0 \end{cases} \quad \text{für} \quad |\epsilon_0(\vec{k} \pm \frac{1}{2}\vec{q}) - \mu| \begin{cases} < \\ > \end{cases} \hbar\omega_D \quad (12.21)$$

Variationsrechnung mit $u(\vec{k}) = \sqrt{1 - v(\vec{k})^2}$, Zustandsdichte $g(\epsilon)$ und

$$\Delta = \frac{1}{V}G\sum_{\vec{k}} u(\vec{k})v(\vec{k}) = G\int d\epsilon \,g(\epsilon) \,u(\epsilon) \,v(\epsilon)$$
(12.22)

wobei $\epsilon = \frac{\hbar^2 k_F}{m^*}(|\vec{k}| - k_F) + \mu$ und $u(\vec{k}) \to u(\epsilon); v(\vec{k}) \to v(\epsilon)$. Variationsgleichung

$$\frac{\delta \left(E - \mu N\right)}{\delta v(\epsilon)} = 4 \left(\epsilon - \mu\right) v(\epsilon) - 2 \frac{1 - 2 v(\epsilon)^2}{\sqrt{1 - v(\epsilon)^2}} \Delta = 0$$
(12.23)

Lösung:

$$u(\epsilon) v(\epsilon) = \frac{\frac{1}{2}\Delta}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}}$$
(12.24)

Mit (12.22):

$$\frac{1}{2}G\int_{\mu-\hbar\omega_D}^{\mu-\hbar\omega_D} \mathrm{d}\epsilon \,\frac{g(\epsilon)}{\sqrt{(\epsilon-\mu)^2+\Delta^2}} = 1 \tag{12.25}$$

Für $\ \hbar\omega_D\ll\mu=\epsilon_F\ {\rm kann\ man}\ g(\epsilon)\approx g(\mu)\ {\rm setzen,\ und}$

$$\frac{2}{g(\mu)G} = \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\mathrm{d}\hat{\epsilon}}{\sqrt{\hat{\epsilon}^2 + \Delta^2}} = 2\operatorname{arcsinh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right) \tag{12.26}$$

Für schwache Kopplung $g(\mu G) \ll 1$ ist $\Delta \ll \hbar \omega_D$ und $\operatorname{arcsinh}(\mathbf{x}) \underset{x \gg 1}{\longrightarrow} \ln(x)$.

Damit ist

$$\Delta = 2\hbar\omega_D e^{-1/g(\mu)G}$$
(12.27)
und
$$\begin{cases} v(\epsilon) \\ u(\epsilon) \end{cases} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)}$$
(12.28)



Alternative Darstellung des BCS-Grundzustands

Es sei

$$\tilde{c}_{s}^{\dagger}(\vec{k}) = \begin{cases} c_{s}^{\dagger}(\vec{k}) \\ c_{-s}(-\vec{k}) \end{cases} \quad \tilde{u}(\vec{k}) = \begin{cases} u(\vec{k}) \\ v(\vec{k}) \end{cases} \quad \tilde{v}(\vec{k}) = \begin{cases} v(\vec{k}) \\ u(\vec{k}) \end{cases} \quad \text{für } \begin{cases} k > k_{F} \\ k < k_{F} \end{cases}$$
(12.29)

BCS-Grundzustand

$$\begin{split} |\Psi_{0}\rangle &= \prod_{\vec{k}} \left\{ \tilde{u}(\vec{k}) + \tilde{v}(\vec{k})\tilde{c}^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{k})\tilde{c}^{\dagger}_{\downarrow}(-\vec{k}) \right\} |\Phi_{0}\rangle \\ &= \prod_{\vec{k}} \tilde{u}(\vec{k}) e^{\sum_{\vec{k}} \frac{\tilde{v}(\vec{k})}{\tilde{u}(\vec{k})}\tilde{c}^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{k})\tilde{c}^{\dagger}_{\downarrow}(-\vec{k})} \end{split}$$
(12.30)



Quasiteilchen-Feldoperatoren

$$\tilde{\psi}_s^{\dagger}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\tilde{c}^{\dagger}(\vec{k})$$

$$\tilde{c}^{\dagger}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int \mathrm{d}^3 r \, \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\tilde{\psi}^{\dagger}_s(\vec{r}) \tag{12.31}$$

Damit ist

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\tilde{v}(\vec{k})}{\tilde{u}(\vec{k})} \tilde{c}^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{k}) \tilde{c}^{\dagger}_{\downarrow}(-\vec{k}) = \int \mathrm{d}^{3}r \int \mathrm{d}^{3}\rho \,\varphi(\vec{\rho}) \,\tilde{\psi}^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{\rho}) \,\tilde{\psi}^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{\rho}) \tag{12.32}$$

mit der "Paarwellenfunktion"

$$\varphi(\vec{\rho}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\tilde{v}(\vec{k})}{\tilde{u}(\vec{k})} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}}$$
(12.33)

