

Festkörperphysik

G. Blatter

2006

ii

Professor Dr. G. Blatter
Institut für Theoretische Physik
ETH Zürich

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte vorbehalten. Übertragung aus dem Vorlesungsskript, sowie Satz und Layout: [Christian Helm](#)

Inhaltsverzeichnis

1	Kristalle	1
1.1	Gitter	1
1.2	Klassifikation durch Symmetrien	4
2	Gruppen und ihre Darstellungen	11
2.1	Gruppen \mathcal{G}	11
2.2	Darstellung \mathcal{D} der Gruppe \mathcal{G}	14
2.3	Darstellungen und Eigenwertprobleme	19
2.4	Rotation und Inversion	21
2.5	Spin 1/2	24
2.6	Zeitumkehrinvarianz	30
2.7	Raumgruppen	34
2.8	Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe	39
3	Bandstrukturen	47
3.1	Symmetrieaspekte der Bandstrukturen	48
3.2	Vielteilchenaspekte	67
3.3	Bandstrukturechnungen	75
4	Elektronengas	95
4.1	Grundzustand und Anregungsspektrum	95
4.2	Endliche Temperaturen	102

5	Struktur und Antwort	107
5.1	Struktur des elektronischen Systems	107
5.2	Antwort des elektronischen Systems	109
5.3	Strukturfaktor $S^0(\vec{q}, \omega)$ im Elektronengas	117
5.4	Struktur und Antwort bei endlichen Temperaturen	120
6	Fermi-Liquid-Theorie	125
6.1	Grundkonzepte	125
6.2	Gleichgewichts Thermodynamik	130
6.3	Nichtgleichgewicht und kinetische Gleichung	133
6.4	Kollektive Anregungen	140
6.5	Anregungen im Landau-Fermi-Liquid	150
6.6	Stabilität	151
6.7	Quasiteilchen-Lebenszeiten	153
7	Geladene Fermi-Flüssigkeiten	159
7.1	Dielektrizitätskonstante und Leitfähigkeit	162
7.2	Landau-Silin-Theorie	166
7.3	Transportanalyse	171
7.4	Mikroskopische Analyse	176
7.5	Elektron-Plasmon-Hamiltonoperator	186
7.6	Elektronen in Metallen	189
8	Gitterdynamik	193
8.1	Phononen	193
8.2	Elektron-Phonon-Kopplung	198
8.3	Gitterdefekte	203
9	Quasiteilchen Zerfall und dissipativer Transport	207
9.1	Lebenszeiten	207
9.2	Dissipativer Transport	213

10 Abschirmung: Long. vs Trans.	219
10.1 Maxwell- und konstitutive Gleichungen	219
10.2 Long. und transv. Antwortfunktionen	224
11 Supraleitung	231
11.1 Elektron-Elektron-Wechselwirkung	231
11.2 Eine kurze Geschichte der Supraleitung	237
11.3 Cooperinstabilität	240
11.4 BCS-Grundzustand	244
11.5 Bogoliubov-Valatin-Transformation	248
11.6 Meissner-Ochsenfeld-Effekt	258
12 Ausblick	265

Abbildungsverzeichnis

1.1	Kubische Gitter	2
1.2	Honigwabengitter	2
1.3	Primitive bcc- und fcc-Einheitszelle	3
1.4	Wigner-Seitz-Zellen des bcc- und fcc-Gitters	4
1.5	Beziehungen zwischen den Kristallsystemen	5
1.6	7 Kristallsysteme	6
1.7	5 kubische Punktgruppen	6
1.8	27 nicht-kubische Punktgruppen	8
2.1	kubische oder oktahedrische Gruppe O_h	12
2.2	Lokale Wellenfunktion und Blochwellen	36
2.3	Energieentartung mit Spin	38
2.4	Symmetriereduktion im Ortsraum und im \vec{k} -Raum	43
3.1	Symmetriepunkte des einfach kubischen Kristalls	48
3.2	Bandstruktur im einfach kubischen Kristall	51
3.3	Elementarzelle und Brillouinzone des Diamantgitters	52
3.4	Bandstruktur des Diamantgitters	60
3.5	Bandstrukturen von C, Si und Ge	62
3.6	$\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Kopplung	64
3.7	Bandstruktur von GaAs	65
3.8	Photoemissionsspektrum von Na	69

3.9	Funktion $f(y)$	70
3.10	Hartree-Fock: Selbstenergie und Dispersion	71
3.11	Fast freie Elektronen	77
3.12	Zustandsdichte von parabolischen und cos-Bändern	78
3.13	Wellenfunktionen von Core- und Valenz-Elektronen	84
3.14	Pseudopotentiale Si	87
3.15	Semi-Empirische Pseudopotentiale	87
3.16	Rotationssymmetrische Approximation von $V(\vec{r})$	88
3.17	Wigner-Seitz-Lösung für ϕ_0	90
3.18	Muffin-Tin-Potential V^{MT}	91
4.1	Einteilchenanregungen der Fermikugel	97
4.2	$\varepsilon_{\vec{p}}$ und $ \xi_{\vec{p}} $ für Elektronen und Löcher	98
4.3	Verschobene Fermikugel	99
4.4	Paaranregungsspektrum des freien Elektronengases	100
4.5	Fermiverteilung $f(\varepsilon, T)$	104
5.1	Streuung eines Teilchens an einem Elektronensystem	108
5.2	Analytizität von $\chi(\omega)$	114
5.3	Sprung in $\text{Im } \chi(\omega)$	115
5.4	Feynmangraphen zur Anregung von Teilchen	116
5.5	Integrationscontouren	117
5.6	Phasenraum für Teilchen-Loch-Anregungen	118
5.7	Strukturfaktor $S^0(q, \omega)$ für das freie Elektronengas	119
5.8	Links: Tunnelexperiment	120
6.1	Idee der Fermi-Liquid-Theorie	126
6.2	Bandstruktur von Schweren Fermionen	133
6.3	Streuprozess im Phasenraum	136
6.4	Feynman graphen für Streuprozesse	137
6.5	Deformation der Fermifläche	143

6.6	Struktur der Lösungen $\lambda \in \mathbb{C}$	146
6.7	Oszillationen der Fermifläche bei nulltem/erstem Schall	148
6.8	Geschwindigkeiten des nullten und ersten Schalls	148
6.9	Dämpfungskoeffizient $\alpha(T)$ des ersten Schalls	149
6.10	Vergleich Fermigas und Fermiliquid	152
6.11	Quasiteilchen Lebenszeiten	154
6.12	Streuung von zwei Teilchen	155
6.13	Streuung im Schwerpunktsystem	156
6.14	Geometrie zur Berechnung von Integralen	157
7.1	Diagramm für $E^{(2)}$	161
7.2	Die Auslenkung des Elektronengases um δx erzeugt ein rücktreibendes elektrisches Feld E	165
7.3	Nullter Schall und Plasmaschwingung	168
7.4	Kollektive Moden eines kompensierten geladenen Fermiliquids	169
7.5	Kollektive Moden eines kompensierten geladenen Fermiliquids	172
7.6	$\omega - q$ Diagramm	173
7.7	$\omega - q$ Diagramm	174
7.8	Polarisationsblase	183
7.9	RPA	184
7.10	Dielektrische Funktionen ϵ' und ϵ''	185
7.11	Optische Eigenschaften	186
7.12	Abgeschirmte Coulomb Wechselwirkung	187
8.1	Ein-/zweiatomige lineare Kette	196
8.2	Phonondispersion von Diamant	197
8.3	Modulations Dotierung im Halbleiter: Die Donatoren (Si Atome im AlGaAs) werden weg vom zwei-dimensionalen Elektronen Gas (2DEG) eingeführt, so dass die zurückbleibenden positiven Streuzentren nur wenig streuen. Dieser Trick erlaubt hoch-mobile 2D Elektronen Gase zu realisieren wie sie im Quanten-Hall-Effekt benötigt werden.	204

9.1	$\alpha^2 F(\omega)$ von Sn	209
9.2	$\alpha^2 F(\omega)$ plus Spektrum	210
9.3	Streurate Elektron-Phonon	211
9.4	$\omega - q$ Diagramm	216
9.5	Bloch-Grüneisen $\rho(T)$	218
10.1	Diamagnetismus	223
11.1	Elektron-Elektron-Wechselwirkung	234
11.2	Effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung	236
11.3	Effektive Wechselwirkung $V_{\text{eff}}(\omega)$ (links) und BCS Modellpotential $V_{\vec{k}\vec{k}'}$, attraktiv im Bereich $\hbar\omega_D$ um ε_F herum. Das Modellpotential $V_{\vec{k}\vec{k}'}$, ordnet der Streuung $\vec{k} \uparrow, \vec{k} \downarrow \rightarrow \vec{k}' \uparrow, \vec{k}' \downarrow$ die attraktive Energie $-V < 0$ zu.	237
11.4	Ginzburg-Landau-Funktional	240
11.5	Cooperproblem	241
11.6	Graphische Lösung der Gapgleichung	242
11.7	BCS amplitudes und Fermifunktion	246
11.8	Nesting	250
11.9	Einteilchen Anregungen	252
11.10	Gapfunktion $\Delta(T)$	253
11.11	Supraleitende Zustandsdichte $N(E)$	254
11.12	Spezifische Wärme $C_v(T)$	255
11.13	Innere Energie $U(T)$, Entropie $S(T)$, freie Energie $F(T)$	255
11.14	$I(V)$ und dI/dV am NS-Kontakt	256
11.15	Ultraschalldämpfung und NMR Relaxation	257
11.16	Leitfähigkeit $\sigma'(\omega)$	258
11.17	Shift von Zuständen bei $\pm\vec{k}_F$	261
11.18	Kern $K(q)$ der supraleitenden Dichte	262

Tabellenverzeichnis

2.1	Elemente der kubischen Gruppe O	13
2.2	Charaktertafeln von C_i , O_h , und D_{4h}	16
2.3	Charaktertafeln der orthorhombischen Punktgruppen	17
2.4	Kompatible Darstellungen von $C_{4v} \subset O_h$	18
2.5	Multiplikationstabellen der Darstellungen wichtiger Punktgruppen	18
2.6	Charaktertafel der Gruppe O_3	23
2.7	Charaktertafel der kubischen Gruppe O_h	23
2.8	Dekomposition der Darstellungen $\mathcal{D}^{l\pm}$ in Γ_i	24
2.9	Symmetriereduktion $O_3 \rightarrow O_h \rightarrow D_{4h} \rightarrow D_{2h}$	25
2.10	Faktoren in $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ von C'_{3v}	27
2.11	Doppelgruppen C'_1 , C'_i und C'_{3v}	28
2.12	Doppelgruppe SO'_3	28
2.13	Charaktertafeln von τ und τ'	37
2.14	Konversionstabellen	45
3.1	Symmetrien der \vec{k} -Punkte im kubischen Kristall	49
3.2	Kompatibilitätstabelle der kubischen Darstellungen	50
3.3	Symmetriegruppe des Diamantgitters	54
3.4	Charaktertafeln der Darstellungen des Diamantgitters	56
3.5	Charaktertafel des Diamantgitters am X -Punkt	57
3.6	Darstellungen des Diamantgitters bei Γ, L, X	59

3.7	Kompatibilitätstafel des Diamantgitters	61
3.8	Charaktertafeln von T_d	66
6.1	Landauparameter und effektive Masse von ${}^3\text{He}$	130
6.2	Erhaltungsgrößen bei Streuprozessen	138

Kapitel 1

Kristalle

Symmetrien sind in der Physik von fundamentaler Bedeutung (Erhaltungssätze, Eichsymmetrien, Symmetriebrechung, etc.); dies gilt auch für die Festkörperphysik, wo Symmetrien zudem eine sehr praktische und nützliche Bedeutung haben, z.B., im Kontext der *Kristallstrukturen* und *Bandstrukturen* (vgl. Kapitel 3) oder in der Berechnung von *Matrixelementen* in der Beschreibung von (optischen, elektronischen, ...) Übergängen und Streuprozessen. Ein anderes Beispiel zur Nutzung von Symmetrien in der Festkörperphysik sind die *Phasenübergänge* und daraus resultierende neue *Phasen*, z.B. supraleitende Phasen vom *s, p, d ...* Typ (vgl. Kap. 11), die sich mit Hilfe von Symmetrien klassifizieren lassen (vgl. Ginzburg-Landau-Theorien in Kap. 11.2.2). Grundlegend für die effiziente Anwendung von Symmetrien ist das Erlernen der Gruppentheorie; das vorliegende Kapitel behandelt dieses Thema ausführlich, ausgehend von der Idee der Nutzung von Symmetriegruppen und ihren Darstellungen, eher denn allgemeinerweise zum Thema.

1.1 Gitter

1.1.1 Bravaisgitter

Es gibt zwei äquivalente Definitionen eines *Bravaisgitters*:

1. Die diskreten Punkte $\vec{R}_{\vec{n}} \in \mathbb{R}^3$ bilden ein (dreidimensionales) *Bravais-*

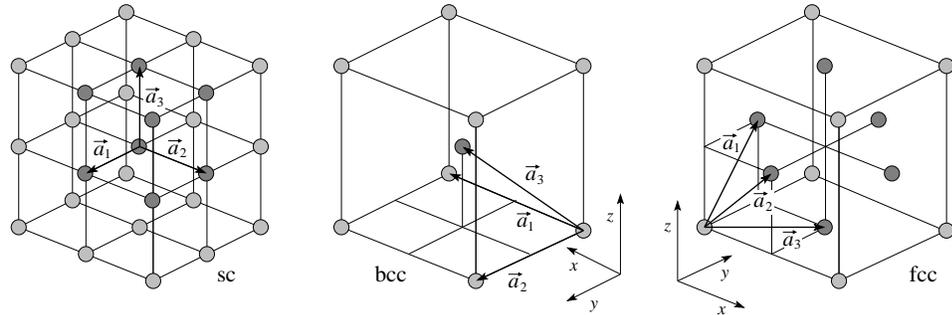


Abb. 1.1: Kubische Gitter mit primitiven Gittervektoren $\vec{a}_i, i = 1, 2, 3$ und Gitterkonstante a (\vec{e}_i kartesische Einheitsvektoren). Links: simple cubic (sc) $\vec{a}_i = a\vec{e}_i$; Mitte: body centered cubic (bcc) $\vec{a}_{i=1,2} = a\vec{e}_i, \vec{a}_3 = (a/2)\sum_i \vec{e}_i$ (symmetrisierte Basis $\vec{a}_i = (a/2)(\sum_{j \neq i} \vec{e}_j - \vec{e}_i)$); Rechts: face centered cubic (fcc) $\vec{a}_i = (a/2)\sum_{j \neq i} \vec{e}_j$. (Abb. aus Ref. [Ash76])

gitter, wenn

$$\vec{R}_{\vec{n}} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad (1.1)$$

wobei die primitiven Gittervektoren \vec{a}_i nicht in einer Ebene sind, $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) \neq 0$.

- das Punktgitter definiert durch die Punkte $\vec{R}_{\vec{n}} \in \mathbb{R}^3$ von jedem Gitterpunkt aus gesehen die exakt gleiche Umgebung aufweist.

Beispiele für Bravais-Gitter sind die kubischen Gitter in Abb. 1.1, ein (zweidimensionales) Gegenbeispiel ist das Honigwabengitter in Abb. 1.2, bei dem die Punkte P und Q äquivalent sind, P und R aber nicht, da ihre Nachbarn in verschiedener Richtung liegen, was der Definition 2 widerspricht.

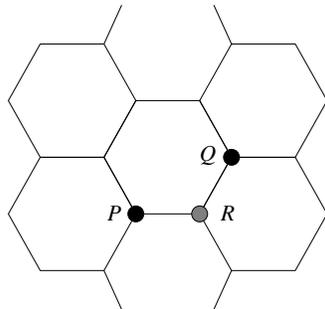


Abb. 1.2: Honigwabengitter: Die Punkte P und Q haben die gleiche Anordnung der Nachbarpunkte und sind äquivalent, P und R jedoch nicht. (Abb. aus Ref. [Ash76])

Die *Koordinationszahl* eines Gitters bezeichnet die Anzahl der nächsten Nachbarn (kubische Gitter: sc: 6, bcc: 8, fcc: 12). Das fcc-Gitter ist ein Beispiel für die dichtest mögliche Kugelpackung in 3 Dimensionen.

1.1.2 Einheitszelle

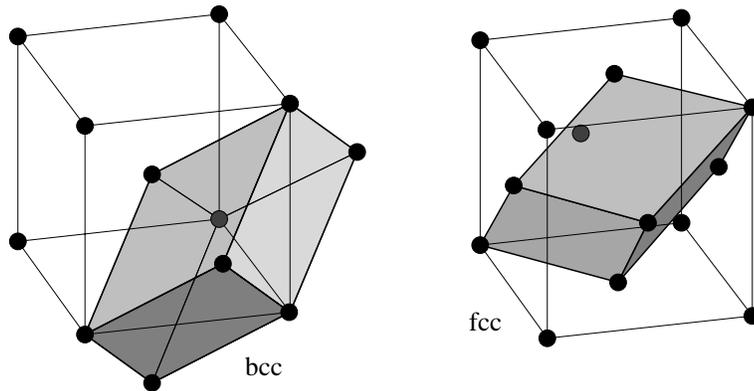


Abb. 1.3: Beispiele primitiver Einheitszellen: (links) bcc- und (rechts) fcc-Gitter. (Abb. aus Ref. [Ash76])

Die *primitive Einheitszelle* eines Bravaisgitters enthält genau einen Gitterpunkt und überdeckt durch Translation um alle Vektoren $\vec{R}_{\vec{n}}$ aus Gl. (1.1) den gesamten Raum \mathbb{R}^3 genau einmal, vgl. Abb. 1.3. Die primitive Einheitszelle ist nicht eindeutig bestimmt und muss nicht die Symmetrie des Gitters besitzen. *Nicht-primitive* Einheitszellen sind grösser und überdecken den \mathbb{R}^3 bereits durch Translation um eine echte Teilmenge der Gittervektoren $\vec{R}_{\vec{n}}$.

Die *Wigner-Seitz-Einheitszelle* ist das Volumen im Raum, dessen Punkte näher zu einem gegebenen Gitterpunkt als zu allen anderen ist, d.h., sie wird durch die Mittel-Orthogonal-Ebenen der Verbindungsstrecken zu den nächsten Nachbarn begrenzt, vgl. Abb. 1.4. Die Wigner-Seitz-Zelle ist eine primitive Einheitszelle mit der vollen Symmetrie des Gitters.

Ein idealer *Kristall* ergibt sich durch die Anordnung von physikalischen Objekten (Atome, Ionen, Moleküle etc.) in der primitiven Einheitszelle eines periodischen Gitters. Die mathematische Abstraktion davon ist ein Bravaisgitter mit einer *Basis* aus Gitterpunkten bestimmter (i.a. reduzierter) Symmetrie.

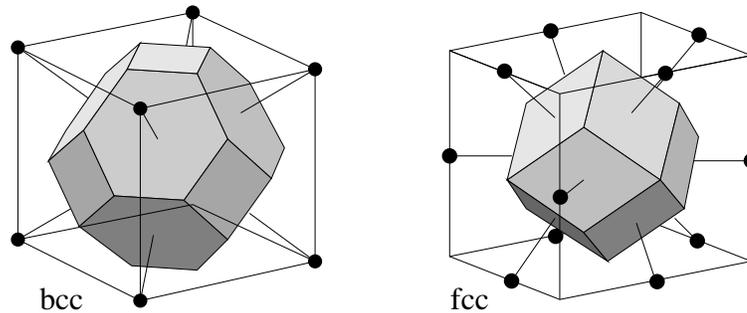


Abb. 1.4: Wigner-Seitz Einheitszellen des (links) bcc- und (rechts) fcc-Gitters. (Abb. aus Ref. [Ash76])

1.2 Klassifikation durch Symmetrien

1.2.1 Punkt- und Raumgruppen

Alle Operationen, die ein Punktgitter (Bravaisgitter) invariant lassen, bilden die *Symmetrie-* oder *Raumgruppe* des Gitters und lassen sich kombinieren aus

1. den Translationen um einen Gittervektor \vec{R}_n aus Gl. (1.1) und
2. der *Punktgruppe*, d.h. Symmetrieeoperationen, die zusätzlich mindestens einen Gitterpunkt invariant lassen (diskrete Rotationen, Reflexionen, Inversion).

Beachte dabei, dass Symmetrien S (z.B. Rotationen), die keinen Punkt invariant lassen, zusammen mit einer geeigneten Translation eine Operation vom Typ 2 ergeben können.

1.2.2 7 Kristallsysteme und 14 Bravaisgitter

Bei einer maximal symmetrischen (sphärischen) Basis (z.B. ein Punkt) gibt es 7 Punktgruppen (*Kristallsysteme*) und 14 Raumgruppen (Bravaisgitter), nämlich

- 3 kubische Gitter: sc (simple cubic), bcc (body centered cubic), fcc (face centered cubic),

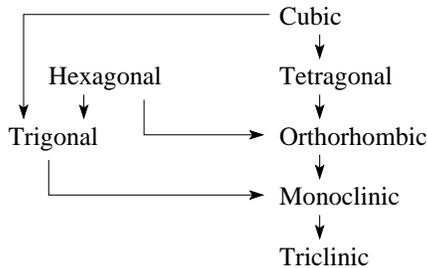


Abb. 1.5: Die 7 Kristallsysteme gehen durch sukzessive Einschränkungen in der Symmetrie auseinander hervor. (Abb. aus Ref. [Ash76])

- 2 tetragonale Gitter: st (simple tetragonal), ct (centered tetragonal),
- 4 orthorhombische Gitter: so (simple orthorhombic), bco (body centered), fco (face centered), bco (base centered),
- 2 monokline Gitter: sm (simple monocline), cm (centered),
- 1 triklines Gitter
- 1 trigonales (= rhombohedrales) Gitter
- 1 hexagonales Gitter

Die schematische Beziehung zwischen diesen Kristallsystemen ist in Abb. 1.5 gezeigt, die Kristallsysteme selber sind in Abb. 1.6 durch Körper charakterisiert, die genau unter der entsprechenden Punktgruppe symmetrisch sind.

1.2.3 32 kristallographische Punktgruppen und 230 Raumgruppen

Bei einer Basis beliebiger Symmetrie gibt es 32 kristallographische Punktgruppen und 230 Raumgruppen. Die 32 kristallographische Punktgruppen entstehen aus den 7 Punktgruppen der Kristallsystems durch systematische Reduktion der Symmetrie.

Kubische Punktgruppen

Die 5 kubischen Punktgruppen (vgl. Abb. 1.7) werden in der Schönflies-Notation bezeichnet als:

- O_h : alle Symmetrien eines Würfels (bzw. Oktaeders),

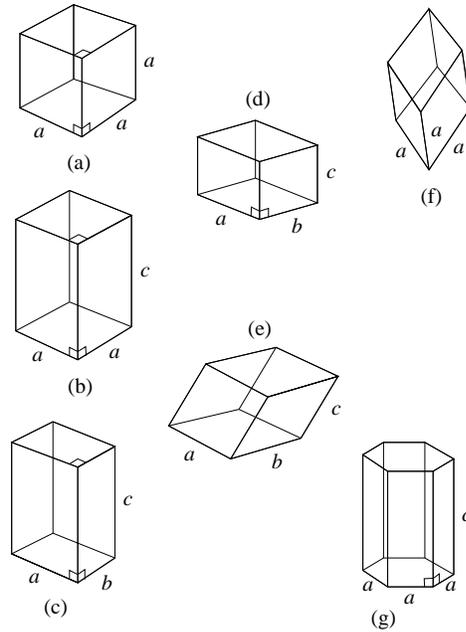


Abb. 1.6: 7 Kristallsysteme bei maximal symmetrischer Basis veranschaulicht durch Körper, die unter der entsprechenden Punktgruppe invariant sind: (a) kubisch, (b) tetragonal, (c) orthorhombisch, (d) monoklin, (e) triklin, (f) trigonal, (g) hexagonal. (Abb. aus Ref. [Ash76])

- O : orientierungstreue Symmetrien eines Würfels (ohne Spiegelungen und Inversion), vgl. die genauere Charakterisierung in Abschnitt 2.1.2,
- T_d : alle Symmetrien des Tetraeders,
- T : Symmetrien des Tetraeders ohne Spiegelungen und Inversion,
- T_h : Elemente aus T plus Inversion I .

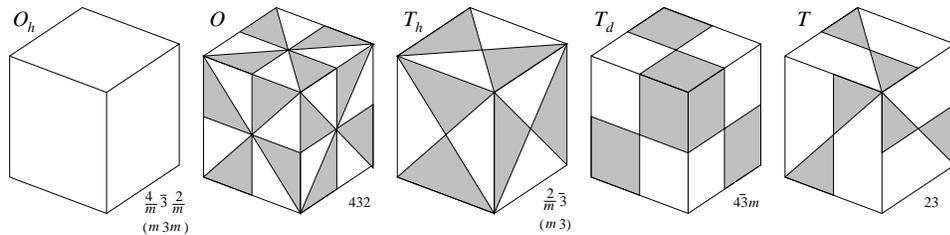


Abb. 1.7: 5 kubische kristallographische Punktgruppen bei beliebiger Basis veranschaulicht durch invariante Körper. Schönflies-Notation links unten, internationale Notation rechts unten. (Abb. aus Ref. [Ash76])

Nicht-kubische Punktgruppen

Die 27 nicht-kubischen Punktgruppen (vgl. Abb. 1.8) werden in der Schönflies-Notation bezeichnet via:

- C_n : nur eine n -zählige Drehachse, d.h. die Rotationen um $m2\pi/n$ mit $m = 0, \dots, n - 1$ um diese Achse sind Symmetrien,
- C_{nv} : eine n -zählige Drehachse und eine Spiegelung, die die Drehachse enthält, und alle daraus erzeugten Elemente,
- C_{nh} : eine n -zählige Drehachse und eine Spiegelungsebene senkrecht zu der Achse,
- S_n : nur eine n -zählige Drehachse und die Inversion I ,
- D_n : eine n -zählige Drehachse, eine 2-zählige Achse senkrecht zur n -zähligen Achse und alle daraus erzeugten Elemente,
- D_{nh} : alle Elemente aus D_n und eine Spiegelebene senkrecht zur n -zähligen Achse (grösste Symmetriegruppe),
- D_{nd} : alle Elemente aus D_n und die Spiegelebenen, die die n -zählige Achse enthalten und den Winkel zwischen den 2-zähligen Achsen halbieren.

Raumgruppen

Man findet 61 der 230 Raumgruppen durch Platzieren von Basen mit der Symmetrie der 32 Punktgruppen in die 14 Bravaisgitter des gleichen Kristallsystems:

Kristallsystem	# Punktgruppen	# Bravaisgitter	Produkt
Kubisch	5	3	15
Tetragonal	7	2	14
Orthorhombisch	3	4	12
Monoklin	3	2	6
Triklin	2	1	2
Hexagonal	7	1	7
Trigonal	5	1	5
Summe	32	14	61

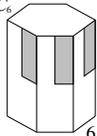
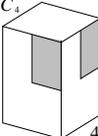
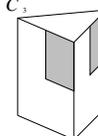
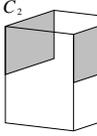
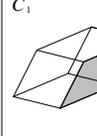
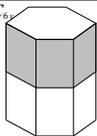
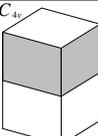
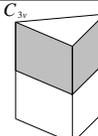
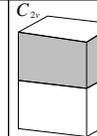
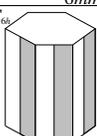
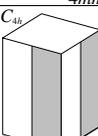
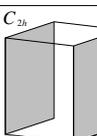
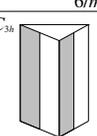
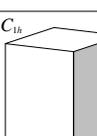
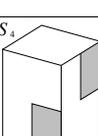
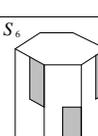
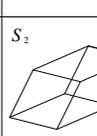
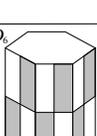
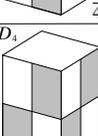
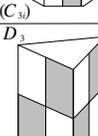
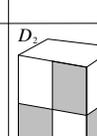
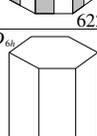
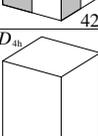
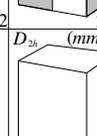
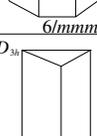
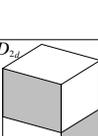
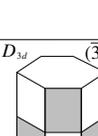
Schoenflies	hexagonal	tetragonal	trigonal	orthorhombic	monoclinic	triclinic	international
C_n	C_6  6	C_4  4	C_3  3		C_2  2	C_1  1	n
C_{nv}	C_{6v}  $6mm$	C_{4v}  $4mm$	C_{3v}  $3mm$	C_{2v}  2			mmm (n even) nm (n odd)
C_{nh}	C_{6h}  $6/m$	C_{4h}  $4/m$			C_{2h}  $2/m$		n/m
	C_{3h}  $\bar{6}$				C_{1h}  m		\bar{n}
S_n		S_4  4	S_6  (C_3) 3			S_2  (C_1) $\bar{1}$	
D_n	D_6  622	D_4  422	D_3  322	D_2  222			$n2\bar{2}$ (n even) $n2$ (n odd)
D_{nh}	D_{6h}  $6/mmm$	D_{4h}  $4/mmm$		D_{2h}  (mmm) (V_6) $2/mmm$			$\frac{n}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (n/mmm)
	D_{3h}  $62m$						$\bar{n}2m$ (n even)
D_{nd}		D_{2d}  (V_6) $42m$	D_{3d}  $(\bar{3}m)$ $\bar{3}2m$				$\bar{n} \frac{2}{m}$ (n odd)

Abb. 1.8: 27 nicht-kubische kristallographische Punktgruppen bei beliebiger Basis veranschaulicht durch invariante Körper. Links: Schönfliesnotation (vgl. Text), rechts: internationale Notation. (Abb. aus Ref. [Ash76])

Darüberhinaus lassen sich Basen mit 5 trigonalen Punktgruppen in ein hexagonales Bravaisgitter einbetten und 7 Objekte können mit alternativer Orientierung in die Bravaisgitter eingefügt werden. Auf diese Weise erhält man die $73 = 61 + 5 + 7$ *symmorphen* Raumgruppen. Die übrigen 157 nicht-symmorphen Raumgruppen enthalten zusätzliche Symmetrien (z.B. Schraubenachsen, Gleitebenen), die nur bei bestimmten Dimensionen der Basis und des Bravaisgitters möglich sind.

Zusammenfassend die zentralen Begriffe im Überblick:

	Bravaisgitter (sphärische Basis)	Kristallstruktur (beliebige Basis)
# Punktgruppen	7 <i>Kristallsysteme</i>	32 <i>kristallographische Punktgruppen</i>
# Raumgruppen	14 <i>Bravaisgitter</i>	230 <i>Raumgruppen</i>

Kapitel 2

Gruppen und ihre Darstellungen

2.1 Gruppen \mathcal{G}

2.1.1 Definitionen

Wir erinnern zunächst an einige grundlegende Definitionen der Algebra. Eine (nicht-leere) Menge \mathcal{G} bildet bezüglich einer Verknüpfung \cdot eine *Gruppe*, wenn die folgenden Axiome erfüllt sind:

1. $\forall R_1, R_2, R_3 \in \mathcal{G}$ gilt $(R_1 \cdot R_2) \cdot R_3 = R_1 \cdot (R_2 \cdot R_3)$ (Assoziativität),
2. $\forall R_1, R_2 \in \mathcal{G}$ gilt $R_1 \cdot R_2 \in \mathcal{G}$ (Abgeschlossenheit),
3. Es existiert ein Einselement $E \in \mathcal{G}$, so dass $\forall R \in \mathcal{G}$, $R \cdot E = E \cdot R = R$,
4. $\forall R \in \mathcal{G}$ existiert ein Inverses R^{-1} , so dass $R \cdot R^{-1} = R^{-1} \cdot R = E$.

g bezeichne die *Ordnung* der Gruppe \mathcal{G} , d.h. die (endliche oder unendliche) Zahl der Elemente von \mathcal{G} . Eine Gruppe $\mathcal{S} \subset \mathcal{G}$ heißt *Untergruppe* von \mathcal{G} . Die Untergruppe \mathcal{S} schliesst unter \cdot auf sich selbst und definiert eine Gruppe.

Zwei Elemente R_1 und R_2 von \mathcal{G} heissen *äquivalent (konjugiert)*, $R_1 \hat{=} R_2$, wenn $R_1 = X^{-1}R_2X$ mit einem Element $X \in \mathcal{G}$.

$\mathcal{C} \subset \mathcal{G}$ ist eine *Klasse (Normalteiler)*, wenn mit $R \in \mathcal{C}$ auch $R' \hat{=} R$ Element von \mathcal{C} ist.

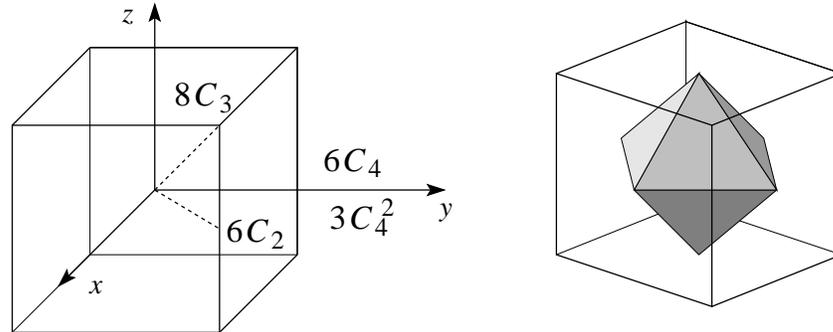


Abb. 2.1: Die Elemente der kubischen (oktahedrischen) Gruppe O_h (rechts, Notation s. Text) sind gerade die Symmetrien sowohl des Würfels als auch des Oktaeders. (Abb. links aus [Ash76]).

Beim *inneren Produkt* zweier Klassen $\mathcal{C}_i \cdot \mathcal{C}_j = \sum_k c_{ijk} \mathcal{C}_k$ wird die Klasse \mathcal{C}_k c_{ijk} -mal realisiert.

Gegeben seien zwei Gruppen \mathcal{G}_1 und \mathcal{G}_2 der Ordnungen g_1 und g_2 einer Gruppe mit $RS = SR$ für $R \in \mathcal{G}_1, S \in \mathcal{G}_2$ und $\mathcal{G}_1 \cap \mathcal{G}_2 = E$. Dann ist das *direkte Produkt* $\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \times \mathcal{G}_2$ aus den Elementen RS eine Gruppe der Ordnung $g = g_1 g_2$.

2.1.2 Kubische Gruppe O

Die kubische (oktahedrische) Gruppe O enthält die 24 orientierungstreuen Symmetrieeoperationen des Würfels (und des Oktaeders) in 5 Klassen (vgl. Abb. 2.1 und die Tab. 2.1):

1. Das Einselement E ,
2. Rotationen um π um die Achsen x, y, z ($3C_4^2$),
3. Rotationen um $\pm\pi/2$ um die Achsen x, y, z ($6C_4$),
4. Rotationen um π um die Winkelhalbierenden von xy, yz, xz ($6C_2$),
5. Rotationen um $\pm 2\pi/3$ um die vier Raumdiagonalen des Würfels ($8C_3$).

Die Gruppe $O_h = O \times C_i = O \times \{E, I\}$ enthält neben den obigen Elementen alle ihre Kombinationen mit der Inversion (Punktspiegelung) I ; sie umfasst demnach 48 Elemente in 10 Klassen.

Klasse	Symmetrieoperation	KOSY
E	E	$x \ y \ z$
C_4^2	δ_{2z}	$\bar{x} \ \bar{y} \ z$
	δ_{2x}	$x \ \bar{y} \ \bar{z}$
	δ_{2y}	$\bar{x} \ y \ \bar{z}$
C_4	δ_{4z}^{-1}	$\bar{y} \ x \ z$
	δ_{4z}	$y \ \bar{x} \ z$
	δ_{4x}^{-1}	$x \ \bar{z} \ y$
	δ_{4x}	$x \ z \ \bar{y}$
	δ_{4y}^{-1}	$z \ y \ \bar{x}$
	δ_{4y}	$\bar{z} \ y \ x$
C_2	δ_{2xy}	$y \ x \ \bar{z}$
	δ_{2xz}	$z \ \bar{y} \ x$
	δ_{2yz}	$\bar{x} \ z \ y$
	$\delta_{2x\bar{y}}$	$\bar{y} \ \bar{x} \ \bar{z}$
	$\delta_{2\bar{x}z}$	$\bar{z} \ \bar{y} \ \bar{x}$
	$\delta_{2y\bar{z}}$	$\bar{x} \ \bar{z} \ \bar{y}$
C_3	δ_{3xyz}^{-1}	$z \ x \ y$
	δ_{3xyz}	$y \ z \ x$
	$\delta_{3x\bar{y}z}^{-1}$	$z \ \bar{x} \ \bar{y}$
	$\delta_{3x\bar{y}z}$	$\bar{y} \ \bar{z} \ x$
	$\delta_{3x\bar{y}\bar{z}}^{-1}$	$\bar{z} \ \bar{x} \ y$
	$\delta_{3x\bar{y}\bar{z}}$	$\bar{y} \ z \ \bar{x}$
	$\delta_{3xy\bar{z}}^{-1}$	$\bar{z} \ x \ \bar{y}$
	$\delta_{3xy\bar{z}}$	$y \ \bar{z} \ \bar{x}$

Tabelle 2.1: Elemente der kubischen Gruppe O geordnet nach Klassen mit der jeweiligen Transformation des Koordinatensystems x, y, z (Spalte "KOSY"): \bar{x} bezeichnet die Abbildung $x \rightarrow -x$, δ_{nx} die Rotation um $2\pi/n$ um die x -Achse, δ_{2xy} die Rotation um $2\pi/2$ um die Winkelhalbierende von x und y und δ_{3xyz} die Rotation um $2\pi/3$ um die Raumdiagonale des von x, y, z aufgespannten Oktanten (vgl. Skizze in Abb. 2.1)

O und O_h zerfallen in Untergruppen:

- $C_i = \{E, I\} \subset O_h = C_i \times O$ (I Inversion),
- $C_{3v} \subset O$: 3-zählige Rotationen um $2m\pi/3$, $m = 0, 1, 2$, und Spiegelungen, die die Rotationsachse invariant lassen (Ordnung 6),
- $D_{3d} = C_i \times C_{3v} \subset O_h$: C_{3v} mit Inversion I ,
- $C_4 = \{E, \delta_{4x}, \delta_{2x}, \delta_{4x}^{-1}\} \subset O$ zyklische Gruppe (δ_{nx} : Rotation um $2\pi/n$ um die x -Achse),
- $C_{4v} \subset O$: 4-zählige Rotationen und Spiegelungen, die die Rotationsachse invariant lassen,
- $D_{4h} = C_i \times C_{4v}$.

Bemerkenswert ist auch die Einbettung:

$$\begin{array}{ccc}
 O_h = C_i \times O & \supset & D_{4h} = C_i \times C_{4v} & \supset & D_{2h} = C_i \times C_{2h} \\
 \text{kubisch} & & \text{tetragonal} & & \text{orthorhombisch} \\
 O = \begin{cases} E \\ C_4^2(3) \\ C_4(6) \\ C_2(6) \\ C_3(8) \end{cases} & & C_{4v} = \begin{cases} E \\ C_4^2(1) \\ C_4^2(2) \\ C_4(2) \\ C_2(2) \end{cases} & & C_{2h} = \begin{cases} E \\ C_4^2(1) \\ C_4^2(1) \\ C_4^2(1) \end{cases} \\
 \# \text{ Elemente} & 48 & 16 & & 8 \\
 \# \text{ Klassen} & 10 & 10 & & 8
 \end{array}$$

2.2 Darstellung \mathcal{D} der Gruppe \mathcal{G}

2.2.1 Definitionen

Eine Abbildung $\mathcal{D} : R \in \mathcal{G} \rightarrow D(R) \in \mathcal{D}(\mathcal{G})$ von der Gruppe \mathcal{G} in die Menge $\mathcal{D}(\mathcal{G})$ der regulären, komplexen $l \times l$ -Matrizen heisst *Darstellung* der Dimension l , wenn $\forall R_1, R_2, R_3 \in \mathcal{G}$:

1. $R_1 \cdot R_2 = R_3 \Rightarrow D(R_1)D(R_2) = D(R_3)$ mit der gewöhnlichen Matrixmultiplikation in $\mathcal{D}(\mathcal{G})$
2. $D(E) = \mathbb{1}$ (Einheitsmatrix)
3. $D(R_1^{-1}) = D(R_1)^{-1}$

Die Darstellung \mathcal{D} heisst *treu*, wenn $D(R_1) \neq D(R_2)$ für $R_1 \neq R_2$. Zum Beispiel ist die triviale Darstellung, $D(R) \equiv 1, \forall R \in \mathcal{G}$, untreu.

Zwei Darstellungen \mathcal{D} und \mathcal{D}' von \mathcal{G} sind *äquivalent*, wenn es eine Matrix S gibt, so dass $\forall D \in \mathcal{D}, D' \in \mathcal{D}'$ gilt $D' = S^{-1}DS$. Jede Darstellung ist äquivalent zu einer *unitären Darstellung*

Die Darstellung \mathcal{D} heisst *reduzibel*, wenn $D(R)$ äquivalent zu einer Blockmatrix

$$\begin{pmatrix} D^1(R) & 0 & \cdots \\ 0 & D^2(R) & 0 \\ \cdots & 0 & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

ist ('in Blöcke zerfällt). \mathcal{D} zerfällt dabei in die Sektoren \mathcal{D}^i der Dimensionen $l_i \geq 1$, $\mathcal{D} = \oplus_i \mathcal{D}^i$, und 0 bezeichne die entsprechenden Nullmatrizen.

Die Darstellung \mathcal{D} heisst *irreduzibel*, wenn $D(R)$ nicht (durch Transformation auf eine äquivalente Darstellung) reduziert werden kann.

2.2.2 Konzepte und Theoreme

Lemma von Schur

Fundamental ist das **Lemma von Schur**:

Sei A eine Matrix, \mathcal{D} eine irreduzible Darstellung und

$$AD(R) = D(R)A, \quad \forall R \in \mathcal{G}, \quad \text{dann ist } A = \lambda \mathbb{1}. \quad (2.2)$$

Orthogonalität

Die irreduziblen, unitären Darstellungen \mathcal{D}^α von \mathcal{G} der Dimension l_α sind *orthogonal*,

$$\sum_{R \in \mathcal{G}} D^\alpha(R)_{nm}^* D^{\alpha'}(R)_{n'm'} = \frac{g}{l_\alpha} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{nn'} \delta_{mm'}. \quad (2.3)$$

Anzahl und Dimension irreduzibler Darstellungen

Die Anzahl und die Dimensionen der irreduziblen Darstellungen sind bestimmt durch folgenden **Satz**:

Sei \mathcal{G} eine endliche Gruppe der Ordnung g mit k Klassen. Dann gehören zu \mathcal{G} genau k irreduzible Darstellungen der Dimensionen l_α , $\alpha = 1, \dots, k$, so dass

$$\sum_{\alpha=1}^k l_\alpha^2 = g. \quad (2.4)$$

Charakter der Darstellung

Die Spur

$$\chi^\alpha(R) = \text{Sp} D^\alpha(R) = \sum_{n=1}^{l_\alpha} D_{nn}^\alpha(R) \quad (2.5)$$

ist eine *Klassenfunktion* auf \mathcal{G} , d.h., $\chi^\alpha(R_1) = \chi^\alpha(R_2)$ für $R_1 \hat{=} R_2$. Weiter gilt die Orthogonalität

$$\sum_{R \in \mathcal{G}} \chi^\alpha(R)^* \chi^{\alpha'}(R) = \sum_{\mathcal{C}_i} \chi^\alpha(\mathcal{C}_i)^* \chi^{\alpha'}(\mathcal{C}_i) n_i = g \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (2.6)$$

wobei n_i die Anzahl der Elemente der Klasse \mathcal{C}_i ist.

Die Menge $\{\chi^\alpha(\mathcal{C}_i) | \mathcal{C}_i \subset \mathcal{G}\}$ heisst *Charakter* der Darstellung und legt die Darstellung (bis auf Äquivalenz) eindeutig fest. Der Charakter von irreduziblen Darstellungen ist tabelliert (vgl. die Tabellen 2.2 und 2.3) oder kann aus folgenden Beziehungen berechnet werden

1. # irreduzible Darstellungen = # Klassen = k ,
2. Dimension l_α aus $\sum_1^k l_\alpha^2 = g$,
3. Einsdarstellung mit $D^1(R) = \mathbb{1}$, $\chi^1(\mathcal{C}_i) = 1$, $\sum_{\mathcal{C}_i} \chi^{\alpha \neq 1}(\mathcal{C}_i) n_i = 0$,
4. $\chi^\alpha(E = \text{Klasse}) = l_\alpha$,
5. $\sum_{\mathcal{C}_i} \chi^\alpha(\mathcal{C}_i) \chi^{\alpha'}(\mathcal{C}_i) n_i = g \delta_{\alpha\alpha'}$, $\sum_\alpha \chi^\alpha(\mathcal{C}_i) \chi^\alpha(\mathcal{C}_j) n_i = g \delta_{ij}$,
6. $\mathcal{C}_i \cdot \mathcal{C}_j = \sum_s c_{ijs} \mathcal{C}_s \Rightarrow n_i n_j \chi^\alpha(\mathcal{C}_i) \chi^\alpha(\mathcal{C}_j) = l_\alpha \sum_s n_s c_{ijs} \chi^\alpha(\mathcal{C}_s)$.

\mathcal{C}_i	E	I
Γ_1^+	1	1
Γ_1^-	1	-1

Tabelle 2.2: Charaktertafeln der Gruppe $\mathcal{C}_i = (E, I)$ und der kubischen (O_h) und tetragonalen (D_{4h}) Punktgruppen. Die Charaktertafel von O und C_{4v} folgen aus denjenigen von O_h und D_{4h} durch Einschränkung.