Damit ist der BCS-Grundzustand aus dem Hartree-Fock Grundzustand durch gebundene Teilchen-Teilchen- b.z.w. Loch-Loch-An-

regungen hervorgegangen. Die Paarwellenfunktion im k-Raum $\frac{\tilde{v}(\vec{k})}{\tilde{u}(\vec{k})}$ hat eine typische Breite $\kappa = \frac{m^*\Delta}{\hbar^2 k_F} \ll k_F$. Die Paarwellenfunktion im Ortsraum $\varphi(\vec{\rho})$ osziliert mit der Wellenzahl k_F , ihre Einhüllende zerfällt mit der "Kohärenzlänge" $\xi_0 = \frac{2\pi}{\kappa}$.



Der BCS-Grundzustand kann nicht mittels Störungsrechnung in der Stärke der Wechselwirkung G gefunden werden, wie man an der wesentlichen Singularität von Δ , (12.27), als Funktion von G sieht.

Nicht berücksichtigt wurde die (abgeschirmte) Coulomb-Abstoßung der Elektronen. Diese ist für kurze Abstände stark, allerdings ist ihre Reichweite $\ell_s \ll \xi_0$. Ihr Effekt ist deshalb klein, sie kann jedoch dazu führen, daß in bestimmten Metallen keine Supraleitung auftritt.

12.3 Angeregte Zustände, Quasiteilchen

Definiere "Quasiteilchenoperatoren" ($s = \pm 1$)

$$b_{s}^{\dagger}(\vec{k}) = u(\vec{k}) c_{s}^{\dagger}(\vec{k}) - s v(\vec{k}) c_{-s}(-\vec{k}) \qquad b_{s}(\vec{k}) = u(\vec{k}) c_{s}(\vec{k}) - s v(\vec{k}) c_{-s}^{\dagger}(-\vec{k})$$
(12.34)

so daß

$$\left\{b_{s}^{\dagger}(\vec{k}), b_{s'}(\vec{k}')\right\} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{s, s'} \qquad \left\{b_{s}^{\dagger}(\vec{k}), b_{s'}^{\dagger}(\vec{k}')\right\} = 0 \qquad \left\{b_{s}(\vec{k}), b_{s'}^{\dagger}(\vec{k}')\right\} = 0 \quad (12.35)$$

und

$$b_s(\vec{k}) |\Psi_0\rangle = 0 \tag{12.36}$$

i.e. der BCS-Grundzustand ist "Quasiteilchenvakuum".

Der Hamiltonoperator, ausgedrückt durch Quasiteilchenoperatoren, ist

$$H - \mu \hat{N} = E_0 - \mu N + \sum_{\vec{k},s} b_s^{\dagger}(\vec{k}) \,\epsilon(\vec{k}) \,b_s(\vec{k}) + W_Q \tag{12.37}$$

Diesen Ausdruck erhält man durch Einsetzen von (12.34) in (12.11) und "Normalordnung", i.e. Vertauschung der Quasiteilchenoperatoren so daß die Erzeuger

 $b^{\dagger}(\cdots)$ jeweils links von den Vernichtern $b(\cdots)$ stehen. Die "Quasiteilchenwechselwirkung" W_Q enthält 4 Quasiteilcheoperatoren und ist bei tiefen Temperaturen, i.e. geringer Zahl von Quasiteilchen, vernachlässigbar.

Die resultierende Quasiteilchenenergie ist

$$\epsilon(\vec{k}) = \sqrt{\left(\epsilon_0(\vec{k}) - \mu\right)^2 + \Delta^2} \qquad (12.38)$$

Das Anregungsspektrum hat also eine Energielücke Δ . Sie kann z.B. aus der Spannungsabhängigkeit des Tunnelstroms durch einen Normalleiter-Supraleiter-Kontakt gemessen werden. Die spezifische Wärme ist für tiefe Temperaturen

 $c \sim e^{-\frac{2\Delta}{k_B T}}$

$$1.5$$

$$1.0 \frac{\{\varepsilon(k) - \mu\}/\mu}{0.5 \left[\varepsilon_{o}(k) - \mu\}/\mu}$$

$$0.0 \frac{\{\varepsilon_{o}(k) - \mu\}/\mu}{0.5 \left[0.0 + k/k_{F}\right]}$$

 Δ hängt von der Debyefrequenz ab. Diese zeigt einen Isotopeneffekt $\delta\omega_D \sim -\delta M$, damit ist $\delta\Delta \sim -\delta M$ und auch $\delta T_c \sim -\delta M$.