O_h	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	I	$3IC_4^2$	$6IC_4$	$6IC_2$	$8IC_3$
$\Gamma_1^+ = A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2^+ = A_{2g}$	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
$\Gamma_3^+ = E_g$	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
$\Gamma_4^+ = T_{1g}$	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
$\Gamma_5^+ = T_{2g}$	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
$\Gamma_1^- = A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma_2^- = A_{2u}$	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
$\Gamma_3^- = E_u$	2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
$\Gamma_4^- = T_{1u}$	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0
$\Gamma_5^- = T_{2u}$	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0

D_{4h}	E	$C_4^2(z)$	$C_4^2(x, y)$	$2C_4$	$2C_2$	I	$IC_4^2(z)$	$IC_4^2(x, y)$	$2IC_4$	$2IC_2$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
Γ_3^+	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
Γ_4^+	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
Γ_5^+	2	-2	0	0	0	2	-2	0	0	0
Γ_1^-	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^-	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
Γ_3^-	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
Γ_4^-	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
Γ_5^-	2	-2	0	0	0	-2	2	0	0	0

D_{2h}	E	$C_4^2(z)$	$C_4^2(x)$	$C_4^2(y)$	I	$IC_4^2(z)$	$IC_4^2(x)$	$IC_4^2(y)$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
Γ_3^+	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
Γ_4^+	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
Γ_1^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^-	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
Γ_3^-	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
Γ_4^-	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

D_{3d}	E	$2C_3$	$3C_2$	I	$2IC_3$	$3IC_2$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	-1	1	1	-1
Γ_3^+	2	-1	0	2	-1	0
Γ_1^-	1	1	1	-1	-1	-1
Γ_2^-	1	1	-1	-1	-1	1
Γ_3^-	2	-1	0	-2	1	0

Tabelle 2.3: Charaktertafeln der orthorhombischen (D_{2h}, D_{3h}) Punktgruppen. Die Charaktertafeln von C_{2v} und C_{3v} folgen aus denjenigen von D_{2h} und D_{3d} durch Einschränkung.

Kompatibilität und Reduktion der Symmetrie

Sei $\mathcal{S} \subset \mathcal{G}$ eine Untergruppe von \mathcal{G} und \mathcal{D} eine irreduzible Darstellung von \mathcal{G} . Dann konstituieren die Matrizen $D(R) \in \mathcal{D}$ mit $R \in \mathcal{S}$ eine (im allgemeinen reduzible) Darstellung $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}$ von \mathcal{S} . Wir zerlegen $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}$ gemäss der irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}^{\alpha}$ von \mathcal{S} : $\mathcal{D}_{\mathcal{S}} = \oplus_{\alpha} n_{\alpha} \mathcal{D}_{\mathcal{S}}^{\alpha}$ mit

$$n_{\alpha} = \frac{1}{g_{\mathcal{S}}} \sum_{R \in \mathcal{S}} \chi_{\mathcal{S}}^{\alpha}(R)^* \chi_{\mathcal{S}}(R). \quad (2.7)$$

Die irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}^{\alpha}$ von \mathcal{S} heissen dann *kompatibel* mit denen der irreduziblen Darstellung \mathcal{D} von \mathcal{G} .

Beispiel: C_{4v} ist eine Untergruppe von O_h und ihre Darstellungen korrespondieren wie in Tab. 2.4 aufgeführt.

Wird die Symmetrie eines Kristalls reduziert, z.B., via uniaxialem Druck auf einen kubischen Kristall, O_h kubisch $\rightarrow D_{4h}$ Tetragonal, so reduziert sich die Symmetriegruppe auf die entsprechende Untergruppe, $O_h \rightarrow D_{4h}$. Diese Symmetriereduktion wirkt sich entsprechend auf die Darstellung aus indem diese entsprechend zerfällt.

O_h	Γ_1^+	Γ_2^+	Γ_3^+	Γ_4^+	Γ_5^+	Tabelle 2.4: Irreduzible Darstellungen von O_h und kompatible Darstellungen der Untergruppe $C_{4v} \subset O_h$.
C_{4v}	Γ_1	Γ_2	$\Gamma_1 + \Gamma_2$	$\Gamma_4 + \Gamma_5$	$\Gamma_3 + \Gamma_5$	
O_h	Γ_1^-	Γ_2^-	Γ_3^-	Γ_4^-	Γ_5^-	
C_{4v}	Γ_4	Γ_3	$\Gamma_3 + \Gamma_4$	$\Gamma_1 + \Gamma_5$	$\Gamma_2 + \Gamma_5$	

Produktdarstellungen und deren Ausreduktion

Sind \mathcal{D}^i und \mathcal{D}^j zwei Darstellungen von \mathcal{G} , dann bildet das direkte Produkt $\mathcal{D}^{i \times j} \equiv \mathcal{D}^i \times \mathcal{D}^j$ mit

$$D^{i \times j}(R)_{rk,sl} = D^i(R)_{rs} D^j(R)_{kl} \quad (2.8)$$

die *Produktdarstellung*, wobei r und k (s und l) die Zeilen (Spalten) bezeichnen. Die Ausreduktion der Produktdarstellung ergibt

$$\mathcal{D}^{i \times j} = \bigoplus_{\alpha} n_{\alpha}^{ij} \mathcal{D}^{\alpha}, \quad (2.9)$$

$$n_{\alpha}^{ij} = \frac{1}{g} \sum_R \chi^{\alpha}(R)^* \chi^i(R) \chi^j(R) = \frac{1}{g} \sum_R \chi^{\alpha}(R)^* \chi^{i \times j}(R). \quad (2.10)$$

Beispiele finden sich in den Multiplikationstabellen 2.5.

O_h	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5
Γ_1	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5
Γ_2		Γ_1	Γ_3	Γ_5	Γ_4
Γ_3			$\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3$	$\Gamma_4 + \Gamma_5$	$\Gamma_4 + \Gamma_5$
Γ_4				$\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$	$\Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$
Γ_5					$\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$

D_{4h}	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5
Γ_1	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5
Γ_2		Γ_1	Γ_4	Γ_3	Γ_5
Γ_3			Γ_1	Γ_2	Γ_5
Γ_4				Γ_1	Γ_5
Γ_5					$\sum_1^4 \Gamma_i$

D_{2h}	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4
Γ_1	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4
Γ_2		Γ_1	Γ_4	Γ_3
Γ_3			Γ_1	Γ_2
Γ_4				Γ_1

Tabelle 2.5: Multiplikationstabellen von Darstellungen: Bsp.: Das Produkt $\Gamma_3 \times \Gamma_4$ (wähle Γ_3 in der linken Kolonne (\rightarrow Zeile) und Γ_4 in der oberen Zeile (\rightarrow Kolonne)) der Darstellungen in O_h gibt nach Ausreduktion die Summe $\Gamma_4 + \Gamma_5$ (der zur Zeile/Kolonne zugehörige Eintrag).

2.3 Darstellungen und Eigenwertprobleme

2.3.1 Symmetrien und Quantenmechanik

Seien \mathcal{H} ein Hilbertraum, z.B. $L_2(\mathbb{R}^3)$, $H(\vec{r})$ ein Hamiltonoperator in Ortsdarstellung und \mathcal{G} eine Symmetriegruppe von H mit

$$H(\vec{r}) = H(R\vec{r}), \quad R \in \mathcal{G}. \quad (2.11)$$

Die Transformationen

$$U_R \Psi(\vec{r}) = \Psi(R^{-1}\vec{r}), \quad \Psi \in \mathcal{H}, \quad (2.12)$$

mit $R \in \mathcal{G}$ definieren eine zu \mathcal{G} isomorphe Gruppe. Mit \mathcal{G} eine Symmetrie von $H(\vec{r})$ gilt, dass H und U_R kommutieren, $[H, U_R] = 0$.

Betrachte nun das Eigenwertproblem

$$H\Psi_E = E\Psi_E \quad (2.13)$$

zur Energie E . Die Symmetrie $HU_R = U_RH$ impliziert, dass mit Ψ_E auch $U_R\Psi_E$ ein Eigenvektor zu H mit Eigenwert E ist. Der Eigenraum \mathcal{H}_E zu E sei l -fach entartet mit den linear unabhängigen Eigenvektoren $\Psi_{E,1}, \dots, \Psi_{E,l}$. Dann ist auch die Menge $\{U_R\Psi_{E,j} | R \in \mathcal{G}\}$ in \mathcal{H}_E enthalten und wir können schreiben

$$U_R\Psi_{E,j} = \sum_i D(R)_{ij} \Psi_{E,i}. \quad (2.14)$$

Die $l \times l$ Matrizen $D(R)$ definieren eine Darstellung \mathcal{D} von \mathcal{G} in \mathcal{H}_E und $\{\Psi_{E,j} | j = 1, \dots, l\}$ ist ihre *Basis*. \mathcal{H}_E oder die Basis $\{\Psi_{E,j}\}$ heissen *irreduzibel* falls \mathcal{D} irreduzibel ist.

Beschreibt \mathcal{G} die gesamte Symmetriegruppe von H , so ist \mathcal{D} im allgemeinen irreduzibel. In Ausnahmefällen ist \mathcal{D} trotzdem reduzibel, dann heisst der Eigenwert E *zufällig entartet*.

2.3.2 Partnerfunktionen

Gegeben ist eine irreduzible, unitäre Darstellung \mathcal{D}^α von \mathcal{G} , dann bildet die Menge $\{\Psi_1^\alpha, \dots, \Psi_{l_\alpha}^\alpha\} \subset \mathcal{H}$ mit

$$U_R\Psi_j^\alpha = \sum_i D^\alpha(R)_{ij} \Psi_i^\alpha \quad (2.15)$$

eine Menge von *Partnerfunktionen zu \mathcal{D}^α* . Man assoziiert dann die Partnerfunktion Ψ_j^α mit der *j-ten Spalte* der irreduziblen Darstellung \mathcal{D}^α .

Der Projektor

$$P_j^\alpha = \frac{l_\alpha}{g} \sum_R D^\alpha(R)_{jj}^* U_R \quad (2.16)$$

projiziert die Funktion $\Psi \in \mathcal{H}$ auf die Partnerfunktion Ψ_j^α und umgekehrt lässt sich jede Funktion $\Psi \in \mathcal{H}$ aus den Partnerfunktionen zu den irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G} linear kombinieren:

$$\Psi = \sum_\alpha \sum_{j=1}^{l_\alpha} P_j^\alpha \Psi = \sum_\alpha \sum_{j=1}^{l_\alpha} c_j^\alpha \Psi_j^\alpha. \quad (2.17)$$

Ebenso projiziert

$$P^\alpha = \frac{l_\alpha}{g} \sum_{R \in \mathcal{G}} [\chi^\alpha(R)]^* U_R \quad (2.18)$$

die Funktion $\Psi \in \mathcal{H}$ auf $\Psi^\alpha \in \mathcal{H}^\alpha$ (eine Linearkombination der Ψ_j^α). Der Projektor P^α enthält nur den Charakter χ^α von \mathcal{D}^α .

Eine Basis für \mathcal{D}^α kann aus $\Psi \in \mathcal{H}$ mit $\Psi^\alpha = P^\alpha \Psi \neq 0$ durch orthogonalisieren der Menge $\{U_R \Psi^\alpha | R \in \mathcal{G}\}$ konstruiert werden.

Matrizelemente

Für die Matrizelemente zwischen den Partnerfunktionen Ψ_i^α zur Symmetriegruppe von H gilt ($C_\alpha \in \mathbb{C}$):

$$\langle \Psi_i^\alpha | \Psi_j^{\alpha'} \rangle = C_\alpha \delta_{ij} \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (2.19)$$

$$\langle \Psi_i^\alpha | H | \Psi_j^{\alpha'} \rangle = H_\alpha \delta_{ij} \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (2.20)$$

$$\langle \Psi_i^\alpha | O_k^\beta | \Psi_j^{\alpha'} \rangle = X_{ijk}^{\alpha\beta\alpha'}. \quad (2.21)$$

Dabei ist $\Psi_i^\alpha \in \mathcal{D}^\alpha$ und $\Psi_i^{\alpha'} \in \mathcal{D}^{\alpha'}$, O_k^β besteht aus Funktionen aus der Darstellung \mathcal{D}^β von \mathcal{G} . Es gilt

- $X_{ijk}^{\alpha\beta\alpha'} = 0$, falls \mathcal{D}^α nicht in der Ausreduktion von $\mathcal{D}^\beta \times \mathcal{D}^{\alpha'}$ enthalten ist,

- $X_{ijk}^{\alpha\beta\alpha'} \neq 0$, falls \mathcal{D}^α in $\mathcal{D}^\beta \times \mathcal{D}^{\alpha'}$ existiert und alle X_{ijk} folgen dann aus

$$c(\alpha, \beta, \alpha') = \frac{1}{g} \sum_{R \in \mathcal{G}} \chi^\alpha(R)^* \chi^\beta(R) \chi^{\alpha'}(R) \quad (2.22)$$

unabhängigen Parametern.

Als Beispiel betrachten wir die Dipolübergänge in tetragonalen Kristallen (C_{4v}). Es sei der Operator $O = \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}$ der Dipoloperator, $\vec{\epsilon}$ der Polarisationsvektor des Lichtes, und x die Achse des tetragonalen Kristalls. Dann gilt:

- $O_x = \vec{\epsilon}_x \cdot \vec{r} = x$ gehört zur irreduziblen Darstellung $\mathcal{D}^\beta = \Gamma_1$ von C_{4v} (Licht \parallel Achse polarisiert),
- $O_y = \vec{\epsilon}_y \cdot \vec{r} = y$ und $O_z = \vec{\epsilon}_z \cdot \vec{r} = z$ gehören zur Darstellung $\mathcal{D}^\beta = \Gamma_5$ (Licht \perp Achse polarisiert).

Die Ausreduktion von $\mathcal{D}^\beta \times \mathcal{D}^{\alpha'}$ für alle möglichen Darstellungen $\mathcal{D}^{\alpha'} = \Gamma_1, \dots, \Gamma_5$ ergibt damit

\parallel	$\mathcal{D}^\beta = \Gamma_1$	$\Gamma_{\alpha'}$ $\Gamma_1 \times \Gamma_{\alpha'}$	Γ_1 Γ_1	Γ_4 Γ_4	Γ_2 Γ_2	Γ_3 Γ_3	Γ_5 Γ_5
\perp	$\mathcal{D}^\beta = \Gamma_5$	$\Gamma_{\alpha'}$ $\Gamma_5 \times \Gamma_{\alpha'}$	Γ_1 Γ_5	Γ_4 Γ_5	Γ_2 Γ_5	Γ_3 Γ_5	Γ_5 $\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4$

Die Übergänge $\mathcal{D}^{\alpha'} = \Gamma_1 \rightarrow \mathcal{D}^\alpha = \Gamma_1$ für das Licht \parallel zur x -Achse polarisiert sind demnach erlaubt (oben $\mathcal{D}^\beta = \Gamma_1$) und für das Licht \perp zur Achse polarisiert verboten (unten $\mathcal{D}^\beta = \Gamma_5$).

2.4 Rotationsgruppe

Wir betrachten die unendlich dimensionalen Gruppen $O_3 = C_i \times SO_3$ (SO_3 der orthogonalen (speziellen orthogonalen) Transformationen in 3 Dimensionen, d.h. die 3-dimensionalen reellen Matrizen mit $OO^T = O^T O = \mathbb{1}$ (und $\det O = 1$) bzw. die Rotationen mit (ohne) Inversion.

Die sphärisch-harmonischen Funktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ konstituieren Basen zu den irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}^{l\pm}$ von O_3 in $L_2(S_1^2)$.¹ Eine Rotation um

¹Die irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ sind die \mathcal{D}^l mit $l \in \mathbb{N}_0$ und $\dim \mathcal{D}^l =$

den Winkel ω und die Achse z transformiert $Y_{lm}(\theta, \phi)$ in $e^{-im\omega}Y_{lm}(\theta, \phi)$ und wird deshalb dargestellt durch die Matrix

$$D^l(\vec{e}_z, \omega) = \begin{pmatrix} e^{-il\omega} & 0 & \cdots & \\ 0 & e^{-i(l-1)\omega} & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & \ddots & 0 \\ \cdots & \cdots & 0 & e^{il\omega} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

mit der Spur

$$\text{tr}(D^l) = \sum_{m=-l}^l e^{im\omega} = \frac{\sin[(l + \frac{1}{2})\omega]}{\sin(\omega/2)}. \quad (2.24)$$

Die Drehungen von ω um eine beliebige Achse bilden eine Klasse mit Charakter

$$\chi^l(\omega) = \frac{\sin(l + 1/2)\omega}{\sin(\omega/2)}. \quad (2.25)$$

Die Charaktere von O_3 erhalten wir durch geeignete Multiplikation mit -1 , vgl. Tabelle 2.6.

Als nächstes untersuchen wir den Zerfall von O_3 in Untergruppen und die Konstruktion kompatibler Partnerfunktionen (vgl. Abschnitt 2.3.2) und schränken dazu zuerst O_3 auf die kubische Gruppe O_h (vgl. Abschnitt 2.1.2) ein. Die Charaktere $\chi_{O_3}^{l\pm}$ zu den Klassen in O_h sind in Tab. 2.7 gegeben.

Die Dekomposition der irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}^{l\pm}$ von O_3 in die irreduziblen Darstellungen \mathcal{D}^α von O_h folgt dann aus (vgl. Gl. (2.10))

$$n_\alpha = \frac{1}{48} \sum_{R \in O_h} \chi^\alpha(R) \chi_{O_3}^{l\pm}(R) \quad (2.26)$$

$2l + 1$. Die irreduziblen Darstellungen von $O(3)$ sind die $\mathcal{D}^{l\pm}$ mit $\dim \mathcal{D}^{l\pm} = 2l + 1$. Die Basisfunktionen Y_{lm} gehören zu \mathcal{D}^{l+} wenn l gerade ist und zu \mathcal{D}^{l-} für l ungerade. Zu \mathcal{D}^{l+} mit l ungerade und \mathcal{D}^{l-} mit l gerade gibt es keine offensichtlichen Basisfunktionen. Man definiert deshalb als Basis für \mathcal{D}^{l+} neue Funktionen, z.B. Funktionen \check{Y}_{1m} , welche sich wie Y_{1m} verhalten, aber eine andere Parität besitzen.

Die Ausreduktion des Raumes $\mathbb{L}_2(S^2)$ nach Massgabe von $SO(3)$ ergibt alle Darstellungen \mathcal{D}^l mit den Basisfunktionen Y_{lm} (da die Gruppe $SO(3)$ die Inversion nicht enthält ist das Transformationsverhalten von Y_{lm} unter I bei der Ausreduktion von $SO(3)$ irrelevant). Demgegenüber enthält die Ausreduktion des Raumes $\mathbb{L}_2(S^2)$ nach Massgabe von $O(3)$ nur 'die Hälfte' der Darstellungen $\mathcal{D}^{l\pm}$ von $O(3)$; da I nunmehr ein Gruppenelement von $O(3)$ ist, ist das Verhalten der Basisfunktionen Y_{lm} unter I jetzt relevant und es treten nur die Darstellungen \mathcal{D}^{l+} mit geradem l und \mathcal{D}^{l-} mit ungeradem l auf. Beachte, dass bei der Ausreduktion einer Darstellung *nicht* alle irreduziblen Darstellungen auftreten müssen — dies ist bei der Ausreduktion von $\mathbb{L}_2(S^2)$ nach Massgabe von $O(3)$ gerade der Fall.

	E	Rotationen um α	I	I -Rotationen um α
\mathcal{D}^{0+}	1	1	1	1
\mathcal{D}^{0-}	1	1	-1	-1
\mathcal{D}^{1+}	3	$1 + 2 \cos \alpha$	3	$1 + 2 \cos \alpha$
\mathcal{D}^{1-}	3	$1 + 2 \cos \alpha$	-3	$-1 - \cos \alpha$
\mathcal{D}^{l+}	$2l + 1$	$\sum_{m=-l}^l e^{im\alpha}$	$2l + 1$	$\sum_{m=-l}^l e^{im\alpha}$
\mathcal{D}^{l-}	$2l + 1$	$\sum_{m=-l}^l e^{im\alpha}$	$-2l - 1$	$-\sum_{m=-l}^l e^{im\alpha}$

Tabelle 2.6: Charaktertafel der Gruppe O_3 aus Rotationen und Inversion I in drei Dimensionen.

	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	I	$3IC_4^2$	$6IC_4$	$6IC_2$	$8IC_3$
\mathcal{D}^{0+}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
\mathcal{D}^{0-}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
\mathcal{D}^{1+}	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
\mathcal{D}^{1-}	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0
\mathcal{D}^{2+}	5	1	-1	1	-1	5	1	-1	1	-1
\mathcal{D}^{2-}	5	1	-1	1	-1	-5	-1	1	-1	1
\mathcal{D}^{3+}	7	-1	-1	-1	1	7	-1	-1	-1	1
\mathcal{D}^{3-}	7	-1	-1	-1	1	-7	1	1	1	-1
\mathcal{D}^{4+}	9	1	1	1	0	9	1	1	1	0
\mathcal{D}^{4-}	9	1	1	1	0	-9	-1	-1	-1	0
\mathcal{D}^{5+}	11	-1	1	-1	-1	11	-1	1	-1	-1
\mathcal{D}^{5-}	11	-1	1	-1	-1	-11	1	-1	1	1

Tabelle 2.7: Charaktertafel der kubischen Gruppe O_h

\mathcal{D}^{0+}	\mathcal{D}^{0-}	\mathcal{D}^{1+}	\mathcal{D}^{1-}	\mathcal{D}^{2+}	\mathcal{D}^{2-}
Γ_1	Γ'_1	Γ'_{15}	Γ_{15}	$\Gamma_{12} + \Gamma'_{25}$	$\Gamma'_{12} + \Gamma_{25}$
\mathcal{D}^{3+}	\mathcal{D}^{3-}	\mathcal{D}^{4+}	\mathcal{D}^{4-}	\mathcal{D}^{5+}	\mathcal{D}^{5-}
$\Gamma_2 + \Gamma'_{25} + \Gamma'_{15}$	$\Gamma'_2 + \Gamma_{25} + \Gamma_{15}$	$\Gamma_1 + \Gamma_{12} + \Gamma'_{25} + \Gamma'_{15}$	$\Gamma'_1 + \Gamma'_{12} + \Gamma_{25} + \Gamma_{15}$	$\Gamma_{12} + \Gamma'_{25} + 2\Gamma'_{15}$	$\Gamma'_{12} + \Gamma_{25} + 2\Gamma_{15}$

Tabelle 2.8: Dekomposition der Darstellungen $\mathcal{D}^{l\pm}$ von O_3 in die irreduziblen Darstellungen Γ_i der Untergruppe O_h .

und ergibt die Tabelle 2.8.²

Somit splitten die Niveaus eines Atoms ($l = s, p, d, \dots$) mit Einteilchen-Hamiltonoperator $H_0 = p^2/2m + V(r)$ auf, wenn es in einen Kristall mit kubischer Umgebung eingefügt wird, $H = H_0 + H_{\text{cubic}}$,³

$$s(l = 0) = \Gamma_1, \quad (2.27)$$

$$p(l = 1) = \Gamma_{15}, \quad (2.28)$$

$$d(l = 2) = \Gamma'_{25} + \Gamma_{12}, \quad (2.29)$$

$$f(l = 3) = \Gamma_{15} + \Gamma_{25} + \Gamma'_2, \quad (2.30)$$

$$g(l = 4) = \Gamma'_{25} + \Gamma'_{15} + \Gamma_{12} + \Gamma_1, \quad (2.31)$$

$$h(l = 5) = \Gamma_{25} + 2\Gamma_{15} + \Gamma'_{12}. \quad (2.32)$$

Die weitere Reduktion der Symmetrie zu D_{4h} und D_{2h} führt auf weitere Aufspaltungen die sich der Tabelle 2.9 entnehmen lassen. Auch angegeben sind die Partnerfunktionen zu O_3 (sphärische Harmonische) und diejenigen die zu den Punktgruppen O_h , D_{4h} und D_{2h} gehören (letzte Kolonne).

2.5 Spin 1/2

Im Hilbertraum

$$\mathcal{H}_{\frac{1}{2}} = \left\{ \chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \quad (2.33)$$

²Die Notation der irreduziblen Darstellungen von O_h ist hier verschieden von der Notation in Tab. 2.2. Zur Konversion siehe die Tab. 2.8 am Ende des Kapitels.

³Beachte dabei, dass das Niveau l zur Darstellung \mathcal{D}^{lp} mit Partitität $p = (-1)^l$ gehört.

O_3		O_h	D_{4h}	D_{2h}	
\mathcal{D}_0^+	$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	Γ_1^+	Γ_1^+	Γ_1^+	$s = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = Y_{00}$
\mathcal{D}_1^-	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x+iy}{r}$	Γ_4^-	Γ_5^-	Γ_3^-	$p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-Y_{11} + Y_{1-1})$
	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$		Γ_3^-	Γ_4^-	$p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} = \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{11} + Y_{1-1})$
	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x-iy}{r}$		Γ_4^-	Γ_2^-	$p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} = Y_{10}$
	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x+iy)^2}{r^2}$		Γ_4^+	Γ_2^+	$d_{xy} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{xy}{r^2} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (Y_{22} + Y_{2-2})$
\mathcal{D}_2^+	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{(x+iy)z}{r^2}$	Γ_5^+	Γ_5^+	Γ_4^+	$d_{xz} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{xz}{r^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-Y_{21} + Y_{2-1})$
	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3z^2-r^2}{r^2}$		Γ_3^+	Γ_3^+	$d_{yz} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{yz}{r^2} = \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{21} + Y_{2-1})$
	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{(x-iy)z}{r^2}$		Γ_1^+	Γ_1^+	$d_{3z^2-r^2} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3z^2-r^2}{r^2} = Y_{20}$
	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x-iy)^2}{r^2}$		Γ_2^+	Γ_1^+	$d_{x^2-y^2} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \frac{x^2-y^2}{r^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{22} + Y_{2-2})$
\mathcal{D}_3^-	$Y_{33} = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \frac{(x+iy)^3}{r^3}$	Γ_4^-	Γ_5^-	Γ_3^-	$f_{(5x^2-3r^2)x} = \sqrt{\frac{3}{16}} (Y_{31} - Y_{3-1}) - \sqrt{\frac{5}{16}} (Y_{33} - Y_{3-3})$
	$Y_{32} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \frac{(x+iy)^2 z}{r^3}$		Γ_3^-	Γ_4^-	$f_{(5y^2-3r^2)y} = -i\sqrt{\frac{3}{16}} (Y_{31} + Y_{3-1}) - i\sqrt{\frac{5}{16}} (Y_{33} - Y_{3-3})$
	$Y_{31} = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \frac{(x+iy)(5z^2-r^2)}{r^3}$		Γ_5^-	Γ_2^-	$f_{(5z^2-3r^2)z} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \frac{(5z^2-3r^2)z}{r^3} = Y_{30}$
	$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \frac{(5z^2-3r^2)z}{r^3}$		Γ_3^-	Γ_3^-	$f_{(y^2-z^2)x} = \sqrt{\frac{5}{16}} (Y_{31} - Y_{3-1}) + \sqrt{\frac{3}{16}} (Y_{33} - Y_{3-3})$
	$Y_{3-1} = \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \frac{(x-iy)(5z^2-r^2)}{r^3}$		Γ_5^-	Γ_4^-	$f_{(x^2-z^2)y} = -i\sqrt{\frac{5}{16}} (Y_{31} + Y_{3-1}) + i\sqrt{\frac{3}{16}} (Y_{33} + Y_{3-3})$
	$Y_{3-2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \frac{(x-iy)^2 z}{r^3}$		Γ_4^-	Γ_2^-	$f_{(x^2-y^2)z} = \sqrt{\frac{105}{16\pi}} \frac{(x^2-y^2)z}{r^3} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{32} + Y_{3-2})$
$Y_{3-3} = \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \frac{(x-iy)^3}{r^3}$	Γ_2^-	Γ_2^-	$f_{xyz} = \sqrt{\frac{105}{4\pi}} \frac{xyz}{r^3} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (Y_{32} - Y_{3-2})$		

Tabelle 2.9: Irreduzible Darstellungen zur Symmetriereduktion $O_3 \rightarrow O_h \rightarrow D_{4h} \rightarrow D_{2h}$ und Partnerfunktionen.

eines Spins 1/2-Systems ist eine Rotation um $\vec{\omega}$ gegeben durch ($\hat{\omega} = \vec{\omega}/|\vec{\omega}|$)

$$U_{\vec{\omega}} = 1 \cos \frac{\omega}{2} - i\hat{\omega} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\omega}{2} = e^{-i\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}/2} \quad (2.34)$$

mit den Paulimatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Insbesondere produziert eine Rotation um 2π einen Phasenfaktor $e^{i\pi} = -1$: $R_{\vec{\omega}=2\pi\vec{n}} = -\mathbb{1} \neq \mathbb{1}$.

Sei nun \mathcal{G} die Symmetriegruppe eines Operators ohne Berücksichtigung des Spins. Betrachten wir zusätzlich den Spin, so müssen wir die Gruppe um die Elemente $\bar{E}R$ erweitern, wobei $R \in \mathcal{G}$ und \bar{E} die Spinrotation um 2π ist ($\bar{E} \neq E$). Wir erhalten dadurch die *Doppelgruppe* \mathcal{G}' der Ordnung $g' = 2g$. Beachte, dass dabei die Elemente $R \in \mathcal{G}$ im \mathbb{R}^3 , die Elemente $R' \in \mathcal{G}'$ aber in $\mathbb{R}^3 \otimes \mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ operieren. Zum Beispiel bezeichnet $\delta_{3xyz}|_{\mathbb{R}^3}$ eine Drehung von $2\pi/3$ um $(1, 1, 1)/\sqrt{3}$ im \mathbb{R}^3 , $\delta_{3xyz}|_{\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}}$ die entsprechende Rotation im Spinraum und $\delta'_{3xyz} = \delta_{3xyz}|_{\mathbb{R}^3} \times \delta_{3xyz}|_{\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}}$ das zugehörige Element aus \mathcal{G}' .

2.5.1 Uneigentliche Drehungen, Inversion I

Trivialerweise gilt für die Darstellung der Inversion I im Spinraum, dass $D(I)\{\chi_{\uparrow}, \chi_{\downarrow}\}$ eine Linearkombination von χ_{\uparrow} und χ_{\downarrow} ist. Wegen $IR = RI$ für jede Rotation R folgt nach dem Lemma von Schur aus Abschnitt 2.2.2 $D(I) = c\mathbb{1}$, vgl. Gl. (2.2). Mit $|D(I)\chi_{\sigma}| = 1$ ist $|c|^2 = 1$, und schliesslich o.B.d.A. $c = 1$.⁴

Beispiele für Doppelgruppen (ohne und mit Inversion):

- $C_1 = \{E\}$, zugehörige Doppelgruppe $C'_1 = \{E, \bar{E}\}$,
- $C_i = \{E, I\}$, Doppelgruppe $C'_i = \{E, \bar{E}, I, \bar{I}\}$,
- $C_{3v} = \left\{ E, \delta_{3xyz}, \delta_{3xyz}^{-1}, I\delta_{2x\bar{y}}, I\delta_{2\bar{x}z}, I\delta_{2y\bar{z}} \right\}$,
Doppelgruppe $C'_{3c} = C_{3v}|_{\mathbb{R}^3} \times C_{3v}|_{\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}}$

Die Tabelle 2.10 gibt die Faktoren in $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ von C'_{3v}

⁴Der Drehimpuls ist invariant unter Inversion.

\mathcal{C}_1	$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	\mathcal{C}_2	$\bar{E} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
\mathcal{C}_3	$\delta_{3xyz} = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{2} & -\frac{1+i}{2} \\ \frac{1-i}{2} & \frac{1+i}{2} \end{pmatrix}$ $\delta_{3xyz}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} & \frac{1+i}{2} \\ -\frac{1-i}{2} & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix}$	\mathcal{C}_4	$\bar{\delta}_{3xyz} = \begin{pmatrix} \frac{-1+i}{2} & \frac{1+i}{2} \\ \frac{-1+i}{2} & \frac{-1-i}{2} \end{pmatrix}$ $\bar{\delta}_{3xyz}^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1+i}{2} & -\frac{1+i}{2} \\ \frac{1-i}{2} & \frac{-1+i}{2} \end{pmatrix}$
\mathcal{C}_5	$I\delta_{2x\bar{y}} = I \begin{pmatrix} 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$ $I\delta_{2\bar{x}z} = I \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ $I\delta_{2y\bar{z}} = I \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$	\mathcal{C}_6	$I\bar{\delta}_{2x\bar{y}} = I \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$ $I\bar{\delta}_{2\bar{x}z} = I \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ $I\bar{\delta}_{2y\bar{z}} = I \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$

Tabelle 2.10: Faktoren in $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ von C'_{3v} .

2.5.2 Irreduzible Darstellungen von Doppelgruppen

Man findet die irreduziblen Darstellungen der Doppelgruppe \mathcal{G}' nach dem üblichen Muster: Finde die Anzahl k' der Klassen von \mathcal{G}' und die Dimensionen $l'_1, \dots, l'_{k'}$ der Darstellungen mit

$$\sum_{\alpha=1}^{k'} l'^2_{\alpha} = g' = 2g \quad (2.36)$$

und berechne die Charaktere gemäss den Regeln in Abschnitt 2.2.2. Wegen $\bar{E}\mathcal{G}' = \mathcal{G}'\bar{E}$ definiert \bar{E} eine eigene Klasse. Es gibt 2 Typen von Darstellungen von \mathcal{G}' :

- Typ 1: mit $D(R) = D(\bar{R} = R\bar{E}), \forall R \in \mathcal{G}$, und
- Typ 2: mit $D(R) \neq D(\bar{R})$.

Die Darstellungen von Typ 1 folgen sofort aus den Darstellungen von \mathcal{G} , die von Typ 2 sind die *zusätzlichen Darstellungen* der Doppelgruppe.

C'_1	E	\bar{E}		C'_i	E	\bar{E}	I	\bar{I}	
	1	1	Typ 1		1	1	1	1	Typ 1
	1	-1	Typ 2		1	-1	1	-1	Typ 2
					1	-1	-1	1	

C'_{3v}	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	
Γ_1	1	1	1	1	1	1	Typ 1
Γ_2	1	1	1	1	-1	-1	
Γ_3	2	2	-1	-1	0	0	
Γ_4	1	-1	-1	1	i	$-i$	Typ 2
Γ_5	1	-1	-1	1	$-i$	i	
Γ_6	2	-2	1	-1	0	0	

Tabelle 2.11: Charaktertafeln zu den Doppelgruppen C'_1 , C'_i und C'_{3v} .

Beispiele für Darstellungen von Doppelgruppen vom Typ 1 und 2 sind für die Doppelgruppen C'_1 , C'_i und C'_{3v} in den Tabellen 2.11 aufgeführt, die Darstellungen und Charaktere zu SO'_3 findet man in 2.12. Dabei ist in der letzten Tabelle $j = l + 1/2$ und l ganzzahlig. Die zu j gehörigen Darstellungen sind neu hinzugekommen. Die Klassen C_i in C_{3v} sind in Tabelle 2.10 aufgeführt.

SO'_3	E	Drehung um α	\bar{E}	\bar{E} · Drehung um α
\mathcal{D}_0	1	1	1	1
$\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$	2	$2 \cos(\alpha/2)$	-2	$-2 \cos(\alpha/2)$
\mathcal{D}_1	3	$1 + 2 \cos \alpha$	3	$1 + 2 \cos \alpha$
\mathcal{D}_j	$2j + 1$	$\sum_{m=-j}^j e^{im\alpha}$	$-2j - 1$	$-\sum_{m=-j}^j e^{im\alpha}$
\mathcal{D}_l	$2l + 1$	$\sum_{m=-l}^l e^{im\alpha}$	$2l + 1$	$\sum_{m=-l}^l e^{im\alpha}$

Tabelle 2.12: Charaktertafel zur Doppelgruppe SO'_3 .

2.5.3 Aufhebung der Spinartung

Wir betrachten den Hamiltonoperator $H = H_0 + H_{\text{spin}}$, der aus einem spinunabhängigen Teil H_0 und einem spinabhängigen Teil H_{spin} zusammengesetzt ist. Es sei \mathcal{G} die Symmetriegruppe von H_0 , E ein Energieeigenwert zur irreduziblen Darstellung \mathcal{D}^α und $\Psi_1, \dots, \Psi_{l_\alpha}$ eine Basis von \mathcal{D}^α aus Eigenfunktionen. Das direkte Produkt $\{\Psi_1, \dots, \Psi_{l_\alpha}\} \times \{\chi_\uparrow, \chi_\downarrow\}$ definiert eine Basis der Darstellung $\mathcal{D}^\alpha \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ der Doppelgruppe \mathcal{G}' mit dem Charakter $\chi^\alpha(R')\chi^{\frac{1}{2}}(R')$, $R' \in \mathcal{G}'$.⁵

Wie üblich können wir diese Produktdarstellung gemäss der irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G}' ausreduzieren. Dies ergibt das Aufspalten des Eigenwertes E beim Einschalten der spinabhängigen Störung H_{spin} .

Als Beispiel betrachten wir die Gruppe $\mathcal{G} = C_{3v}$ und reduzieren die Darstellungen $\Gamma_i \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ aus. Dazu bestimmen wir die Charaktere von Γ_i und $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ und daraus diejenigen von $\Gamma_i \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ (die Gruppe C_{3v} zerfällt in 3 Klassen und hat drei irreduzible Darstellungen Γ_1, Γ_2 und Γ_3 ; die Hinzunahme der Elemente \bar{E} und $\bar{\delta}$ ist für C_{3v} bedeutungslos und die Charaktere werden lediglich kopiert):

C_{3v}	E	\bar{E}	$\delta_{3xyz}^{-1} \delta_{3xyz}$	$\bar{\delta}_{3xyz}^{-1} \bar{\delta}_{3xyz}$	$I\delta_{2x\bar{y}} I\delta_{2\bar{x}z} I\delta_{2y\bar{z}}$	$I\bar{\delta}_{2x\bar{y}} I\bar{\delta}_{2\bar{x}z} I\bar{\delta}_{2y\bar{z}}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3	2	2	-1	-1	0	0
$\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$	2	-2	1	-1	0	0
$\Gamma_1 \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$	2	-2	1	-1	0	0
$\Gamma_2 \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$	2	-2	1	-1	0	0
$\Gamma_3 \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$	4	-4	-1	1	0	0

Der Vergleich mit den Charakteren der irreduziblen Darstellungen von C'_{3v} (Tabelle 2.11) zeigt:

$$- \Gamma_1 \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} = \Gamma_6,$$

⁵ $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ ist die Darstellung des Spins $\frac{1}{2}$.

- $\Gamma_2 \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} = \Gamma_6$,
- $\Gamma_3 \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} = \Gamma_4 + \Gamma_5 + \Gamma_6$.

Ein anderes Beispiel ist die Spin-Bahn-Kopplung zwischen dem Drehimpuls l und dem Spin $1/2$. Die Darstellungen $\mathcal{D}^l \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ der Doppelgruppe \mathcal{G}' zum Drehimpuls l lassen sich dann ausreduzieren als:

$$\mathcal{D}^l \times \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}^{|l-\frac{1}{2}|} + \mathcal{D}^{l+\frac{1}{2}}. \quad (2.37)$$

Das heisst physikalisch, dass das Energieniveau zum Eigenwert l in zwei verschiedene Niveaus mit Gesamtdrehimpuls $j = l \pm 1/2$ aufspaltet.

2.6 Zeitumkehrinvarianz

2.6.1 Zeitumkehroperator T

Die Wellenfunktion $\Phi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})e^{-iEt}$ eines spinlosen Teilchens der Energie E transformiert sich unter dem Operator T zur Zeitumkehr $t \rightarrow -t$ gemäss

$$T\Phi(\vec{r}, t) = \Phi^*(\vec{r}, -t), \quad T\Psi(\vec{r}) = \Psi^*(\vec{r}), \quad (2.38)$$

so dass $T^2\Phi = \Phi$. Für ein Teilchen mit Spin $1/2$ ist dagegen die Zeitumkehr mit einer Transformation im Spinraum verbunden und es gilt:⁶

$$T\Psi = T \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow} \\ \Psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = i\sigma_y \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow} \\ \Psi_{\downarrow} \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} \Psi_{\downarrow}^* \\ \Psi_{\uparrow}^* \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Insbesondere ist $T^2 \neq \mathbb{1}$ und eine zweimalige Zeitumkehr ändert das Vorzeichen von Ψ ,

$$T^2\Psi = -\Psi. \quad (2.40)$$

Der Operator T ist anti-linear ($T\sum_i a_i\Psi_i = \sum_i a_i^*T\Psi_i$) und anti-unitär ($\langle T\Psi, T\Phi \rangle = \langle \Psi, \Phi \rangle^*$); die Operatoren \vec{r} , $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ und $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ (Spin $\vec{\sigma}$ analog \vec{L}) verhalten sich unter Zeitumkehr gemäss

$$T\vec{r}T^{-1} = \vec{r}, \quad (2.41)$$

$$T\vec{p}T^{-1} = -\vec{p}, \quad (2.42)$$

$$T\vec{L}T^{-1} = -\vec{L}, \quad (2.43)$$

$$T\vec{\sigma}T^{-1} = -\vec{\sigma}. \quad (2.44)$$

⁶Im weiteren ist $T^{-1}\Psi = -i\sigma_y\Psi^*$.

In einem abgeschlossenen System ist der Hamiltonoperator H zeitungkehrinvariant,

$$THT^{-1} = \left\{ \begin{array}{c} H(\vec{r}, -\vec{p}) \\ H(\vec{r}, -\vec{p}, -\vec{\sigma}) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} H(\vec{r}, \vec{p}) \\ H(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}) \end{array} \right\} = H, \quad (2.45)$$

das heisst, mit $\Phi(\vec{r}, t)$ ist auch $\left\{ \begin{array}{c} \Phi^*(\vec{r}, -t) \\ i\sigma_y \Phi^*(\vec{r}, -t) \end{array} \right\}$ eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H\Phi = i\hbar\partial_t\Phi \Rightarrow \quad (2.46)$$

$$TH\Phi = THT^{-1}T\Phi = HT\Phi = Ti\hbar\partial_t\Phi = i\hbar\partial_{-t}T\Phi. \quad (2.47)$$

Ein externes Magnetfeld \vec{B} bricht die Zeitumkehrinvarianz z.B. durch die Kopplung $\sim \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$.

2.6.2 Darstellungen von T

Kramer's Theorem

Betrachte das Eigenwertproblem $H\Psi = E\Psi$ mit zeitungkehrinvariantem Hamiltonoperator H , $THT^{-1} = H$. Dann ist mit Ψ auch $T\Psi$ eine Eigenfunktion von H zur Energie E . Für Spin-1/2-Teilchen kann $T\Psi$ nicht linear abhängig von Ψ sein, denn wäre $T\Psi = c\Psi$, dann würde gelten $T^2\Psi = |c|^2\Psi$, im Widerspruch zu Gl. (2.40), $T^2\Psi = -\Psi$. Aus dieser Betrachtung ergibt sich das

Theorem: Für Spin 1/2-Teilchen sind die Eigenfunktionen Ψ und $T\Psi$ zur Energie E linear unabhängig und die Dimension des Eigenraums Eig_H^E ist mindestens die *Kramers-Entartung* von 2,

$$\dim(\text{Eig}_H^E) \geq 2. \quad (2.48)$$

Komplex konjugierte Darstellungen

Betrachtet man allgemein einen zeitungkehrinvarianten Operator mit Symmetriegruppe \mathcal{G} , so kann T nicht einfach zu \mathcal{G} hinzugefügt werden, da T antilinear, die Operatoren in \mathcal{G} aber linear sind. Stattdessen gehen wir wie folgt vor:

Sei $\{\Psi_1, \dots, \Psi_{l_\alpha}\}$ eine Basis der Darstellung \mathcal{D}^α von H zur Energie E , dann gehört mit $\{\Psi_{l_i}\}_{i=1, \dots, \alpha}$ auch die Menge $\{T\Psi_{l_i}\}_{i=1, \dots, \alpha}$ zu Eig_H^E . Nur wenn

die beiden Mengen linear unabhängig sind, ergibt die Anwendung von T eine zusätzliche Entartung von E . Die Funktionen $\{T\Psi_1, \dots, T\Psi_{l_\alpha}\}$ definieren dann die Basis einer zu \mathcal{D}^α komplex konjugierten Darstellung $\mathcal{D}^{\alpha*}$. Sei insbesondere $D^\alpha(R) \in \mathcal{D}^\alpha$ ein Element einer unitären irreduziblen Darstellung von \mathcal{G} . Dann definieren die unitären Matrizen $D^{\alpha*}(R)$ die zu \mathcal{D}^α komplex konjugierte Darstellung $\mathcal{D}^{\alpha*}$ mit Basis $\{T\Psi_{l_i}\}$. Dies folgt unmittelbar aus der Anti-linearität von T .⁷

Als nächstes untersuchen wir die Beziehungen zwischen der Darstellung \mathcal{D}^α und ihrer komplex konjugierten Darstellung $\mathcal{D}^{\alpha*}$. Der Charakter (χ^α) informiert uns, ob \mathcal{D}^α und $\mathcal{D}^{\alpha*}$ äquivalent sind: Es ist $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}^{\alpha*}$ genau dann wenn der Charakter $\chi^\alpha = \chi^{\alpha*}$ reel ist. In diesem Fall existiert eine unitäre Matrix M mit

$$D^{\alpha*}(R) = M^{-1}D^\alpha(R)M; \quad (2.54)$$

man kann zeigen, dass M symmetrisch oder antisymmetrisch ist. Ist M symmetrisch, dann ist \mathcal{D}^α äquivalent zu einer Darstellung aus reellen Matrizen, $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$, ist M antisymmetrisch, dann gilt $\mathcal{D}^\alpha \not\hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$.