(12.39)

Experimentelle Bestimmung von Δ durch Tunnelkontakt zwischen Supraleiter und Normalleiter: Kein Strom für Spannung $Vq < \Delta$.

Endliche Temperaturen

Man kann im Hamiltonoperator (12.11) die Feldoperatoren durch die Quasiteilchenoperatoren (12.34) ersetzen. Für die folgenden Überlegungen ist es ausreichend, nur die Beiträge zu berücksichtigen, die in der Besetzungszahldarstellung für Quasiteilchen diagonal sind

$$H - \mu N = 2 \sum_{\vec{k}} \left(\epsilon_0(\vec{k}) - \mu \right) v(\vec{k})^2 - \frac{G}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} u(\vec{k})v(\vec{k})u(\vec{k}')v(\vec{k}') + \sum_{\vec{k},s} \left\{ \left(\epsilon_0(\vec{k}) - \mu \right) \left(u(\vec{k})^2 - v(\vec{k})^2 \right) + \frac{G}{V} u(\vec{k})v(\vec{k}) \sum_{\vec{k}'} u(\vec{k}')v(\vec{k}') \right\} \tilde{n}(\vec{k},s) - \frac{G}{2V} \sum_{\vec{k},s,\vec{k}',s'} u(\vec{k})v(\vec{k})u(\vec{k}')v(\vec{k}') \tilde{n}(\vec{k},s) \tilde{n}(\vec{k}',s') + \cdots$$
(12.40)

wobei $\tilde{n}(\vec{k},s) = \tilde{b}^{\dagger}(\vec{k},s)\tilde{b}(\vec{k},s)$ der Besetzungszahloperator für Quasiteilchen ist. Die Einteilchenenergien erhält man, in Analogie zur Hartree-Fock Rechnung, indem man im letzten Term obiger Gleichung einen der beiden Besetzungszahloperatoren durch seinen Erwartungswert ersetzt

$$\left\langle \tilde{n}(\vec{k},s) \right\rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon(\vec{k})} + 1} \tag{12.41}$$

Eine Rechnung entsprechend der für den Grundzustand liefert

$$\epsilon(\vec{k}) = \sqrt{\left(\epsilon_0(\vec{k}) - \mu\right)^2 + \Delta(T)^2}$$
(12.42)

mit der modifizierten Gapgleichung, (12.26)

$$\frac{2}{g(\mu)G} = \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\mathrm{d}\hat{\epsilon}}{\sqrt{\hat{\epsilon}^2 + \Delta^2(T)}} \left\{ 1 - \frac{2}{1 + \mathrm{e}^{\beta\sqrt{\hat{\epsilon}^2 + \Delta^2(T)}}} \right\} \quad (12.43)$$

Eine Lösung existiert nur für $T < T_c = 0.57 \Delta/k_B$, i.e. bei T_c findet man einen kontinuierlichen Phasenübergang in einen normalleitenden Zustand.

12.4 Ginzburg-Landau Theorie

Stromführender BCS-Zustand

$$\Psi_{\vec{K}}\rangle = \prod_{\vec{k}} \left\{ u(\vec{k}) + v(\vec{k})c^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{K} + \vec{k})c^{\dagger}_{\downarrow}(\vec{K} - \vec{k}) \right\} \left| 0 \right\rangle$$
(12.44)

mit elektrischer Stromdichte (n = N/V)

$$\vec{j}_{e} = \langle \Psi_{\vec{K}} | \frac{-e\hbar}{mV} \sum_{\vec{k},s} \vec{k} c_{s}^{\dagger}(\vec{k}) c_{s}(\vec{k}) | \Psi_{\vec{K}} \rangle = -e \, n \, \frac{\hbar \vec{K}}{m}$$
(12.45)

Feldoperatoren

$$\psi_{s}^{\dagger}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{r}} \,c^{\dagger}(\vec{k}) \qquad c^{\dagger}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^{3}r \,e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_{s}^{\dagger}(\vec{r}) \qquad (12.46)$$