Eine vollständige Klassifizierung ergibt 3 Fälle (Frobenius/Schur, \mathcal{G} endlich):

⁷Speziell für Drehungen U_R : Wenn $\{\Psi_i\}$ eine Basis zur Darstellung \mathcal{D}^α von U_R ist, dann ist $\{T\Psi_i\}$ eine Basis zur Darstellung $\mathcal{D}^{\alpha*}$ von $TU_R T^{-1}$, denn (benutze die Anti-linearität von T)

$$TU_R T^{-1} T\Psi_j = T \sum_i D_{ij}^\alpha(R) \Psi_i = \sum_i [D_{ij}^\alpha(R)]^* T\Psi_i. \quad (2.49)$$

Insbesondere gilt dieser Zusammenhang für Spins mit den Drehungen $\mathcal{D}^\alpha = \{D^{\frac{1}{2}}(R) | R \in SU_2\}$ und $\{\Psi_i\} = \{\chi_\uparrow, \chi_\downarrow\}$: Es ist

$$\langle \chi_\sigma | U_R | \chi_{\sigma'} \rangle = [U_R]_{\sigma\sigma'} = \left[D^{\frac{1}{2}}(R) \right]_{\sigma\sigma'}. \quad (2.50)$$

Unter Benutzung der Beziehung $\langle T\chi | T\phi \rangle = \langle \chi | \phi \rangle^*$ (diese Beziehung ersetzt den üblichen Übergang zum adjungierten Operator in $\langle Aa | b \rangle = \langle a | A^\dagger b \rangle = \langle b | Aa \rangle^*$ der für den anti-unitären Operator T nicht verfügbar ist) erhält man

$$\langle T\chi_\sigma | U_R | T\chi_{\sigma'} \rangle = \langle \chi_\sigma | U_R | \chi_{\sigma'} \rangle^* = [U_R]_{\sigma\sigma'} = \left[D^{\frac{1}{2}}(R) \right]_{\sigma\sigma'}^*. \quad (2.51)$$

Zeige, dass auch

$$\langle T\chi_\sigma | TU_R T^{-1} | T\chi_{\sigma'} \rangle = \langle T\chi_\sigma | TU_R \chi_{\sigma'} \rangle = \left[D^{\frac{1}{2}}(R) \right]_{\sigma\sigma'}^*, \quad (2.52)$$

$$\langle \chi_\sigma | TU_R T^{-1} | \chi_{\sigma'} \rangle = \langle T\chi_\sigma | TU_R T^{-1} | T\chi_{\sigma'} \rangle^* = \left[D^{\frac{1}{2}}(R) \right]_{\sigma\sigma'}, \quad (2.53)$$

und damit die Beziehung $TU_R = U_R T$ gilt. Die Relation zwischen U_R und $TU_R T^{-1}$ und den Matrizen $\left[D^{\frac{1}{2}}(R) \right]_{\sigma\sigma'}$ ist also verschieden in den Basen $\{\chi_\sigma\}$ und $\{T\chi_\sigma\}$.

1. $\sum_{R \in \mathcal{G}} \chi^\alpha(R^2) = g$: $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}^{\alpha*} \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}^*$,
2. $\sum_{R \in \mathcal{G}} \chi^\alpha(R^2) = 0$: $\mathcal{D}^\alpha \hat{\neq} \mathcal{D}^{\alpha*}$,
3. $\sum_{R \in \mathcal{G}} \chi^\alpha(R^2) = -g$: $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}^{\alpha*} \hat{\neq} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$.

Zum Beispiel sind für die Gruppe O_h alle Charaktere $\chi^\alpha \subset \mathbb{R}$ und die Darstellungen Γ_1^+ , Γ_2^+ , Γ_1^- , Γ_2^- der Dimension 1 erfüllen $\Gamma \hat{=} \Gamma^* \hat{=} \Gamma_{\text{reell}}$; die anderen Darstellungen von O_h sind ebenfalls reell was sich mit dem FS Test überprüfen lässt, $\sum_R \chi^\alpha(R^2) = g$. Demnach sind alle Darstellungen von O_h äquivalent zu reellen Darstellungen.

Die zentrale Frage ist nun, ob mit der Erweiterung des Raumes $\{\Psi_{\alpha_l}\}$ um die neuen Zustände $\{T\Psi_{\alpha_l}\}$ eine Vergrößerung (Verdopplung) des Raumes einhergeht. Von den obigen drei Fällen diskutieren wir den ersten Fall $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}^{\alpha*} \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$ etwas genauer und zitieren die Resultate für die beiden anderen Fälle:

- $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}^{\alpha*} \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$: Wir transformieren auf eine Basis Ψ , so dass $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$ in der Basis $\{\Psi_1, \dots, \Psi_{l_\alpha}\}$. Da \mathcal{D}^α jetzt reell ist, sind auch $\{T\Psi_1, \dots, T\Psi_{l_\alpha}\}$ Partnerfunktionen zu \mathcal{D}^α ; Ψ_i und $T\Psi_i$ sind demnach Partnerfunktionen zu derselben irreduziblen Darstellung (und derselben Spalte) und daher gilt (aufgrund der Orthogonalität von Partnerfunktionen zu verschiedenen Spalten)

$$\langle \Psi_i, T\Psi_j \rangle = 0 \quad (2.55)$$

für $i \neq j$, also ist $T\Psi_j$ unabhängig von $\Psi_{i \neq j}$. Es bleibt zu testen ob auch $T\Psi_i$ unabhängig von Ψ_i ist: Nehmen wir an, es sei $T\Psi_i = c_i \Psi_i$, dann ist $T^2\Psi_i = |c_i|^2 \Psi_i$. Für Spin 1/2 ist dies im Widerspruch zu $T^2\Psi_i = -\Psi_i$, damit sind Ψ_i und $T\Psi_i$ linear unabhängig und \mathcal{D}^α tritt deshalb zweimal auf. Für spinlose Teilchen ist $T^2\Psi = \Psi$ kein Widerspruch und \mathcal{D}^α tritt dann nur einmal auf.

- $\mathcal{D}^\alpha \hat{\neq} \mathcal{D}^{\alpha*}$: Dann sind Ψ und $T\Psi$ linear unabhängig und \mathcal{D}^α tritt zweimal auf,
- $\mathcal{D}^\alpha \hat{=} \mathcal{D}^{\alpha*} \hat{\neq} \mathcal{D}_{\text{reell}}^\alpha$: Dann ist die Entartung 2-fach für spinlose Teilchen und 1-fach für Teilchen mit Spin 1/2.

Mit Hilfe obiger Überlegungen können wir entscheiden, ob $\mathcal{D} \hat{=} \mathcal{D}^*$ bzw. $\mathcal{D}^* \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}$ ist. Je nachdem, ob die zu \mathcal{D}^* gehörige Basis $\{T\Psi_i\}$ mit der alten, zu \mathcal{D} gehörigen Basis $\{\Psi_i\}$ übereinstimmt, erzeugt die Zeitumkehrinvarianz keine zusätzliche Entartung bzw. eine doppelte Entartung. Ob $\{\Psi_i\}$ mit $\{T\Psi_i\}$ übereinstimmt, hängt von der Relation zwischen \mathcal{D} , \mathcal{D}^* und $\mathcal{D}_{\text{reell}}$ ab.⁸

Zusammenfassend erhält man für die Energieentartung für spinlose und Spin-1/2 Teilchen das Schema

	Frobenius/Schur	Spin 0	Spin $\frac{1}{2}$
$\mathcal{D} \hat{=} \mathcal{D}^* \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}$	$\sum_R \chi(R^2) = g$	1	2
$\mathcal{D} \hat{\neq} \mathcal{D}^*$	$\sum_R \chi(R^2) = 0$	2	2
$\mathcal{D} \hat{=} \mathcal{D}^* \hat{\neq} \mathcal{D}_{\text{reell}}$	$\sum_R \chi(R^2) = -g$	2	1

2.7 Raumgruppen

Schliesslich betrachten wir die Translationssymmetrie und die volle Raumgruppe der Kristalle und die zugehörigen Darstellungen. Eine Translation $\vec{R}_{\vec{n}}$ um den in Gl. (1.1) definierten Gittervektor $\vec{R}_{\vec{n}} = \sum_i n_i \vec{a}_i$ ($n_i \in \mathbb{Z}$, \vec{a}_i primitive Gittervektoren) wird in Seitz-Notation durch das Element $\{E|\vec{R}_{\vec{n}}\} \in \tau$ der Raumgruppe beschrieben. Die oft benutzten periodischen Randbedingungen (für einen endlichen Kristall mit $N = N_1 N_2 N_3$ Elementarzellen)

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.56)$$

lassen sich in dieser Notation durch die Gleichungen

$$\{E|\vec{R}_{(N_1,0,0)}\} = \{E|\vec{R}_{(0,N_2,0)}\} = \{E|\vec{R}_{(0,0,N_3)}\} = \{E|0\} \quad (2.57)$$

ausdrücken. Die Translationen τ bilden eine abelsche Gruppe, jedes Element definiert seine eigene Klasse und somit sind alle irreduziblen Darstellungen eindimensional. Weiter zerfällt die Translationsgruppe in 3 zyklische Gruppen⁹ der Ordnung N_1 , N_2 und N_3 , die durch die Gittervektoren \vec{a}_i erzeugt

⁸Beachte, dass dieses Spiel eine Folge der Anitunitarität von T ist; ein unitärer Operator produziert trivial denselben Entartungsraum, $\{U\Psi_i\} = \{\Psi_i\}$.

⁹Eine zyklische Gruppe kann aus einem einzelnen Element erzeugt werden

werden. Die Darstellungen sind durch die Produkte der N_i -ten Wurzeln von -1 gegeben,

$$D^{\vec{k}_{\vec{m}}}(\vec{R}_{\vec{n}}) = e^{-i\vec{k}_{\vec{m}} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}} = \exp\left[-2\pi i \sum_{j=1}^3 \frac{m_j n_j}{N_j}\right] \quad (2.58)$$

mit

$$\vec{k}_{\vec{m}} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i, \quad m_i \in \{0, \dots, N_i - 1\}, \quad (2.59)$$

und den elementaren reziproken Gittervektoren ($V_{\text{uc}} = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$ das Volumen der Einheitszelle)

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{\text{uc}}} \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3, \quad (2.60)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{\text{uc}}} \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1, \quad (2.61)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{\text{uc}}} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2. \quad (2.62)$$

Beachte, dass wegen

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.63)$$

für (reziproke) Gittervektoren $\vec{R}_{\vec{n}}$ ($\vec{K}_{\vec{m}}$) gilt, dass

$$e^{i\vec{K}_{\vec{m}} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}} = e^{i \sum_{ij} m_j n_i \vec{b}_j \cdot \vec{a}_i} = e^{2\pi i \sum_i m_i n_i} = 1. \quad (2.64)$$

Jeder \vec{k} -Vektor ($\vec{k} = \vec{k}_{\vec{m}}$ im folgenden) gehört zu einer irreduziblen Darstellung der Translationsgruppe. Üblicherweise wählen wir \vec{k} in der ersten Brillouinzone, d.h. in der primitiven Einheitszelle des reziproken Gitters symmetrisch zum Ursprung.

2.7.1 Bloch'sches Theorem

Betrachte nun den Einteilchen-Hamiltonoperator H eines Kristalls mit periodischem Potenzial,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad V(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{n}}) = V(\vec{r}). \quad (2.65)$$

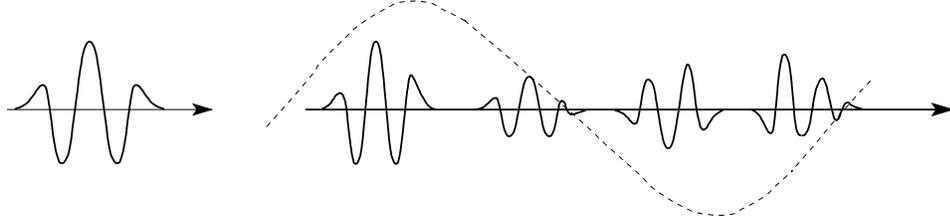


Abb. 2.2: Schematische Darstellung der lokalen, orbitalen Wellenfunktion (links) und einer Blochwelle, bei der die Amplituden (gestrichelte Linie) der lokalen Wellenfunktion periodisch moduliert werden (rechts).

Die Eigenfunktionen von H sind dann auch Eigenfunktionen der Translationen τ und erfüllen

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\{E|\vec{R}_n\}} \Psi(\vec{r}) &= \Psi(\vec{r} - \vec{R}_n) = D^{\vec{k}}(\vec{R}_n) \Psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \Psi(\vec{r}), \\ \left[\mathcal{U}_R \Psi(\vec{r}) &= \Psi(R^{-1} \vec{r}) = \sum_i D(R)_{ij} \Psi_j(\vec{r}) \right]. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Die Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r}) \quad (2.67)$$

lässt sich daher faktorisieren in eine ebene Welle und eine strikt gitterperiodische Funktion $u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R}_n)$. Damit haben wir das **Bloch'sche Theorem** aus der Gruppentheorie hergeleitet:

Die Energien und Eigenfunktionen der Gitterelektronen lassen sich nach den irreduziblen Darstellungen der Translationsgruppe des Gitters klassifizieren. Zu einer irreduziblen Darstellung $\mathcal{D}^{\vec{k}}$ gehören die Energien $E_n(\vec{k})$ sowie die Eigenvektoren

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.68)$$

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_n) \quad \text{periodisch.} \quad (2.69)$$

Der \vec{k} -Vektor läuft dabei über die erste Brillouinzone und n spezifiziert den n -ten Eigenwert zu gegebenem \vec{k} .

2.7.2 Raumgruppen und Spin

Wir suchen die irreduziblen Darstellungen der Doppelgruppe

$$\tau' = \tau \times \{ \{E|0\}, \{ \bar{E}|0 \} \} \quad (2.70)$$

τ	$\{E 0\}$	$\{E \vec{R}_{\vec{n}}\}$		
$\mathcal{D}^{\vec{k}=0}$	1	1		
$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}^{\vec{k}} \\ \mathcal{D}^{-\vec{k}} \end{array} \right.$	1	$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$		
	1	$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$		

τ'	$\{E 0\}$	$\{\bar{E} 0\}$	$\{E \vec{R}_{\vec{n}}\}$	$\{\bar{E} \vec{R}_{\vec{n}}\}$
$\mathcal{D}'^{\vec{k}=0}$	1	-1	1	-1
$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}'^{\vec{k}} \\ \mathcal{D}'^{-\vec{k}} \end{array} \right.$	1	-1	$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$	$-e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$
	1	-1	$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$	$-e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$

Tabelle 2.13: Charaktertafeln der Translationensgruppe τ und der zugehörigen Doppelgruppe τ' .

zur Translationsgruppe τ (\bar{E} Spinrotation um 2π). Die Gruppe $\{\{E|0\}, \{\bar{E}|0\}\}$ hat zwei Darstellungen

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \{E|0\} & \{\bar{E}|0\} \\ \hline 1 & 1 \\ \hline 1 & -1 \\ \hline \end{array}.$$

Dabei benötigen wir für Spin-1/2-Teilchen die zusätzliche Darstellung mit Charakter $\chi(\{\bar{E}|0\}) = -1$. Die Charaktere zu $\{\bar{E}|\vec{R}_{\vec{n}}\}$ ergeben sich dann aus denjenigen von $\{E|\vec{R}_{\vec{n}}\}$ durch Multiplikation mit -1 ,

$$\chi(\{\bar{E}|\vec{R}_{\vec{n}}\}) = -\chi(\{E|\vec{R}_{\vec{n}}\}) = -e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}. \quad (2.71)$$

Wir erhalten damit die Charaktertafeln für τ und τ' in Tab. 2.13.

2.7.3 Zeitumkehrinvarianz

Für spinlose Teilchen folgt aus der Zeitumkehrinvarianz von H (vgl. Abb. 2.3(a)):

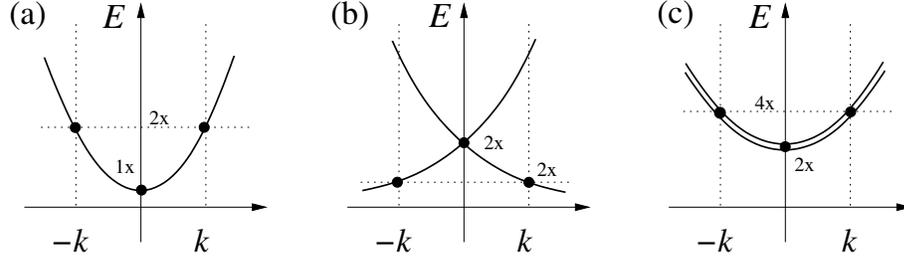


Abb. 2.3: Entartung der Energieeigenwerte $E(\vec{k})$ für (a) spinlose Teilchen, (b) Spin-1/2-Teilchen mit $H_{\text{spin}} \neq 0$, (c) Spin-1/2-Teilchen mit $H_{\text{spin}} = 0$, vgl. Text.

- $\vec{k} \neq 0$: Die irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}^{\vec{k}}$ und $\mathcal{D}^{\vec{k}^*}$ mit Charakteren $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}}$ und $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}}$ sind nicht äquivalent (vgl. den Fall 2, $\mathcal{D} \neq \mathcal{D}^*$, in Abschnitt 2.6.2) und die Energie $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$ tritt 2-mal auf (für \vec{k} und für $-\vec{k}$). Der Charakter von $\mathcal{D}^{-\vec{k}}$ ist $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}}$ und $\mathcal{D}^{-\vec{k}}$ ist nicht äquivalent zu $\mathcal{D}^{\vec{k}}$.
- $\vec{k} = 0$: Es gilt $\mathcal{D}^0 \hat{=} \mathcal{D}^{0*} \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}$ und deshalb gibt es keine zusätzliche Entartung (vgl. Abschnitt 2.6.2) und es gilt

$$E(\vec{k}) = E(-\vec{k}) \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right|_{\vec{k}=0} = 0. \quad (2.72)$$

Für Spin-1/2-Teilchen (mit $H_{\text{spin}} \neq 0$) gilt dagegen (vgl. Abb. 2.3(b)):

- $\vec{k} \neq 0$: Wie für spinlose Teilchen folgt $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$.
- $\vec{k} = 0$: Es gilt $\mathcal{D}^0 \hat{=} \mathcal{D}^{0*} \hat{=} \mathcal{D}_{\text{reell}}$ und deshalb sind die Energieeigenwerte 2-fach Kramers-entartet.¹⁰

In diesem Fall gilt

$$\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left. \frac{\partial E_{\sigma}}{\partial \vec{k}} \right|_{\vec{k}=0} = 0. \quad (2.73)$$

Im speziellen Fall von Spin-1/2-Teilchen, aber keiner Spinabhängigkeit im Hamiltonoperator ($H_{\text{spin}} = 0$), ist die Entartung höher, und zwar 4-fach für $\vec{k} \neq 0$ und 2-fach für $\vec{k} = 0$ (vgl. Abb. 2.3(c)).¹¹

¹⁰Beachte: unter T transformiert $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$, $\vec{\sigma} \rightarrow -\vec{\sigma}$

¹¹Beachte: Das Schema in Abschnitt 2.6.2 gibt nur die minimale Entartung an, zusätzliche Entartungen (z.B. durch $H_{\text{spin}} = 0$) sind dabei nicht berücksichtigt.

2.8 Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe

2.8.1 Kleine Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}}$

Schliesslich wird die Punkt- und Translationsgruppe des Kristalls zur Raumgruppe kombiniert. Es bezeichnen \vec{a}_i die primitiven Gittervektoren, \vec{d}_i die Basis des Kristalls, $\{R|\vec{a}\}$ die Elemente der Raumgruppe \mathcal{G}_R , $\vec{a} = \vec{R}_{\vec{n}} + \vec{f}$, $\vec{R}_{\vec{n}}$ einen Gittervektor und \vec{f} einen fraktionellen Translationsvektor. Die Anwendung von $\{R|\vec{a}\}$ auf die Position \vec{d}_j eines Atoms in der Zelle bewirkt eine Translation,

$$\{R|\vec{a}\}\vec{d}_j = \vec{d}_{j'} + \vec{R}_{\vec{n}} \quad , \quad (2.74)$$

wobei $\vec{d}_{j'}$ demselben Atomtyp (aber nicht unbedingt demselben Element der Basis) entspricht.

Eine Multiplikation in \mathcal{G}_R ist definiert als

$$\{R|\vec{a}\}\{S|\vec{b}\} = \{RS|R\vec{b} + \vec{a}\} \quad (2.75)$$

und

$$\{R|\vec{a}\}^{-1} = \{R^{-1}| -R^{-1}\vec{a}\} \quad (2.76)$$

bezeichnet die Inverse.

Die reinen Translationen $\{E|\vec{R}_{\vec{n}}\}$ definieren eine invariante Untergruppe $\tau \subset \mathcal{G}_R$ und \mathcal{G}_R zerfällt in die (Rechts-)Nebenklassen¹² (die Ordnung gN von \mathcal{G}_R ergibt sich aus den $N = N_1N_2N_3$ Translationen und aus den benötigten g Elementen aus der Punktgruppe \mathcal{G})

$$\mathcal{G}_R = \tau \times \left\{ \{E|0\}, \{R_2|\vec{f}_2\}, \{R_3|\vec{f}_3\}, \dots, \{R_g|\vec{f}_g\} \right\}. \quad (2.77)$$

\mathcal{G}_R heisst *symmorph*, falls alle $\vec{f}_2, \dots, \vec{f}_g = 0$, sonst heisst \mathcal{G}_R *nicht-symmorph*.

Wir wollen die Eigenfunktionen und Eigenwerte von H_{Kristall} mit Hilfe der irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G}_R klassifizieren. Die Basisfunktionen von $\mathcal{D}_{\mathcal{G}_R}^\alpha$ sind auch Basisfunktionen von \mathcal{D}_τ^α und wir konzentrieren uns deshalb auf die Blochfunktionen. Das Element $\{R|\vec{a}\} \in \mathcal{G}_R$ transformiert dann die

¹²Aus der Untergruppe τ und einem Element $\{R|\vec{a}\}$ der Gruppe \mathcal{G}_R erhalten wir eine Rechtsnebenklasse $\tau\{R|\vec{a}\}$ durch Multiplikation der Elemente von τ von rechts. Die Menge aller Rechtsnebenklassen \mathcal{G}_R/τ ist gerade die Punktgruppe mit den Shifts \vec{f} .

Blochfunktion $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ zu \vec{k} in eine Blochfunktion zu $R\vec{k}$,

$$U_{\{R|\vec{a}\}}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\{R|\vec{a}\}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r}) = \quad (2.78)$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot(R^{-1}\vec{r}-R^{-1}\vec{a})}u(R^{-1}\vec{r}-R^{-1}\vec{a}) = \quad (2.79)$$

$$= e^{i(R\vec{k})\cdot\vec{r}}e^{-i\vec{k}\cdot(R^{-1}\vec{a})}u[R^{-1}(\vec{r}-\vec{a})] = \quad (2.80)$$

$$= e^{i(R\vec{k})\cdot\vec{r}}u'(\vec{r}), \quad (2.81)$$

wobei $u(\vec{r}), u'(\vec{r})$ gitterperiodisch sind. Wir wählen \vec{k} aus der ersten Brillouinzone (1. B.Z.) und definieren die Operationen $R_{\vec{k}} \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ mit $\{R_{\vec{k}}|\vec{f}_{\vec{k}}\} \in \mathcal{G}$, welche \vec{k} (modulo reziprokiem Gittervektor $\vec{K}_{\vec{m}}$) invariant lassen,

$$R_{\vec{k}}\vec{k} = \vec{k} + \vec{K}_{\vec{m}}. \quad (2.82)$$

Die Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ ist die *kleine Punktgruppe* von \vec{k} und $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$ mit den Elementen $\{R_{\vec{k}}|\vec{a}\}$ heisst die *kleine Gruppe von \vec{k}* .

Für $\vec{k} = 0$ ist $\mathcal{G}_{\vec{k}=0} = \mathcal{G}$ und für allgemeine (nicht speziell ausgezeichnete) \vec{k} ist $\mathcal{G}_{\vec{k}} = \{E\}$ trivial. Entlang besonderer Symmetrierichtungen und in ausgezeichneten Symmetriepunkten der Brillouinzone ist $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ von \mathcal{G} und $\{E\}$ verschieden. Es sind diese Symmetrierichtungen und Punkte, welche von besonderem Interesse sind. Das Zentrum der B.Z. bei $\vec{k} = 0$ hat also die volle Symmetrie des Gitters; gehen wir vom Zentrum weg, so reduziert sich die Symmetrie, um sich in besonderen Symmetriepunkten (z.B. auf dem Rand der B.Z.) wieder zu erhöhen.

Es sei jetzt ein $\vec{k} \in 1.\text{B.Z.}$ und die zugehörige kleine Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$ gegeben. Eine Drehung gemäss (2.81) mit $R \in \mathcal{G}_{\vec{k}R}$ bildet eine Blochfunktion zu \vec{k} wiederum auf eine Blochfunktion zu \vec{k} ab, also konstituieren die Blochfunktionen zu \vec{k} einen Darstellungsraum für die kleine Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$. Wir können daher jeden \vec{k} -Vektor durch die irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}^{\vec{k}\alpha}$ von $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$ klassifizieren. Die Blochfunktionen zu \vec{k} tragen dann die durch $\mathcal{D}^{\vec{k}\alpha}$ gegebene Symmetrie. Um die zu \vec{k} gehörige Darstellung zu finden, konstruieren wir zuerst $\mathcal{G}_{\vec{k}}$. Zu $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ gibt es dann die irreduzible Darstellung \mathcal{D}^{α} aus Matrizen $D^{\alpha}(R_{\vec{k}})$. Wir erhalten daraus die Darstellung $\mathcal{D}^{\vec{k}\alpha}$ der kleinen Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$ zu \vec{k} , indem wir jedem Element $\{R_{\vec{k}}|\vec{a}\} \in \mathcal{G}_{\vec{k}R}$ die Matrix

$$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}} \cdot D^{\alpha}(R_{\vec{k}}) \quad (2.83)$$

zuordnen. Diese Matrizen erfüllen die Multiplikationsregeln der Raumgruppe \mathcal{G}_R ,

$$\begin{aligned} \{R_{\vec{k}}|\vec{a}\}\{S_{\vec{k}}|\vec{b}\} &= \{R_{\vec{k}}S_{\vec{k}}|R_{\vec{k}}\vec{b} + \vec{a}\}, & (2.84) \\ \xrightarrow{\text{ls}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}} D^\alpha(R_{\vec{k}}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{b}} D^\alpha(S_{\vec{k}}) &= e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{a}+\vec{b})} D^\alpha(R_{\vec{k}}S_{\vec{k}}), \\ \xrightarrow{\text{rs}} e^{-i\vec{k}\cdot(R_{\vec{k}}\vec{b}+\vec{a})} D^\alpha(R_{\vec{k}}S_{\vec{k}}) &= e^{-i(R_{\vec{k}}^{-1}\vec{k})\cdot\vec{b}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}} D^\alpha(R_{\vec{k}}S_{\vec{k}}), \end{aligned}$$

genau dann, wenn $R_{\vec{k}}^{-1}\vec{k} = \vec{k}$ oder $R_{\vec{k}}\vec{k} = \vec{k}$ ist. Dies ist für $\vec{k} \in 1.\text{B.Z.}$ ohne dem Rand immer der Fall und für den Rand, falls \mathcal{G}_R symmorph ist. Für \mathcal{G}_R nicht-symmorph und \vec{k} auf dem Rand der 1. B.Z. ist $R_{\vec{k}}^{-1}\vec{k} = \vec{k} + \vec{K}_{\vec{m}}$ und mit $\vec{b} = \vec{f}$ ist der Faktor $\exp(-i\vec{K}_{\vec{m}} \cdot \vec{f}) \neq 1$, also ist die Multiplikationsregel für die Raumgruppe verletzt.

Wir brauchen dann eine neue Strategie um eine konsistente Darstellung der Raumgruppe zu finden. O.B.d.A. können wir als Beispiel $\vec{k} = \vec{K}_{\vec{m}}/2$ betrachten. Wir behandeln die \vec{f} Vektoren im Produkt $\vec{R}_{\vec{n}} \{R_{\vec{k}}|\vec{f}\} \in \mathcal{G}_{\vec{k}R}$ als ‘Marker’ und analysieren alle Translationen $\vec{R}_{\vec{n}}$ zu jedem Element $\{R_{\vec{k}}|\vec{f}\}$ in der kleinen Gruppe. Diese Translationen ergeben Faktoren $\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}) = \pm 1$. Zusammen mit den Elementen $\{R_{\vec{k}}|\vec{f}\}$ konstruiert man dann (via inneres Produkt) eine neue Gruppe $\tilde{\mathcal{G}}_{\vec{k}}|_{\vec{k}=\vec{K}_{\vec{m}}/2}$ der Ordnung $2g_{\vec{k}}$. Wiederum gilt es die irreduziblen Darstellungen dieser neuen Gruppe zu finden und ein Beispiel wird später erwähnt.¹³

2.8.2 Stern von \vec{k}

Schliesslich erwähnen wir noch den Stern von \vec{k} : Die durch $R \in \mathcal{G}$ erzeugte Menge $\{R\vec{k}|R \in \mathcal{G}\}$ heisst *Stern von \vec{k}* . Die Eigenwerte des Sterns von \vec{k} sind alle gleich und die zum Stern gehörigen Eigenfunktionen erhält man aus $\Psi_{\vec{k}}$ durch Multiplikation mit den Symmetrieeoperationen aus \mathcal{G}_R . Reduzieren wir die 1. B.Z. auf die Punkte, welche nicht zum gleichen Stern gehören, so definieren wir die *reduzierte Brillouinzone* mit Volumen $1/g$. Die Basis $\Psi_{\vec{k}}^1, \dots, \Psi_{\vec{k}}^{l_\alpha}$ zu $\mathcal{D}^{\vec{k}\alpha}$ von $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$ zusammen mit den entsprechenden Wellenfunktionen Ψ im Stern von \vec{k} definieren die Basis einer irreduziblen Darstellung

¹³Die Translationen erzeugen nur Phasenfaktoren ± 1 . Deshalb lassen sich alle Operationen $\{R_{\vec{k}}|\vec{R}_{\vec{m}}\}$ und $\{R_{\vec{k}}|\vec{R}_{\vec{m}} + \vec{f}\}$ in 2 Mengen $\mathcal{G}_{\vec{k}}^0$ und $\mathcal{G}_{\vec{k}}^1$ zu $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{m}}} = 1$ und $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{m}}} = -1$ gruppieren. Die neue kleine Symmetriegruppe zu $\vec{k} = \vec{K}_{\vec{m}}/2$ ist $\tilde{\mathcal{G}}_{\vec{k}} = \mathcal{G}_{\vec{k}}^0 \cdot \mathcal{G}_{\vec{k}}^1$, die Translationen sind eliminiert.

$\mathcal{D}_R^{\vec{k}\alpha}$ von \mathcal{G}_R der Dimension $s_{\vec{k}} l_\alpha$ ($s_{\vec{k}}$ Zahl der Vektoren im Stern von \vec{k}). Mit

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k} \in \text{red.B.Z.}} \sum_{\alpha} (s_{\vec{k}} l_\alpha)^2 &= \sum_{\vec{k} \in \text{red.B.Z.}} s_{\vec{k}}^2 \underbrace{\sum_{\alpha} l_\alpha^2}_{g_{\vec{k}}} \\ &= \sum_{\vec{k} \in \text{red.B.Z.}} s_{\vec{k}} g = Ng \end{aligned} \quad (2.85)$$

haben wir alle irreduziblen Darstellungen von \mathcal{G}_R gefunden (wir benutzen, dass $s_{\vec{k}} g_{\vec{k}} = g$, $g_{\vec{k}}$ die Ordnung der kleinen Punktgruppe). Beachte aber, dass wir nie die irreduziblen Darstellungen der Raumgruppen \mathcal{G}_R brauchen werden sondern nur die irreduziblen Darstellungen der kleinen Punktgruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}}$.

2.8.3 Symmetriereduktion und Bezeichnungen

Symmetriereduktionen können auf verschiedene Arten erzeugt werden: Zum Beispiel kann die Symmetrie des Kristalls via Anwendung eines anisotropen Druckes eingeschränkt werden, etwa von kubischer O_h zu tetragonaler D_{4h} Symmetrie wie in Abb. 2.8.3 skizziert. Den Kristallographen folgend haben wir die irreduziblen Darstellungen der jeweils vollen Punktgruppe (O_h , D_{4h} , D_{2h} , ...) eines Kristalls immer mit Γ bezeichnet (obwohl $[O_h \supset] D_{4h} \supset D_{2h} \supset \dots$ jeweils Untergruppen definieren). Andererseits können wir im voll symmetrischen (z.B., mit kubischer O_h Symmetrie) Kristall eine reduzierte Symmetrie antreffen, wenn wir uns vom Γ -Punkt in der Brillouinzone entfernen (Reduktion der Symmetrie im \vec{k} -Raum). Die entsprechenden irreduziblen Darstellungen werden dann verschieden benannt (nicht mehr mit Γ), obwohl sie sich auf die gleichen Punktgruppen beziehen können wie sie in der obigen Reduktion der Symmetrien auftreten. In der Abb. 2.8.3 sind die Auswirkungen einer Symmetriereduktion auf die Symmetriegruppen spezieller \vec{k} -Punkte in der Brillouinzone dargestellt. Man sieht, dass der Γ -Punkt jeweils die volle Symmetrie des Gitters besitzt, die Punkte auf dem Rand der B.Z. aber eine geringere Symmetrie haben.

2.8.4 Notationen

Im folgenden Kapitel übernehmen wir die Tabellen und damit die Notation aus [Bas75]. Unglücklicherweise ist die Ref. [Bas75] nicht völlig konsistent im Gebrauch von X - und M -Punkten; ebenfalls sind ihre irreduziblen

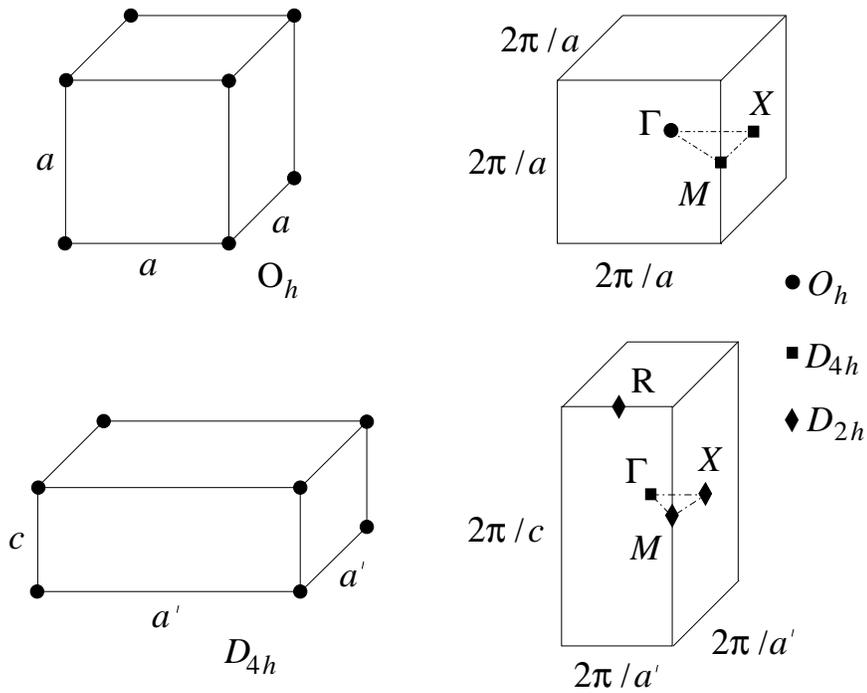


Abb. 2.4: Reduktion von kubischer (oben) zu tetragonaler Symmetrie (unten) für die primitive Einheitszelle des Gitters (links) und die erste Brillouinzone im reziproken Raum (rechts). Die Einheitszellen haben die volle Symmetrie O_h bzw. $D_{4h} \subset O_h$. Im \vec{k} -Raum ist diese volle Symmetrie nur im Γ -Punkt realisiert. Die kleine Gruppe der Symmetriepunkte für kubische (tetragonale) Symmetrie ist: Γ : O_h (D_{4h}), X : D_{4h} (D_{2h}), M : D_{4h} (D_{2h}).

Darstellungen oft unterschiedlich zu anderen Quellen bezeichnet, vgl. die Konversionstabelle [2.14](#).

Γ -Punkt:

[Mil67]	Γ_1^+	Γ_2^+	Γ_3^+	Γ_4^+	Γ_5^+	Γ_1^-	Γ_2^-	Γ_3^-	Γ_4^-	Γ_5^-
[Bas75, Jos82]	Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ'_{15}	Γ'_{25}	Γ'_1	Γ'_2	Γ'_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}
[Cor84]	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5	Γ_6	Γ_7	Γ_8	Γ_9	Γ_{10}

 M -Punkt:

[Mil67] single D_{4h}	Γ_1^+	Γ_2^+	Γ_3^+	Γ_4^+	Γ_5^+	Γ_1^-	Γ_2^-	Γ_3^-	Γ_4^-	Γ_5^-
[Mil67]	M_1^+	M_2^+	M_3^+	M_4^+	M_5^+	M_1^-	M_2^-	M_3^-	M_4^-	M_5^-
[Bas75]	M_1	M_3	M_2	M_4	M_5	M'_2	M'_4	M'_1	M'_3	M'_5
[Cor84]	M_1	M_2	M_4	M_3	M_5	M'_1	M'_2	M'_4	M'_3	M'_5

 X -Punkt:

[Mil67] single D_{4h}	Γ_1^+	Γ_2^+	Γ_3^+	Γ_4^+	Γ_5^+	Γ_1^-	Γ_2^-	Γ_3^-	Γ_4^-	Γ_5^-
[Mil67]	X_1^+	X_2^+	X_3^+	X_4^+	X_5^+	X_1^-	X_2^-	X_3^-	X_4^-	X_5^-
[Cor84, Jos82]	X_1	X_2	X_4	X_3	X_5	X'_1	X'_2	X'_4	X'_3	X'_5

 Δ -Punkt:

[Mil67] single C_{4v}	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5
[Mil67]	Δ_1	Δ_2	Δ_3	Δ_4	Δ_5
[Bas75, Cor84, Jos82]	Δ_1	Δ_2	Δ'_2	Δ'_1	Δ_5

 Λ -Punkt:

[Mil67] single C_{3v}	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5	Γ_6
[Mil67, Bas75, Cor84, Jos82]	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_4	Λ_5	Λ_6

Tabelle 2.14: Konversionstabellen für einige Symmetriepunkte des einfach kubischen Gitters

Kapitel 3

Bandstrukturen

Die Bandstruktur eines Kristalls ist von fundamentaler Wichtigkeit für seine physikalischen Eigenschaften. Die Bandstruktur und ihr Auffüllen mit Elektronen entscheiden (im Normalfall) darüber, ob das Material ein (*Band*)-*Isolator*, ein *Halbleiter* oder ein *Metall* ist. In (nicht seltenen) Spezialfällen kann eine *starke Wechselwirkung* zwischen den Elektronen ein Metall zu einem Isolator, genauer einem *Mott-Isolator* werden lassen. Auch *starke Unordnung* kann das Metall in einen sogenannten *Anderson-Isolator* transformieren.

Detaillierte Bandstrukturen werden heute auf Computern mit Hilfe von komplexen Programmen bestimmt. Die grundlegende Struktur der Bänder wird aber durch die Symmetriegruppe des Kristalls bestimmt. Insbesondere findet man die Klassifikation der Bänder gemäss den Symmetrien des Kristalls bereits bei verschwindendem Gitterpotential $V \rightarrow 0$, d.h. für freie Elektronen im periodischen Gitter. Das Einschalten des Potentials, $V \neq 0$, produziert dann lediglich noch die ‘Feinstruktur’ bestehend aus Verschiebungen, Hybridisierungen und Lücken in der Bandstruktur – die zugrundeliegende freie Elektron ($V = 0$) Struktur definiert durch die Symmetrien bleibt aber zumeist weiterhin sichtbar. Wir untersuchen (1) die Symmetrieaspekte der Bandstrukturen (Abschnitt 3.1), (2) die Vielteilchenaspekte in der Berechnung der elektronischen Struktur (Abschnitt 3.2) (3) verschiedene Zugänge zur Berechnung von Bandstrukturen (Abschnitt 3.3).

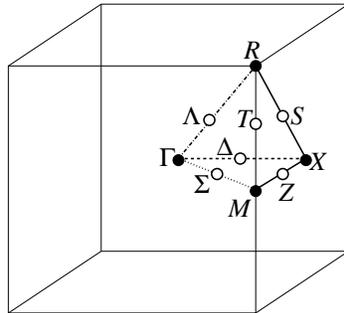


Abb. 3.1: Symmetriepunkte in der Brillouinzone des einfach kubischen Kristalls.

3.1 Symmetriemaspekte der Bandstrukturen

3.1.1 Einfach kubischer Kristall

Das einfachste Beispiel wird durch die freien Elektronen im einfach kubischen Kristall gegeben. Die zugehörige Raumgruppe ist symmorph und wir erwarten keine besonderen Schwierigkeiten. Die Punkte und Linien erhöhter Symmetrie in der Brillouinzone sind in Abb. 3.1 und Tab. 3.1 gezeigt. Man erkennt, dass die Punkte

- Γ, R kubische O_h -Symmetrie,
- M, X tetragonale D_{4h} -Symmetrie,
- T, Δ tetragonale C_{4v} -Symmetrie,
- Λ trigonale C_{3v} -Symmetrie und
- Σ, Z, S orthorhombische C_{2v} -Symmetrie

besitzen.¹ Die irreduziblen Darstellungen an den Symmetriepunkten werden mit dem entsprechenden Symbol bezeichnet, z.B., Γ_i am Γ -Punkt, X_i am X -Punkt, usf.

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass die zunächst kompliziert aussehende Bandstruktur freier Elektronen in einem kubischen Kristall (vgl. Abb. 3.2; es werden die Dispersionen entlang der Hauptsymmetrieachsen aufgezeichnet) im wesentlichen durch Symmetriebetrachtungen verstanden werden kann.

Wir diskutieren die Bandstruktur entlang der Linie Δ von Γ nach X , vgl. Abb. 3.1. Die (kinetische) Energie $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ und die \vec{k} -Vektoren seien

¹Zur Nomenklatur vergleiche Abschnitt 2.1.2.

\vec{k}	Symbol	Ordnung $s_{\vec{k}}$	$\mathcal{G}_{\vec{k}}$	$g_{\vec{k}}$
(k_x, k_y, k_z)		48	C_1	1
(k_x, k_x, k_z)		24	C_{1h}	2
$(k_x, k_y, 0)$		24	C_{1h}	2
$(k_x, k_y, \frac{1}{2})$		24	C_{1h}	2
$(k_x, k_x, 0)$	Σ	12	C_{2v}	4
$(\frac{1}{2}, k_y, 0)$	Z	12	C_{2v}	4
$(\frac{1}{2}, k_y, k_y)$	S	12	C_{2v}	4
(k_x, k_x, k_x)	Λ	8	C_{3v}	6
$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, k_z)$	T	6	C_{4v}	8
$(k_x, 0, 0)$	Δ	6	C_{4v}	8
$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	M	3	D_{4h}	16
$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	X	3	D_{4h}	16
$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	R	1	O_h	48
$(0, 0, 0)$	Γ	1	O_h	48

Tabelle 3.1: Symmetriegruppen für spezielle \vec{k} -Punkte (in Einheiten von $k_a = 2\pi/a$, a die Gitterkonstante, $k_i \in [-1/2, 1/2]$ die erste Brillouin Zone) im einfach kubischen Kristall; gegeben ist die Zahl (Ordnung) $s_{\vec{k}}$ der Vektoren im Stern von \vec{k} und die kleinen Punktgruppen $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ der Ordnung $g_{\vec{k}}$. C_{1h} ist eine reduzierte monokline Symmetrie.

in Einheiten $E_a = \hbar^2(2\pi)^2/2ma^2$ und $k_a = 2\pi/a$ (a Gitterkonstante) gemessen. Reziproke Gittervektoren sind durch $\vec{K}_{\vec{m}} = \vec{m}$, $\vec{m} \in \mathbb{Z}^3$ gegeben. Die 1. B.Z. ist durch das Gebiet $-1/2 \leq k_j \leq 1/2$ gegeben. Wir starten am Γ -Punkt ($\vec{k} = 0$) mit der vollen O_h -Symmetrie (vgl. Tab. 3.1), die Wellenfunktion (Partnerfunktion) ist $\Psi \sim \text{const.}$ und die korrespondierende irreduzible Darstellung ist Γ_1 , (vgl. Tab. 2.9).

Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ'_{15}	Γ'_{25}	Γ'_1	Γ'_2	Γ'_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}
Δ_1	Δ_2	$\Delta_1\Delta_2$	$\Delta'_1\Delta_5$	$\Delta'_2\Delta_5$	Δ'_1	Δ'_2	$\Delta'_1\Delta'_2$	$\Delta_1\Delta_5$	$\Delta_2\Delta_5$
Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_2\Lambda_3$	$\Lambda_1\Lambda_3$	Λ_2	Λ_1	Λ_3	$\Lambda_1\Lambda_3$	$\Lambda_2\Lambda_3$
Σ_1	Σ_4	$\Sigma_1\Sigma_4$	$\Sigma_2\Sigma_3\Sigma_4$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3$	Σ_2	Σ_3	$\Sigma_2\Sigma_3$	$\Sigma_1\Sigma_3\Sigma_4$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_4$

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X'_1	X'_2	X'_3	X'_4	X'_5
Δ_1	Δ_2	Δ'_2	Δ'_1	Δ_5	Δ'_1	Δ'_2	Δ_2	Δ_1	Δ_5
Z_1	Z_1	Z_4	Z_4	Z_2Z_3	Z_2	Z_2	Z_3	Z_3	Z_1Z_4
S_1	S_4	S_1	S_4	S_2S_3	S_2	S_3	S_2	S_3	S_1S_4

Tabelle 3.2: Kompatibilitätstabelle der irreduziblen Darstellungen zum Symmetriepunkt Γ in die Richtungen Δ , Λ , Σ , und zum X -Punkt in die Richtungen Δ , Z und S des einfach kubischen Kristalls, vgl. Abb. 3.1

Die Energie entlang $\vec{k} = (k, 0, 0)$ ist $\varepsilon = k^2$ und erreicht den Wert $\varepsilon = 1/4$ am X -Punkt. Zum X -Punkt gehören die Blochwellen $\sim e^{\pm ikx}$, woraus sich die stehenden Wellen $\sin kx$ und $\cos kx$ ergeben. Am X -Punkt haben wir D_{4h} -Symmetrie und die (Symmetrien der) Partnerfunktionen ergeben sich aus folgender Konversionstabelle:²

$$\begin{aligned}
- X_1 &= \Gamma_1^+ : 1, & - X'_1 &= \Gamma_1^- : xyz (z^2 - y^2), \\
- X_2 &= \Gamma_2^+ : z^2 - y^2, & - X'_2 &= \Gamma_2^- : xyz, \\
- X_3 &= \Gamma_4^+ : zy, & - X'_3 &= \Gamma_4^- : x (z^2 - y^2), \\
- X_4 &= \Gamma_3^+ : zy (z^2 - y^2), & - X'_4 &= \Gamma_3^- : x, \\
- X_5 &= \Gamma_5^+ : xz, yx, & - X'_5 &= \Gamma_5^- : z, y.
\end{aligned}$$

Die stehenden Wellen am X -Punkt gehören offensichtlich zu $\sin kx \sim x \hat{=} X'_4$ und $\cos kx \sim 1 \hat{=} X_1$. Ausgehend von der trivialen Darstellung Γ_1 am Γ -Punkt erreichen wir mit Hilfe der Kompatibilitätsliste in Tab. 3.2 die Darstellung X_1 gleicher Parität, $\Gamma_1 \rightarrow \Delta_1 \rightarrow X_1$. Dies erklärt das unterste Band in Abb. 3.2.