Damit

$$|\Psi_{\vec{K}}\rangle = \prod_{\vec{k}} \left\{ u(\vec{k}) + \frac{v(\vec{k})}{V} \int \mathrm{d}^3 R \,\mathrm{e}^{2i\vec{K}\cdot\vec{R}} \int \mathrm{d}^3 \rho \,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} \psi^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}) \psi^{\dagger}_{\downarrow}(\vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}) \right\} |0\rangle \quad (12.47)$$

oder verallgemeinert, für langsam veränderliche "Kondensatwellenfunktion" $\Psi(\vec{R})$

$$|\Psi_{\vec{K}}\rangle = \prod_{\vec{k}} \left\{ u(\vec{k}) + \frac{v(\vec{k})}{V\sqrt{\frac{1}{2}n}} \int \mathrm{d}^3 R \,\Psi(\vec{R}) \int \mathrm{d}^3 \rho \,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} \psi^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{R} + \frac{1}{2}\vec{\rho}) \psi^{\dagger}_{\downarrow}(\vec{R} - \frac{1}{2}\vec{\rho}) \right\} |0\rangle \quad (12.48)$$

mit Elektronendichte

$$n(\vec{R}) = 2\Psi^*(\vec{R})\Psi(\vec{R})$$
(12.49)

und elektrischer Stromdichte

$$\vec{j}_{\rm e}(\vec{R}) = -\frac{e}{m} \left| \Psi^*(\vec{R}) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi(\vec{R}) \right|$$
(12.50)

Die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\vec{R})$ ist für alle Paare identisch (Bosonen).

Mit Magnetfeld: Vektorpotential

$$\vec{B}(\vec{R}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{R})$$
 Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{R}) = 0$ (12.51)

Klassische Hamiltonfunktion für ein Teilchen der Ladung Q und Masse M

$$H = \frac{1}{2M} \left(\vec{P} - \frac{Q}{c} \vec{A}(\vec{R}) \right)^2$$
(12.52)



64



Geschwindigkeit

$$\vec{V} = \frac{1}{M} \left(\vec{P} - \frac{Q}{c} \vec{A}(\vec{R}) \right)$$
(12.53)

Quantenmechanisch $\vec{P} \rightarrow \frac{\hbar}{mi} \vec{\nabla}.$

Elektrische Stromdichte für Paare mit Masse 2m, Ladung -2eund Dichte $n/2 = \Psi^*(\vec{R})\Psi(\vec{R})$

$$\vec{j}_{e}(\vec{R}) = -\frac{e}{m} \left\{ \left| \Psi^{*}(\vec{R}) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi(\vec{R}) \right| + \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{R}) \Psi^{*}(\vec{R}) \Psi(\vec{R}) \right\}$$
(12.54)

Phänomenologische Theorie für Kondensatwellenfunktion: Ginzburg-Landau Funktional (1950):

$$\mathcal{F}_{\rm GL} = \int d^3 R \left\{ \frac{1}{2} \frac{1}{2m} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{2e}{c} \vec{A}(\vec{R}) \right) \Psi(\vec{R}) \right|^2 - \frac{1}{2} a \left| \Psi(\vec{R}) \right|^2 + \frac{1}{4} b \left| \Psi(\vec{R}) \right|^4 - \frac{1}{8\pi} \vec{B}^2(\vec{R}) \right\}$$
(12.55)

Ginzburg Landau Gleichungen: $\delta \mathcal{F}_{GL} / \delta \Psi^*(\vec{R}) = 0$:

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{2e}{c}\vec{A}(\vec{R})\right)^2 - a + b\left|\Psi(\vec{R})\right|^2\right\}\Psi(\vec{R}) = 0$$
(12.56)

und $\delta \mathcal{F}_{\mathrm{GL}}/\delta \vec{A}(\vec{R}) = 0$: (Maxwell Gleichung)

$$-\Delta \vec{A}(\vec{R}) = \vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{R}) = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{\rm e}(\vec{R})$$
(12.57)

wobei angenommen wird, daß Oberflächenbeiträge verschwinden.

Die Ginzburg-Landau Theorie ist auch auf endliche Temperaturen anzuwenden, wobei der Parameter a = a(T) (und im Prinzip auch b) temperaturabhängig ist. Für die Elektronendichte ist nur der supraleitende Anteil $n_s = n \Delta(T) / \Delta(0)$ zu verwenden. Der normalleitende Anteil $n - n_s$ hat einen endlichen Widerstand und trägt keinen Strom

Beispiel: $\Psi(\vec{R}) = \overline{\Psi} \quad \vec{B}(\vec{R}) = 0$: Mit (12.56):

$$|\overline{\Psi}|^2 = \frac{1}{2}n_s = a/b \tag{12.58}$$

Beispiel: Halbraum, Normalleiter-Supraleiter Grenzfläche

$$\Psi(\vec{R}) = \Psi(x); \ \Psi(x < 0) = 0; \ \vec{B}(\vec{R}) = 0:$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - a + b\Psi^2(x)\right\}\Psi(x) = 0$$
(12.59)

Lösung:

$$\Psi(x) = \tanh\left(\frac{x}{\xi_0}\right)\overline{\Psi}$$
 mit $\xi_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{m\,a}}$ (12.60)

Kohärenzlänge ξ_0 entspricht der Kohärenzlänge der BCS-Theorie.