Gehen wir umgekehrt von der Darstellung X'_4 am X -Punkt zurück zum Γ -Punkt, ergeben sich 3 Möglichkeiten, $X'_4 \rightarrow \Delta_1 \rightarrow \Gamma_1, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}$, da Δ_1 kompatibel zu Γ_1 ($\hat{=} \Gamma_1^+$ (dim = 1)), Γ_{12} ($\hat{=} \Gamma_3^+$ (dim = 2)) und Γ_{15} ($\hat{=} \Gamma_4^-$

² Beachte im Vergleich zu der Notation X_α in Ref. [Jos82] und den Partnerfunktionen in Tabelle 2.9 die Ersetzung $x \leftrightarrow z$, da dort die ausgezeichnete Achse $\parallel z$, hier aber $\parallel x$ ist.

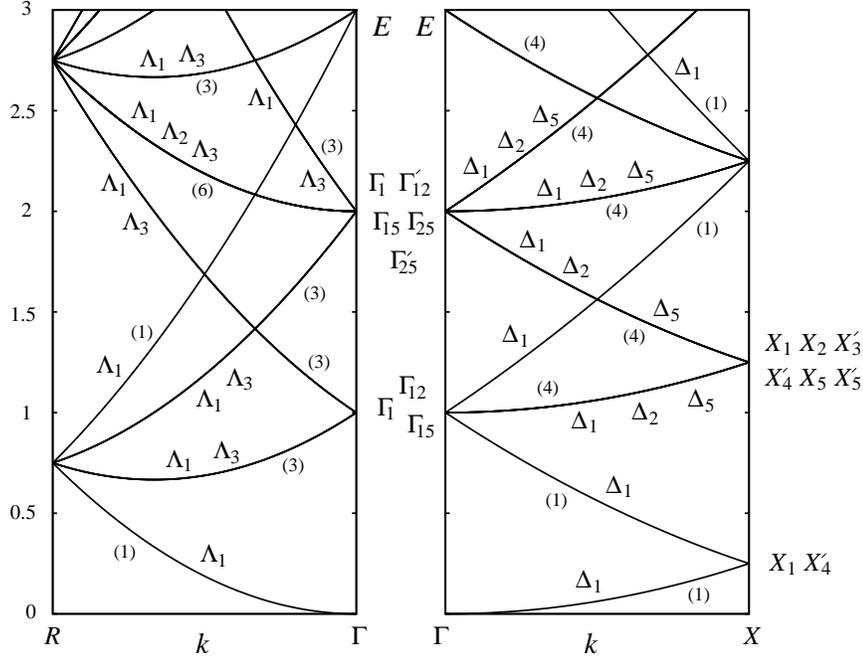


Abb. 3.2: Bandstruktur freier Elektronen im einfach kubischen Kristall mit den kompatiblen irreduziblen Darstellungen. Der Zweig (1) geht von Γ_1 (bei der Energie $\varepsilon = 0$) zu X_1, X'_4 ($\varepsilon = \frac{1}{4}$), wieder zurück zu $\Gamma_1, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}$ ($\varepsilon = 1$), und wieder vorwärts zu $X_5, X'_5, X'_4, X'_3, X_2, X_1$ ($\varepsilon = 5/4$), vgl. Text (Abb. aus Ref. [Bas75])

(dim = 3)) ist. Dabei gehen wir von der Energie $\varepsilon = 1/4$ zur Energie $\varepsilon = 1$, die zu den reziproken Gittervektoren $\vec{k} = \vec{K}_{\vec{m}} = (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$ gehört und damit $6 = 2 \cdot 3$ -fach entartet ist. Die zugehörigen Blochwellen $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{K}_{\vec{m}}}(\vec{r})$ mit $u_{\vec{K}_{\vec{m}}}(\vec{r}) = e^{i\vec{K}_{\vec{m}}\cdot\vec{r}}$ bilden eine Basis für die Darstellungen am Γ -Punkt,

$$\Gamma_1 : \quad \cos x + \cos y + \cos z \sim 1, \quad (3.1)$$

$$\Gamma_{15} : \quad \sin x \sim x, \quad \sin y \sim y, \quad \sin z \sim z,$$

$$\Gamma_{12} : \quad \cos z - \cos y \sim z^2 - y^2, \quad \cos x - (\cos y + \cos z)/2 \sim 3x^2 - r^2.$$

Also gehören zum Endpunkt der Δ_1 Linie am Γ Punkt tatsächlich die Darstellungen Γ_1, Γ_{15} und Γ_{12} .

Gehen wir von der Energie $\varepsilon = 1$ am Γ -Punkt wieder zurück zum X -Punkt erreichen wir auf den 4 Bändern mit $(k, 0, \pm 1)$ und $(k, \pm 1, 0)$ die Energie $\varepsilon = 5/4$ und auf dem Band $(1+k, 0, 0)$ die Energie $\varepsilon = 9/4$. Die Darstellungen Δ_1 , Δ_2 und Δ_5 sind kompatibel mit Γ_1 , Γ_{12} , Γ_{15} und X_1 , X_2 , X_5 , X'_3 , X'_4 , X'_5 . Durch diese und analoge Überlegungen erhält man das Bandstrukturschema in Abb. 3.2. Selbstverständlich gehen die Entartungen immer auf.

Das obige Beispiel beschreibt generisch den einfacheren Fall der symmorphen Gruppen. Etwas komplexer wird die Symmetrieanalyse für die Bandstrukturen nicht-symmorpher Raumgruppen.

3.1.2 Diamantgitter

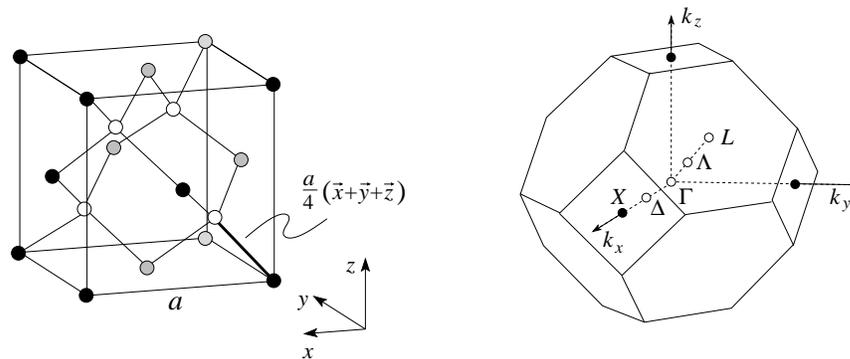


Abb. 3.3: Elementarzelle (links) und 1. Brillouinzone (rechts) des Diamantgitters. (Abb. links/rechts aus Ref.[Ash76]/[Bas75])

Das Diamantgitter in Abb. 3.3 ist ein fcc-Gitter mit den primitiven Gittervektoren (a Gitterkonstante)

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (0, 1, 1), \quad (3.2)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (1, 0, 1), \quad (3.3)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (1, 1, 0), \quad (3.4)$$

und Basis

$$\vec{d}_1 = (0, 0, 0), \quad \vec{d}_2 = \frac{a}{4} (1, 1, 1) = \vec{f}; \quad (3.5)$$

seine Raumgruppe ist nicht-symmorph. Die reziproken Gittervektoren sind

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (-1, 1, 1), \quad (3.6)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (1, -1, 1), \quad (3.7)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (1, 1, -1). \quad (3.8)$$

Die Struktur ist relevant für die Gruppe-IV-Halbleiter (C, Si, Ge) und mit einigen Modifikationen für die III-V- und II-VI-Halbleiter mit Zinkblende Struktur wie z.B. GaAs oder ZnSe.

Die Punktgruppe des Diamantgitters ist die kubische Symmetriegruppe O_h . Wichtig ist, dass bei den Rotationen nun zusätzlich Shifts um den gebrochenen Translationsvektor \vec{f} nötig sein können, um die Atome zur Deckung zu bringen. Die Tabelle 3.3 zeigt die Symmetrieeoperationen des Diamantgitters, wobei der Koordinatenursprung identisch mit einem Gitterpunkt ist.

Im folgenden analysieren wir die Symmetriepunkte und -linien Γ , X , L und Λ , Δ (zur Notation vgl. Abb. 3.3).

Γ -Punkt

Γ , $\vec{k} = (0, 0, 0)$: Bei $\vec{k} = 0$ sind die irreduziblen Darstellungen gerade diejenigen von O_h mit identischen Charakteren, da $e^{i\vec{k}\cdot\vec{f}} = 1$.

X -Punkt

X , $\vec{k} = (1, 0, 0)$: Hier kommt der nicht-symmorphe Charakter der Raumgruppe zum tragen. Die kleine Punktgruppe ist D_{4h} , wir brauchen aber wegen der Verschiebung um \vec{f} eine doppelt so grosse Gruppe. Die Translationen mit $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} = \pm 1$ werden dann durch die Elemente $\{E|0\}$ und $\{E|1\}$ bezeichnet.³ Ebenso entsprechen die Elemente $\{R|\vec{f}\}$ und $\{R|\vec{f}+1\}$ den Elementen aus $\mathcal{G}_{\vec{k}R}$, die Translationen mit $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} = \pm 1$ involvieren. Die neue Gruppe hat daher $2 \cdot 16 = 32$ Elemente in 14 Klassen aufgeteilt. Die Elemente und Klassen sind in Tab. 3.5) aufgelistet; beachte, dass $\{E|0\}$ und $\{E|1\}$ zwei Klassen definieren, aber $\{I|\vec{f}\}$ und $\{I|\vec{f}+1\}$ zur selben Klasse gehören,⁴ also wird die Anzahl der Klassen nicht einfach verdoppelt.

³Die zweite Koordinate ist nur ein Index und hat sonst keine Bedeutung.

⁴Zeige, dass $\{\delta_{2z}|0\}^{-1}\{I|\vec{f}\}\{\delta_{2z}|0\} = \{I|\delta_{2z}\vec{f}\} = \{I|\vec{f}-\vec{a}_3\}$ und $\{I|\vec{f}-\vec{a}_3\}$ gehört zu $\{I|\vec{f}+1\}$, denn $\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{a}_3) = \exp(-i\pi) = -1$.

Klasse	Symmetrie	KOSY	Klasse	Symmetrie	KOSY
E	$\{E 0\}$	$x \ y \ z$	I	$\{I \vec{f}\}$	$\bar{x} + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a$
C_4^2	$\{\delta_{2z} 0\}$	$\bar{x} \ \bar{y} \ z$	IC_4^2	$\{I\delta_{2z} \vec{f}\}$	$x + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{2x} 0\}$	$x \ \bar{y} \ \bar{z}$		$\{I\delta_{2x} \vec{f}\}$	$\bar{x} + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{2y} 0\}$	$\bar{x} \ y \ \bar{z}$		$\{I\delta_{2y} \vec{f}\}$	$x + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a$
IC_4	$\{I\delta_{4z}^{-1} 0\}$	$y \ \bar{x} \ \bar{z}$	C_4	$\{\delta_{4z}^{-1} \vec{f}\}$	$\bar{y} + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{4z} 0\}$	$\bar{y} \ x \ \bar{z}$		$\{\delta_{4z} \vec{f}\}$	$y + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{4x}^{-1} 0\}$	$\bar{x} \ z \ \bar{y}$		$\{\delta_{4x}^{-1} \vec{f}\}$	$x + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{4x} 0\}$	$\bar{x} \ \bar{z} \ y$		$\{\delta_{4x} \vec{f}\}$	$x + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{4y}^{-1} 0\}$	$\bar{z} \ \bar{y} \ x$		$\{\delta_{4y}^{-1} \vec{f}\}$	$z + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{4y} 0\}$	$z \ \bar{y} \ \bar{x}$		$\{\delta_{4y} \vec{f}\}$	$\bar{z} + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a$
IC_2	$\{I\delta_{2xy} 0\}$	$\bar{y} \ \bar{x} \ z$	C_2	$\{\delta_{2xy} \vec{f}\}$	$y + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{2xz} 0\}$	$\bar{z} \ y \ \bar{x}$		$\{\delta_{2xz} \vec{f}\}$	$z + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{2yz} 0\}$	$x \ \bar{z} \ \bar{y}$		$\{\delta_{2yz} \vec{f}\}$	$\bar{x} + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{2x\bar{y}} 0\}$	$y \ x \ z$		$\{\delta_{2x\bar{y}} \vec{f}\}$	$\bar{y} + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{2\bar{x}z} 0\}$	$z \ y \ x$		$\{\delta_{2\bar{x}z} \vec{f}\}$	$\bar{z} + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a$
	$\{I\delta_{2y\bar{z}} 0\}$	$x \ z \ y$		$\{\delta_{2y\bar{z}} \vec{f}\}$	$\bar{x} + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a$
C_3	$\{\delta_{3xyz}^{-1} 0\}$	$z \ x \ y$	IC_3	$\{I\delta_{3xyz}^{-1} \vec{f}\}$	$\bar{z} + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3xyz} 0\}$	$y \ z \ x$		$\{I\delta_{3xyz} \vec{f}\}$	$\bar{y} + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3x\bar{y}z}^{-1} 0\}$	$z \ \bar{x} \ \bar{y}$		$\{I\delta_{3x\bar{y}z}^{-1} \vec{f}\}$	$\bar{z} + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3x\bar{y}z} 0\}$	$\bar{y} \ \bar{z} \ x$		$\{I\delta_{3x\bar{y}z} \vec{f}\}$	$y + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3x\bar{y}\bar{z}}^{-1} 0\}$	$\bar{z} \ \bar{x} \ y$		$\{I\delta_{3x\bar{y}\bar{z}}^{-1} \vec{f}\}$	$z + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a \ \bar{y} + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3x\bar{y}\bar{z}} 0\}$	$\bar{y} \ z \ \bar{x}$		$\{I\delta_{3x\bar{y}\bar{z}} \vec{f}\}$	$y + \frac{1}{4}a \ \bar{z} + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3xy\bar{z}}^{-1} 0\}$	$\bar{z} \ x \ \bar{y}$		$\{I\delta_{3xy\bar{z}}^{-1} \vec{f}\}$	$z + \frac{1}{4}a \ \bar{x} + \frac{1}{4}a \ y + \frac{1}{4}a$
	$\{\delta_{3xy\bar{z}} 0\}$	$y \ \bar{z} \ \bar{x}$		$\{I\delta_{3xy\bar{z}} \vec{f}\}$	$\bar{y} + \frac{1}{4}a \ z + \frac{1}{4}a \ x + \frac{1}{4}a$

Tabelle 3.3: Symmetriegruppe des Diamantgitters mit der Transformation der Achsen x, y, z ("KOSY") geordnet nach Klassen ($\bar{x} = -x$).

Mit den bekannten 10 Darstellungen von D_{4h} (M_α in Tab. 3.5) findet man

$$\sum_1^{14} l_\alpha^2 = \underbrace{\sum_1^{10} l_\alpha^2}_{=16} + \sum_{11}^{14} l_\alpha^2 = 32, \quad (3.9)$$

und wir erhalten 4 neue 2-dimensionale Darstellungen X_1, X_2, X_3, X_4 . Es stellt sich heraus, dass nur diese vier zweidimensionalen Darstellungen für den X -Punkt relevant sind. Dazu betrachtet man die Wirkung der Operation $\{E|1\}$ auf eine Wellenfunktion $\Psi_{\vec{k}}$ (beachte die mit $\{E|1\}$ einhergehenden Translationen), $U_{\{E|1\}}\Psi_{\vec{k}} = \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}})\Psi_{\vec{k}} = -\Psi_{\vec{k}}$ für alle Translationen $\vec{R}_{\vec{n}} = \sum_i n_i \vec{a}_i$ mit ungerader Summe $n_2 + n_3$ (es ist $\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}} = (n_2 + n_3)\pi$ am X -Punkt; die Translationen mit $n_2 + n_3$ gerade gehören zu $\{E|0\}$). Die einzigen irreduziblen Darstellungen mit negativem Charakter zu $\{E|1\}$ sind die $X_i, i = 1, \dots, 4$. Die Niveaus am X -Punkt sind demnach 2-fach entartet entsprechend den 2 identischen Atomen an den Punkten $\vec{0}$ und \vec{f} ; diese Entartung wird in Kristallen mit Zinkblende Struktur (ZnSn) aufgehoben wenn diese Plätze verschiedene Atome beherbergen.

L -Punkt

$L, \vec{k} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$: Die trigonale Symmetrie ist $D_{3d} = C_3 \times C_{3v}$. Gleiche Problematik wie am X -Punkt; wir gehen nicht weiter darauf ein.

Λ -Punkt

$\Lambda, \vec{k} = (\lambda, \lambda, \lambda), 0 < \lambda < \frac{1}{2}$: Die Symmetrie ist C_{3v} mit Rotationen, die die Achsen x, y, z aufeinander abbilden. Es sind keine fraktionellen Translationen \vec{f} involviert.

Δ -Punkt

$\Delta, \vec{k} = (\delta, 0, 0), 0 < \delta < 1$: Die Symmetrie ist C_{4v} zur Rotationsachse x . Der Charakter der Darstellungen von C_{4v} wird mit der Phase $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{f}} = e^{-i\delta\pi/2}$ multipliziert, sobald ein Shift um \vec{f} in der Symmetrieoperation involviert ist.

Γ -Punkt	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	I	$3IC_4^2$	$6IC_4$	$6IC_2$	$8IC_3$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
Γ'_{25}	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
Γ'_{15}	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
Γ'_1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ'_2	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
Γ'_{12}	2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
Γ_{25}	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0
Γ_{15}	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0

L	$\{E 0\}$	$\{\delta_{3xyz}^{1,-1} 0\}$	$\{I\delta_{2x\bar{y},2\bar{x}z,2y\bar{z}} 0\}$	$\{I \vec{f}\}$	$\{I\delta_{3xyz}^{1,-1} \vec{f}\}$	$\{\delta_{2x\bar{y},2\bar{x}z,2y\bar{z}} 0\}$
L_1	1	1	1	1	1	1
L_2	1	1	-1	1	1	-1
L_3	2	-1	0	2	-1	0
L'_1	1	1	1	-1	-1	-1
L'_2	1	1	-1	-1	-1	1
L'_3	2	-1	0	-2	1	0

Δ	$\{E 0\}$	$\{\delta_{2x} 0\}$	$\{\delta_{4x}^{-1} \vec{f}\}\{\delta_{4x} \vec{f}\}$	$\{I\delta_{2x} \vec{f}\}\{I\delta_{2y} \vec{f}\}$	$\{I\delta_{2yz} 0\}\{I\delta_{2y\bar{z}} 0\}$
Δ_1	1	1	$e^{-i\delta\pi/2}$	$e^{-i\delta\pi/2}$	1
Δ'_1	1	1	$e^{-i\delta\pi/2}$	$-e^{-i\delta\pi/2}$	-1
Δ_2	1	1	$-e^{-i\delta\pi/2}$	$e^{-i\delta\pi/2}$	-1
Δ'_2	1	1	$-e^{-i\delta\pi/2}$	$-e^{-i\delta\pi/2}$	1
Δ_5	2	-2	0	0	0

Λ -Linie	$\{E 0\}$	$\{\delta_{3xyz}^{-1} 0\}\{\delta_{3xyz} 0\}$	$\{I\delta_{2x\bar{y}} 0\}\{I\delta_{2\bar{x}y} 0\}\{I\delta_{2y\bar{z}} 0\}$
Λ_1	1	1	1
Λ_2	1	1	-1
Λ_3	2	-1	0

Tabelle 3.4: Charaktertafeln der irreduziblen Darstellungen an speziellen \vec{k} -Punkten für das Diamantgitter. ($\delta_{3xyz}^{1,-1}$ kurz für $\delta_{3xyz}, \delta_{3xyz}^{-1}$; $\delta_{2x\bar{y},2\bar{x}z,2y\bar{z}} \hat{=} \delta_{2x\bar{y}}, \delta_{2\bar{x}z}, \delta_{2y\bar{z}}$)

X	$\{E 0\}$	$\{E 1\}$	$\{\delta_{2x} 0\}$	$\{\delta_{2x} 1\}$	$\{\delta_{4x} 0\}$	$\{\delta_{4x} 1\}$	$\{I\delta_{2x,2y} \vec{f}\}$	$\{I\delta_{2yz} 0\}$	$\{I\delta_{2yz} 1\}$	$\{I \vec{f}\}$	$\{I\delta_{2x} \vec{f}\}$	$\{I\delta_{4x} \vec{f}\}$	$\{\delta_{2z,2y} 0\}$	$\{\delta_{2yz} \vec{f}\}$	$\{\delta_{2yz} 1\}$	$\{\delta_{2yz} \vec{f}\}$
M_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
M_2	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
M_3	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1
M_4	1	1	1	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1
M_5	2	2	-2	-2	0	0	0	0	2	2	-2	0	0	0	0	0
M'_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
M'_2	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
M'_3	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	1
M'_4	1	1	1	1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1
M'_5	2	2	-2	-2	0	0	0	0	-2	-2	2	0	0	0	0	0
X_1	2	-2	2	-2	0	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0
X_2	2	-2	2	-2	0	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0
X_3	2	-2	2	-2	0	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	2	-2
X_4	2	-2	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-2	2

Tabelle 3.5: Charaktertafeln der irreduziblen Darstellungen des Diamantgitters am X -Punkt ($\vec{f}' = \vec{f} + 1$). Die oberste Zeile führt alle 32 Elemente der kleinen Punktgruppe am X -Punkt auf, geordnet in die 14 Klassen; beachte, dass $\{E|0\}$ und $\{E|1\}$ zwei Klassen definieren, aber $\{I|\vec{f}\}$ und $\{I|\vec{f} + 1\}$ zur selben Klasse gehören, also ist die Anzahl der Klassen nicht einfach eine Verdoppelung.

Freie Elektronen im Diamantgitter

Wir betrachten die freien Blochfunktionen (m Bandindex)

$$\Psi_{\vec{k},m} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{K}_m\cdot\vec{r}} \quad (3.10)$$

mit \vec{k} und ε in Einheiten von $k_a = 2\pi/a$ und $E_a = (2\pi)^2\hbar^2/2ma^2$ gemessen. Am Γ -Punkt ist $\vec{k} = 0$ und für die niedrigste Energie $\varepsilon = 0$ (d.h., $\vec{K}_m = (0,0,0)$) ist die Darstellung Γ_1 . Für $\vec{k} = 0$ und $\vec{K}_m = (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$, $m = 1, \dots, 8$, haben wir 8 Eigenvektoren zur Energie $\varepsilon = 3$ am Γ -Punkt.