Beispiel: $\vec{B}(x < 0) = (0, 0, B_0), \ \vec{A}(x < 0) = (0, xB_0, 0): \ \Psi(x > 0) = \overline{\Psi}$ Mit (12.54) und (12.57): London-Gleichungen (F. & H. London, 1935)

$$\vec{j}(\vec{R}) = -\frac{2e^2 n_s}{mc} \vec{A}(\vec{R}) \qquad \Delta \vec{A}(\vec{R}) = \frac{1}{\lambda^2} \vec{A}(\vec{R})$$
$$\Delta \vec{B}(\vec{R}) = \frac{1}{\lambda^2} \vec{B}(\vec{R}) \qquad \text{mit} \qquad \lambda = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi e^2 n_s}} \qquad (12.61)$$

Speziell für obige Randbedingung

$$\vec{B}(x>0) = (0, 0, B_0 e^{-x/\lambda})$$
 (12.62)

 λ : London'sche Eindringtiefe

Thermodynamisches Kritisches Feld

 \mathcal{F}_{GL} stationär: Äußeres Magnetfeld \vec{H}_0 a) Supraleitender Zustand: $\Psi = \overline{\Psi} = a(T)/b$; $\vec{B} = 0$; $\mathcal{F}_{GL}/V = -a^2(T)/4b$ b) Normalleitender Zustand: $\Psi = 0$; $\vec{B} = \vec{H}_0$; $\mathcal{F}_{GL}/V = -\vec{H}_0^2/8\pi$ Koexistenz falls $\mathcal{F}_{GL}^{(a)} = \mathcal{F}_{GL}^{(b)}$. Kritisches Feld

$$H_c(T) = \sqrt{\frac{2\pi a^2(T)}{b}} \approx \sqrt{\frac{2\pi a^2(0)}{b}} \frac{T_c - T}{T_c}$$
(12.63)

Phasenübergang 1. Ordnung für $B_0 = B_c(T)$. Supraleitung nur für $B_0 < B_c(T)$. Flußquantisierung

$$\begin{aligned}
\text{Zylinder mit Loch, Dicke} &\gg \lambda, \text{ Fläche } S_C \text{ mit Rand } C.\\
\text{Im Inneren (z.B. auf } C):\\
|\Psi(\vec{R}_C)| &= \overline{\Psi} \text{ oder } \Psi(\vec{R}_C) = \overline{\Psi} e^{i\varphi(\vec{R}_C)}.\\
\text{Mit (12.56) und (12.54): } \vec{j}_e(\vec{R}_C) &= 0\\
-\hbar \int_C \mathrm{d}\ell \, \vec{t}(\ell) \cdot \vec{\nabla}\varphi(\vec{R}(\ell)) &= 2n\pi\hbar = \frac{2e}{c} \int_C \mathrm{d}\ell \, \vec{t}(\ell) \cdot \vec{A}(\vec{R}(\ell))\\
&= \frac{2e}{c} \int_{S_C} \mathrm{d}^2 f \, \vec{n}(f) \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{R}(f)) = \frac{2e}{c} \int_{S_C} \mathrm{d}^2 f \, \vec{n}(f) \cdot \vec{B}(\vec{R}(f)) = \frac{2e}{c} \Phi_C \quad (12.64)
\end{aligned}$$

i.e. der magnetische Fluß Φ_C ist quantisiert

$$\Phi_C = n\Phi_o \qquad \text{mit} \qquad \Phi_o = \frac{2\pi\hbar c}{2e}$$
(12.65)

wobei der Nenner 2e der Ladung eines Paars entspricht. Experimenteller Nachweis von Cooperpaaren: Doll & Näbauer (1961), Deaver & Fairbank (1961)

SQID: Superconducting Quantum Interferrometer Device

Teilströme $I = I_1 + I_2$. In den Tunnelkontakten ist $j_{1,2} = I_{1,2}/f$, wobei f der Querschnitt des Tunnelkontaktes ist. Die supraleitende Dichte im Tunnelkontakt ist $n_t \ll n_s$, die Länge sei a. Es sei

$$\Psi_{1,2}(\ell) = \sqrt{\frac{1}{2}n_{s,t}} e^{i\varphi(\ell)}$$
(12.66)

Änderung von φ in den Tunnelkontakten

$$\delta\varphi_{1,2} \approx -\frac{2ma}{n_t ef} I_{1,2} \tag{12.67}$$

mit maximalem Strom $|I_{1,2}| < I_c$.

Änderung von φ in den restlichen Teilen, entsprechend der Rechnung zur Flußquantisierung $(\vec{j} = 0)$

$$\Delta \varphi_1 - \Delta \varphi_2 = \frac{2e}{\hbar c} \Phi \tag{12.68}$$

Eindeutigkeit von Ψ :

$$\Delta\varphi_1 + \delta\varphi_1 - \Delta\varphi_2 - \delta\varphi_2 = 2\pi n = \frac{2e}{\hbar c} \Phi - \frac{2ma}{n_t q f} (I_1 - I_2)$$
(12.69)

$$I_1 - I_2 = \frac{n_t e \pi f}{ma} \left(\frac{\Phi}{\Phi_o} - n\right) \tag{12.70}$$

Maximaler Strom I_{max} so daß $I_1 = I_c$, $I_2 < I_c$ oder $I_2 = I_c$, $I_1 < I_c$



Typ II Supraleiter (Abrikosov 1957)

Äußeres Feld $\vec{H_0}$: $\vec{B} = \vec{H_0} + \vec{\nabla} \times \vec{A}$ Supraleiter mit $\xi_0 \ll \lambda$ Betrachte Wirbel mit Radius r_0 und Länge L. Für $r < r_0 - \xi_0$: $\Psi(r) = 0$, $B(r) = B_c$

$$\Delta \mathcal{F}_{\rm GL} = 0 \tag{12.71}$$



Für $r_0 - \xi_0 < r < r_0 + \xi_0$

$$\Delta \mathcal{F}_{\rm GL}/L \approx \frac{\hbar^2 n_s \pi r_0}{m \xi_0} \tag{12.72}$$

Für $r > r_0 + \xi_0$, mit (12.61)

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{1}{\lambda^2}\right\} \left(B(r) - H_0\right) = 0$$
(12.73)

Lösung: Modifizierte Hankelfunktion

$$(B(r) - H_0) = (B_c - H_0) \frac{K_0(r/\lambda)}{K_0(r_0/\lambda)}$$
 (12.74)



mit

$$K_0(x) = \begin{cases} \ln(1/x) \\ \frac{1}{\sqrt{x}} e^{-x} \end{cases} \qquad \text{für} \qquad \begin{cases} x \ll 1 \\ x \gg 1 \end{cases}$$
(12.75)

Fluß um Wirbel, für $r_0 \ll \lambda$ und $H_0 \ll B_c$:

$$\Phi = 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}r \, r B(r) \approx \frac{B_c \lambda^2}{\ln(\lambda/r_0)} \tag{12.76}$$

Keine Beiträge $\sim A^2$ in $\Delta \mathcal{F}_{GL}/L$. Damit für $r > r_0 + \xi_0$

$$\Delta \mathcal{F}_{\rm GL}/L = -\frac{\Phi H_0}{4\pi} \tag{12.77}$$

Minimaler Radius: $r_0 \approx \xi_0$, minimaler Fluß $\Phi = \varphi_0$.

Kritisches Feld H_{c1} : Für $\Delta \mathcal{F}_{GL} \leq 0$ bilden sich spontan Wirbel

$$H_{c1} \approx \frac{\xi_0}{\lambda} H_c \tag{12.78}$$

Observes kritisches Feld: $\Psi(\vec{R}) \rightarrow 0.$ (12.56) linearisiert:

$$\frac{1}{2m} \left\{ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{2e}{c} \vec{A}_0 \right\}^2 \Psi(\vec{R}) = \frac{\hbar^2}{m\xi_0^2} \Psi(\vec{R}) \quad (12.79)$$

Dies ist die Schrödingergleichung eines Teilchens im Magnetfeld. Eigenwerte (siehe nächstes Kapitel) $(n + \frac{1}{2}) 2e\hbar H/mc$. Niedrigster Eigenwert für n = 0, i.e.

$$H = H_{C2} \approx \frac{\hbar c}{e\xi_0} = \frac{\lambda}{\xi_0} H_c \qquad (12.80)$$



13 Elektronen im Magnetfeld

13.1 Einteilchenzustände

Homogenes Magnetfeld in z-Richtung: $\vec{B}=(0,0,B)$

Vektorpotential $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, z.B. $\vec{A} = (-By, 0, 0)$

Hamiltonoperator für Teilchen mit Ladung q im Magnetfeld

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{x}) = \frac{1}{2m} \left\{ \left(p_x - \frac{q}{c} \, y \, B \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\} + V(\vec{x})$$
(13.1)

Freie Teilchen im Magnetfeld: $V(\vec{x}) = 0$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\{k_x x + k_z z\}} \varphi_{\vec{k}}(y)$$
 (13.2)

$$H\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{2m} \Big\{ \Big(\hbar k_x + \frac{q}{c} By \Big)^2 - \hbar^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \hbar^2 k_z^2 \Big\} \mathrm{e}^{i\{k_x x + k_z z\}} \varphi_{\vec{k}}(y)$$
(13.3)

Schrödingergleichung

$$\left\{-\hbar^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{m}{2} \left(\frac{qB}{mc}\right)^2 \left(y + \frac{\hbar c}{qB} k_x\right)^2\right\} \varphi_{\vec{k},n}(y) = \left(\epsilon_{\vec{k},n} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right) \varphi_{\vec{k},n}(y)$$
(13.4)

Eindimensionaler harmonischer Oszillator mit Frequenz ω_c (klassische Zyklotronfrequenz), Eigenwert

$$\epsilon_{\vec{k},n} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + (n + \frac{1}{2}) \hbar \,\omega_c \qquad \omega_c = \frac{|qB|}{mc}$$
(13.5)

1 und $\langle y \rangle = - \frac{\hbar c k_x}{q B}$ und

$$\left\langle \left(y - \langle y \rangle\right)^2 \right\rangle = \frac{1}{2}d^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_c} = \frac{\hbar c}{2|qB|} \qquad \langle y \rangle = -\operatorname{sign}(qB)d^2k_z \qquad (13.6)$$

Zustände für festes n: "Landau-Band"

Zustandsdichte: Volumen V = l b hFür

$$\left. \frac{\hbar k_x c}{qB} \right| < \frac{1}{2}b \qquad |k_x| < \frac{1}{2d^2}b \qquad k_x = \frac{2\pi}{l}n_x \qquad k_z = \frac{2\pi}{h}n_z \tag{13.7}$$

3.8)

Zustandsdichte

$$g(\epsilon) = \frac{2}{V} \sum_{k_x, k_z, n} \delta\left(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}, n}\right)$$
(1)

Mit

$$\sum_{k_x} = \frac{b\,l}{2\pi d^2} \qquad \sum k_z \to \frac{\hbar}{2\pi} \int \mathrm{d}k_z \qquad (13.9)$$


Zustandsdichte

$$g(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2 d^2} \int dk_z \sum_n \delta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c\right)$$
$$= \frac{1}{2\pi^2 d^2 \hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_n \frac{\Theta\left(\epsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c\right)}{\sqrt{\epsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}}$$
(13.10)

 $g(\mu)$ oszilliert als Funktion von B: Zyklotronresonanzen, de Haas-van Alphen Effekt (Oszillationen des Widerstands, Suszeptibilität ···· als Funktion des Magnetfeldes) 10.2.03

Randzustände: $V(\vec{x}) = V(y)$. Schrödingergleichung (13.4):



Beitrag zur x-Komponente des Stroms von Zustand $\varphi_{\vec{k},n}$

$$\left\langle \varphi_{\vec{k},n} \middle| j_x \middle| \varphi_{\vec{k},n} \right\rangle = \int dy \left\{ \frac{\hbar k_x}{m} + \frac{qB}{mc} y \right\} \left| \varphi_{\vec{k},n}(y) \right|^2$$
$$= \operatorname{sign}(qB) \,\omega_c \int dy \left\{ y + \operatorname{sign}(qB) d^2 k_x \right\} \left| \varphi_{\vec{k},n}(y) \right|^2 \tag{13.13}$$

 $\operatorname{Für}\ |k_x| < \tfrac{b}{2d^2} \text{ ist } \left| \varphi_{\vec{k},n}(y) \right|^2 \operatorname{symmetrisch} \operatorname{um}\ -\mathrm{sign}(qB) d^2k_x, \text{ also } \left\langle \varphi_{\vec{k},n} \right| j_x \left| \varphi_{\vec{k},n} \right\rangle \approx 0$ Für $|k_x| > \frac{b}{2d^2}$

$$\left\langle \varphi_{\vec{k},n} \middle| j_x \middle| \varphi_{\vec{k},n} \right\rangle \approx \omega_c \left\{ d^2 k_x - \frac{1}{2} b \operatorname{sign}(k_x) \right\}$$
 (13.14)



Diamagnetische Abschirmströme

 k_x

klassisch

Entartungsgrad: Länge l, Breite b

$$=\frac{2\pi n}{l} \qquad |k|d^2 < \frac{1}{2}b \qquad \qquad \mathcal{N}_n(l,$$

$$\mathcal{N}_{n}(l,b) = \frac{1}{2\pi} \frac{l b}{d^{2}} = \frac{|qB|}{2\pi\hbar c} l b$$
 (13.15)

13.2 Hall Effekt

Probe mit Volumen l b h. Elektrisches Feld in y-Richtung: $V_E(\vec{r}) = q E y; \quad qB > 0$ Schrödingergleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{m}{2}\omega_c^2\left(y + d^2k_x\right)^2 + V(y) + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} - \epsilon_{\vec{k},n}\right\}\varphi_{\vec{k},n}(y) = 0$$
(13.16)

Minimum der potentiellen Energie

$$m\omega_c^2 (y_0 + d^2 k_x) + V'(y_0) = 0 \qquad y_0 = -d^2 k_x + \frac{V'(y_0)}{m\omega_c^2}$$
(13.17)

Beitrag zum Strom von Zustand $\varphi_{\vec{k},n}$, (13.13)

$$\left\langle \varphi_{\vec{k},n} \middle| j_x \middle| \varphi_{\vec{k},n} \right\rangle = \omega_c \int \mathrm{d}y \left\{ y + d^2 k_x \right\} \left| \varphi_{\vec{k},n}(y) \right|^2 \approx \omega_c \left(y_0 + d^2 k_x \right) = \frac{V'(y_0)}{m\omega_c} \quad (13.18)$$

i.e. jeder besetzte Zustand liefert den gleichen Beitrag.

Elektrischer Strom für $V'(y_0) = qE = qU/b$ (U: angelegte Spannung in y-Richtung, n: Dichte der Elektronen)

$$J_x = q n \langle j_x \rangle b h = q c n h \frac{U}{B}$$
(13.19)

Spezifische Leitfähigkeit: $\vec{J} = bh \underline{\sigma} \cdot \vec{E}$ Hall Leitfähigkeit

$$\sigma_{x,y} = \frac{q c n}{B} \tag{13.20}$$

i.e. die Hall Leitfähigkeit unterscheidet Elektronen und Löcher.

Füllfaktor: Zahl der Elektronen in einem Landau-Band, mit (13.15)

$$N_n = h \mathcal{N}_n(l, b) \qquad \eta = \frac{N}{N_n} \qquad \sigma_{x,y} = \operatorname{sign}(q) \frac{q^2}{2\pi\hbar} \eta \qquad (13.21)$$

13.3 Quantisierter Hall Effekt, von Klitzing Effekt

Metall-Oxyd-Halbleiter Struktur (MOS)



Störstellen: Potential W(x, y), langsam veränderlich auf Skala d:

$$\epsilon_n(k) \approx \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + q \, E \, y(k, x) + W\left(x, y(k, x)\right) \tag{13.23}$$



Im ungestörten Bereich existieren nur ausgedehnte Zustände, im gestörten Bereich ausgedehnte und lokalisierte Zustände.

Lokalisierte Zustände tragen nicht zum Strom bei. Da der Strom J_x erhalten ist, kann er im ungestörten Bereich berechnet werden.

Falls μ im Bereich der ausgedehnten Zustände ist, ändert sich der Füllfaktor, i.e. die Hall-Leitfähigkeit ändert sich ebenfalls.

Falls μ im Bereich der lokalisierten Zustände ist, werden bei Änderung von μ b.z.w. U_{Gate} keine ausgedehnten Zustände aufgefüllt, η ist ganzzahlig und



$$\sigma_{xy} = n \frac{q^2}{2\pi\hbar} \tag{13.24}$$

Aus dem Abstand der Plateaus in $\sigma_{x,y}(U_{Gate})$ läßt sich $\frac{q^2}{2\pi\hbar}$ mit großer Präzision bestimmen.

Ausgedehnte Zustände an der Fermikante existieren nur, wenn μ im Bereich der ausgedehnten Zustände ist. Dies erklärt die verschwindende Leitfähigkeit σ_{xx} im Bereich der Plateaus.

Nicht berücksichtigt wurde hier eine weitere Feinstruktur aufgrund der Stark-Wechselwirkung.

Für $\eta < 1$ wurden weitere Plateaus bei $\eta = \frac{n}{2m+1}$ gefunden (gebrochenzahliger Quanten-Hall-Effekt, Störmer et.al. 1982). Hierfür ist die Wechselwirkung der Elektronen wichtig, so daß sich Gruppen von 2m + 1 Elektronen korelliert bewegen (Laughlin 1983).

$$\mathcal{FINIS}$$