Mit diesen Blochfunktionen konstruieren wir die Darstellungsmatrizen

$$D_{ij}(\{R|a\}) = \int d^3r \Psi_{0m_i}^* U_{\{R|\vec{a}\}} \Psi_{0m_j} \quad (3.11)$$

und finden die Charaktertabelle

E	C_4^2	C_3	IC_4	IC_2	I	IC_4^2	IC_3	C_4	C_2
8	0	2	0	4	0	0	0	0	0

Der Vergleich mit der Charaktertabelle 2.2 von O_h ergibt, dass diese 8-dimensionale Darstellung in die Darstellungen $\Gamma_1 + \Gamma'_2 + \Gamma'_{25} + \Gamma_{15}$ der Dimensionen $1 + 1 + 3 + 3 = 8$ zerfällt. Für die weiteren Darstellungen an den Γ -, X - und L -Punkten verfährt man ebenso; das Resultat findet man in Tab. 3.6. Kombinieren wir diese Informationen mit den Kompatibilitätsbeziehungen 3.7 für die Darstellungen $\Gamma - \Lambda - L$ und $\Gamma - \Delta - X$ so können wir aus dieser Information leicht die schematische Bandstruktur Abb. 3.4 für die freien Elektronen im Diamanten konstruieren. Zum Vergleich ist in Abb. 3.4 die echte Bandstruktur des Diamanten gezeigt. Die Abb. 3.4 zeigt schematisch, wie sich die verschiedenen Entartungen bei Einschalten eines Gitterpotentials $V(\vec{r})$ aufheben und wie sich die Bänder mit Δ Symmetrie arrangieren. Beachte, dass zwei sich kreuzende Bänder gleicher Symmetrie (hier Δ_2 -Darstellungen) durch die Wirkung des zusätzlichen Potentials V hybridisieren, d.h. es entsteht ein Gap und die Kreuzung wird aufgehoben. Bänder verschiedener Symmetrie mischen hingegen nicht, z.B. wechselwirken Δ_1, Δ_5 nicht mit Δ_2 und die Kreuzung der Bänder wird nicht beeinflusst.⁵

⁵Bei den obigen Analysen wird die Kompatibilitätstafel 3.7 intensiv genutzt.

\vec{k}	# Moden	\vec{n}^2	Darstellungen
Γ -Punkt	1	$(0, 0, 0)^2$	Γ_1
	8	$(1, 1, 1)^2$	$\Gamma_1, \Gamma'_{25}, \Gamma_{15}, \Gamma'_2$
	6	$(2, 0, 0)^2$	$\Gamma'_{25}, \Gamma'_{12}, \Gamma'_2$
	12	$(2, 2, 0)^2$	$\Gamma_1, \Gamma'_{25}, \Gamma_{15}, \Gamma_{12}, \Gamma_{25}$
L -Punkt	2	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^2$	L_1, L'_2
	6	$(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^2$	L_1, L'_2, L_3, L'_3
	6	$(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2})^2$	L_1, L'_2, L_3, L'_3
	6	$(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^2$	L_1, L'_2, L_3, L'_3
	2	$(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2})^2$	L_1, L'_2
X -Punkt	2	$(1, 0, 0)^2$	X_1
	4	$(0, 1, 1)^2$	X_1, X_4
	8	$(1, 2, 0)^2$	X_1, X_2, X_3, X_4
	8	$(2, 1, 1)^2$	$2X_1, X_3, X_4$

Tabelle 3.6: Diamantgitter an den Punkten Γ , L , X : Anzahl der Moden (n_1, n_2, n_3) , die Energie $E = \hbar^2 k_{\vec{n}}^2 / (2m) = E_a \vec{n}^2$ in Einheiten von $E_a = 2\pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$ und die zugehörigen irreduzible Darstellungen.

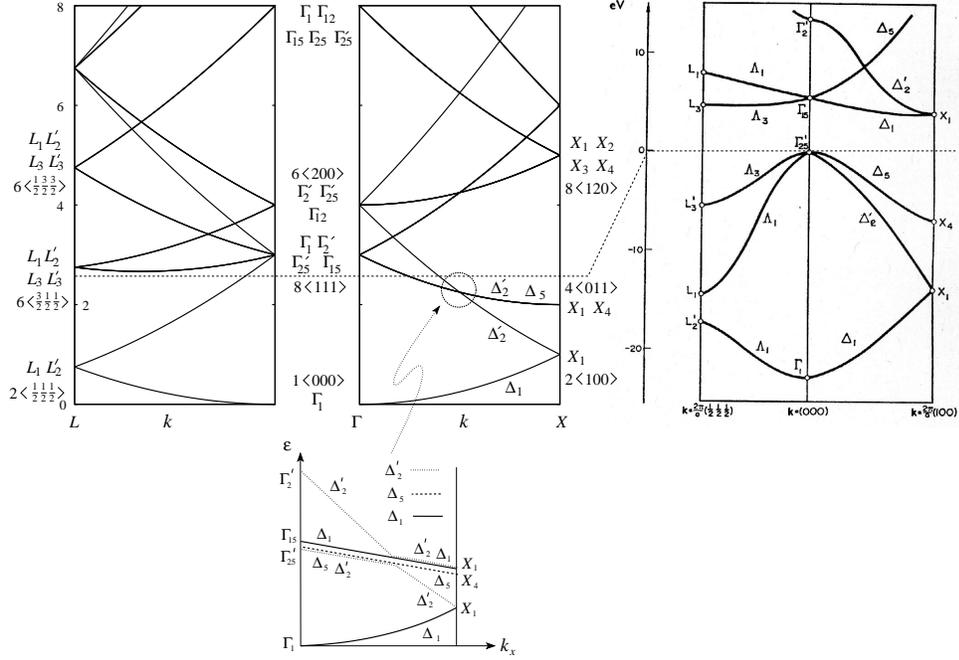


Abb. 3.4: Links: Schematische Bandstruktur des Diamantgitters entlang hochsymmetrischer Richtungen. Die Koeffizienten $n\langle m_1 m_2 m_3 \rangle$ geben die Entartung n der Moden und einen Repräsentanten des \vec{k} Vektors $\vec{K}_m = k_a(m_1, m_2, m_3)$. Γ -Punkt: Γ_1 bei $\varepsilon = 0$, $\Gamma_1 + \Gamma'_2 + \Gamma'_{25} + \Gamma_{15}$ bei $\varepsilon = 3$; X -Punkt: X_1 bei $\varepsilon = 1$, $X_1 + X_4$ bei $\varepsilon = 2$; Linien Δ : Γ_1 ist kompatibel mit Δ_1 , X_1 ist kompatibel mit Δ_1, Δ'_2 , X_4 ist kompatibel mit Δ_5 , Γ'_{25} ist kompatibel mit $\Delta'_2 + \Delta_5$, Γ'_{15} ist kompatibel mit $\Delta_1 + \Delta_5$, Γ'_2 ist kompatibel mit Δ'_2 . Mit dieser Information lassen sich die Punkte korrekt verbinden. Beim Einschalten eines Gitterpotentials spalten $X_1(\downarrow), X_4(\uparrow)$ auf und ebenso $\Gamma_1(\uparrow\uparrow), \Gamma'_2(\uparrow), \Gamma'_{25}(\downarrow) + \Gamma_{15}$. Die beiden Bänder mit gleicher Symmetrie Δ'_2 dürfen sich nicht schneiden und hybridisieren (avoided level crossing). Die Verschiebung der Bänder (partielle Aufhebung der Entartungen) und Hybridisierung der beiden sich kreuzenden Δ'_2 -Bänder beim Einschalten eines Gitterpotentials $V(\vec{r})$ ist nochmals schematisch dargestellt: Die beiden Δ'_2 -Bänder verbinden $X_1(2\langle 100 \rangle) \rightarrow \Gamma'_2(8\langle 111 \rangle)$ und $X_4(4\langle 011 \rangle) \rightarrow \Gamma_{15}(8\langle 111 \rangle)$ (vgl. Abb. 3.4) und hybridisieren unter V (gestrichelte Linien). Die Bänder mit den Symmetrien Δ_1 und Δ_5 bleiben unverändert. Man erhält schliesslich die rechts gezeigte Bandstruktur des Diamantgitters. (Abb. aus [Bas75])

Γ -Punkt	Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ'_{25}	Γ'_{15}
Λ -Linie	Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_1 + \Lambda_3$	$\Lambda_2 + \Lambda_3$
Γ -Punkt	Γ'_1	Γ'_2	Γ'_{12}	Γ_{25}	Γ_{15}
Λ -Linie	Λ_2	Λ_1	Λ_3	$\Lambda_2 + \Lambda_3$	$\Lambda_1 + \Lambda_3$

Γ -Punkt	Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ'_{25}	Γ'_{15}
Δ -Linie	Δ_1	Δ_2	$\Delta_1 + \Delta_2$	$\Delta'_2 + \Delta_3$	$\Delta'_1 + \Delta_5$
Γ -Punkt	Γ'_1	Γ'_2	Γ'_{12}	Γ_{25}	Γ_{15}
Δ -Linie	Δ'_1	Δ'_2	$\Delta'_1 + \Delta'_2$	$\Delta_2 + \Delta_5$	$\Delta_1 + \Delta_5$

X -Punkt	X_1	X_2	X_3	X_4
Λ -Linie	$\Delta_1 + \Delta'_2$	$\Delta'_1 + \Delta_2$	Δ_5	Δ_5

L -Punkt	L_1	L_2	L_3	L'_1	L'_2	L'_3
Λ -Punkt	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_1	Λ_2	Λ_3

Tabelle 3.7: Kompatibilitätstabellen der irreduziblen Darstellungen des Diamantgitters.

Vergleich der Sequenz C-Si-Ge-Sn-Pb

Wir diskutieren die Bandstrukturen der Gruppe IV, C-Si-Ge-Sn-Pb, die sich mit zunehmendem Atomgewicht vom Isolator zum Halbleiter zum Halbmetalle zum Metall entwickeln. Die Elektronen Konfigurationen sind

$$\text{C}(2s^2, 2p^2), \quad \text{Si}(3s^2, 3p^2), \quad \text{Ge}(4s^2, 4p^2), \quad \text{Sn}(5s^2, 5p^2). \quad (3.12)$$

Die inneren Schalen werden bei der Diskussion der Bandstruktur nicht berücksichtigt, da die entsprechenden Zustände ihren Charakter von lokalisierten Atomorbitalen behalten. Auf die 2 Atome pro Einheitszelle müssen wir dann $2 \cdot 4 = 8$ Elektronen unterbringen. Die relevanten Bänder haben die Symmetrie Δ (oder Λ) und mit $\dim(\Delta_1 + \Delta'_2 + \Delta_5) = 1 + 1 + 2 = 4$ und 2 Spinzuständen pro Band füllen wir die Bandstruktur bis zum Γ'_{25} -Punkt auf. Für C/Si/Ge erhalten wir dann eine indirekte Bandlücke (Gap) mit den Energien $E_g^\Delta = 5.5/1.12/0.67$ eV; diese Materialien sind demnach Isolatoren (C) oder Halbleiter (Si/Ge), vgl. Abb. 3.5 und 3.5. In Sn verschwindet das Gap und wir erhalten ein Halbmetall, Pb ist (wie bekannt) ein Metall. Die Gaps von C, Si und Ge sind *indirekt*, da ihre Valenzbandmaxima (in Γ'_{25}) und ihre Leitungsbandminima (entlang Δ_1 und am L -Punkt) bei verschiedenen

\vec{k} -Vektoren sind. Beachte, dass je kleiner das Gap, desto grösser die statische Dielektrizitätskonstante $\epsilon_{C/Si/Ge/Sn/Metall} = 5.7/12.0/16.0/23.8/\infty$.

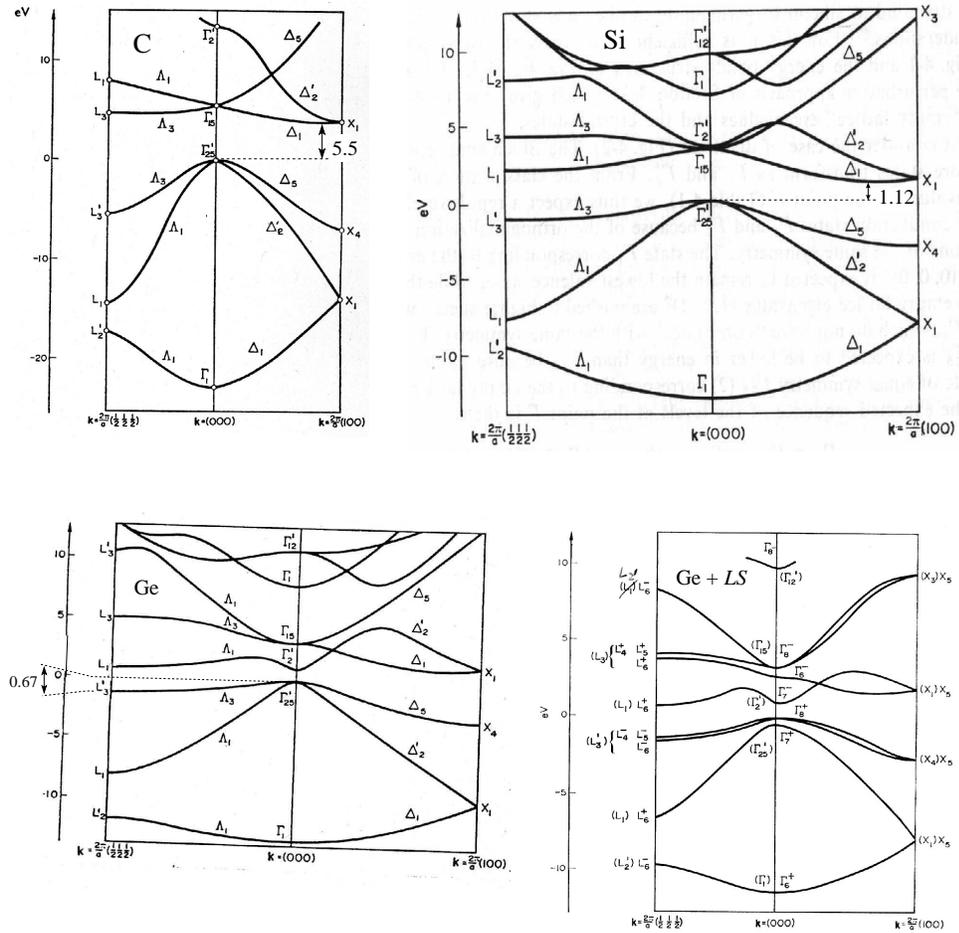


Abb. 3.5: Bandstrukturen von C (oben links) und Si (oben rechts) mit dem indirekten Bandgap von 5.5eV und 1.12eV. (Abb. aus [Bas75]). Unten: Bandstrukturen von Ge ohne(links)/mit(rechts) Spin-Bahn ($\vec{L} \cdot \vec{S}$)-Kopplung. (Abb. aus [Bas75]).

Von besonderem Interesse ist die Aufspaltung der Ge-Bandstruktur auf Grund der Spin-Bahn-Kopplung, vgl. Abb. 3.5 und 3.6. Die $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Kopplung ist $\propto Z^2$ und gemäss Abschnitt 2.5.2 müssen wir zu Doppelgruppen übergehen da der Hamiltonian nunmehr spinabhängig ist.⁶ Die relevanten Bänder (bei p -Dotierung, z.B. mit Al; Ge:Al) sind die Λ_3 - und Δ_5 -Bänder welche als "heavy hole"-Bänder bezeichnet werden: ein flaches Band mit Dispersion $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ entspricht einer grossen Masse. Teilchen in den Λ_1 - und Δ'_2 -Bändern werden als "light holes" bezeichnet. Es sind die heavy-hole Bänder die besonders stark aufspalten. Als Beispiel zum Übergang zu Doppelgruppen betrachten wir den X -Punkt. Die zweidimensionalen Darstellungen Δ_5 und X_4 beschreiben zwei Spin-entartete Bänder die 4 Elektronen beherbergen. Unter Einbeziehung des Spins sind diese Bänder also vierfach entartet. Beim Übergang zu Doppelgruppen geht denn die zweidimensionale Darstellung X_4 in die vierdimensionale Darstellung X_5 über. Die Analyse der Symmetrie am X -Punkt sieht folgendermassen aus: Die Symmetrie ist D_{4h} , wegen des Spins erhalten wir die Doppelgruppe D'_{4h} , und die Nichtsymmorphizität verdoppelt die Anzahl der Symmetrieoperationen nochmals. Unsere Symmetriegruppe hat dann $2 \cdot 2 \cdot 16 = 64$ Elemente die sich in 16 Klassen arrangieren lassen. Die Abzählung ergibt die Dimensionalitäten

$$64 = \underbrace{\sum_1^{10} l_\alpha^2}_{16} + \underbrace{\sum_{10}^{14} l_\alpha^2}_{16} + \underbrace{\sum_{15}^{16} l_\alpha^2}_{32=2 \cdot 4^2} \quad (3.13)$$

und folglich haben die neuen irreduziblen Darstellungen gerade die gewünschte Dimension, $\dim X_5 = 4$.

Schliesslich noch eine Bemerkung zum metallischen Charakter von Zinn Sn. Betrachte den Γ -Punkt in C, Si, Ge und die Aufspaltung aufgrund der SO-Kopplung, vgl. Abb. 3.6. Die Darstellungen Γ'_{25} ($\dim = 3$ multipliziert mit 2 für den Spin) und Γ'_2 ($\dim = 1$ mal 2) gehen über in $\Gamma_7^+ + \Gamma_8^+$ ($\dim = 2+4$) und in Γ_7^- ($\dim = 2$). In Sn ist H_{SO} so gross, dass das SO-Gap zwischen Γ_7^+ und Γ_8^+ Platz für die 2-dimensionale Darstellung Γ_7^- im Gap schafft. Entsprechen müssen wir das untere Band von Γ_8^+ noch füllen und das obere Band bleibt leer. Da das obere Band das untere gerade berührt spricht man von einem Halb-Metal (die Fermi-Energie liegt weder in einer Lücke, noch in einem Band).

⁶Beim Übergang zur relativistischen Beschreibung finden wir 3 zusätzliche Terme im Hamiltonoperator: H_{v^4} , $H_{\text{Darwin}} \sim \nabla^2 \varphi$ und $H_{SO} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$. Nur der SO-Term ändert die Symmetrie des Problems und erfordert die Einführung von Doppelgruppen, vgl. die Aufspaltungen im Bänderschema in Abb. 3.6.

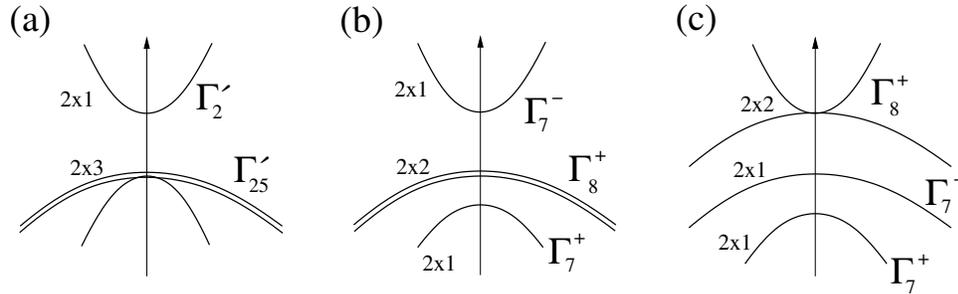


Abb. 3.6: Schematische Bandstruktur am Γ -Punkt für C, Si, Ge, Sn mit Darstellungen und Entartungen: (a) C, Si, Ge ohne $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Kopplung, (b) C, Si, Ge mit $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Kopplung, (c) Sn mit $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Kopplung.

Zinkblende-Struktur: GaAs

Die Zinkblende-Struktur sieht aus wie die des Diamantes, wobei in der Zinkblende die beiden Atome in der Einheitszelle verschieden sind. Prominentes Beispiel ist GaAs, der wichtigste III-V-Halbleiter mit der grössten technologischen Bedeutung (natürlich ist der Kolonne IV Halbleiter der technologisch wichtigste). Im GaAs sind die Gallium Atome auf \vec{d}_1 , die Arsen Atome auf den Plätzen auf \vec{d}_2 zu finden. Die Zinkblende hat eine symmorphie Raumgruppe und die zugehörige Punktgruppe T_d ist eine reduzierte kubische Symmetrie (vgl. Abb. 1.7). Die Charaktere der relevanten Darstellungen bei Γ , Λ , L , Δ und X sind in Tabelle 3.8 gegeben.

Die Bandstruktur von GaAs inklusive Spin-Bahn-Kopplung ist in Abb. 3.7 gezeigt. Beachte dabei, dass sich beim Übergang zur Doppelgruppe, $X_1 \rightarrow X_6$ und $X_3 \rightarrow X_7$, die Dimension der Darstellung verdoppelt da in der Doppelgruppe der Spinfreiheitsgrad explicit berücksichtigt ist. Im Vergleich zum Germanium (Ge) fällt das Splitting der Energien am X -Punkt auf, eine Folge der reduzierten Symmetrie beim Übergang Ge-Ge zu Ga-As mit verschiedenen Atomen in der Einheitszelle. GaAs hat ein *direktes Gap* am Γ -Punkt mit einer Bandlücke $E_{g,\text{GaAs}} = 1.42\text{eV}$. Gehen wir in der Gruppe weiter zu InSb, wird das Gap wieder kleiner, $E_{g,\text{InSb}} = 0.16\text{eV}$.

Weitere wichtige Halbleiter, welche diesem Schema folgen, sind die II-VI-Materialien. Sie haben Zinkblende oder Wurtzit-Struktur,⁷ zum Beispiel ZnSe (Zinkblende) oder ZnO (Wurtzit). Wurtzit ist reduziert hexagonal; von II-VI

⁷Ga(Zn)-Ebenen in GaAs (ZnO) folgen der Sequenz ABCABC (ABABAB).

zu III-V zu IV-IV nimmt die Ionogenizität ab und die Kovalenz zu. Die Gaps für diese Materialien sind gross und direkt, z.B. $E_g = 3.2\text{eV}$ in ZnO. Beachte dabei: je kleiner das direkte Gap, desto kleiner die effektive Masse m^* der Leitungselektronen am Γ -Punkt, desto grösser die Mobilität $\mu = e\tau/m^*$ (τ Streuzzeit) der Ladungsträger.⁸ Mehr dazu im Kapitel über Halbleiter.

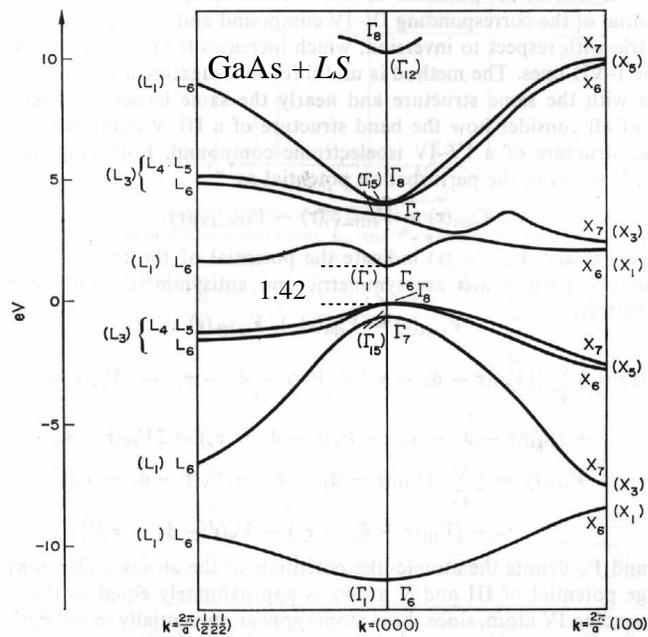


Abb. 3.7: Bandstruktur von GaAs inklusive Spin-Bahn-Kopplung (in Klammern die irreduziblen Darstellungen der einfachen Gruppe) (Abb. aus [Bas75]).

Γ -Punkt	E	$3C_4^2$	$6IC_4$	$6IC_2$	$8C_3$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	-1
Γ_{15}	3	-1	-1	1	0
Γ_{25}	3	-1	1	-1	0

Λ - oder L -Punkt	E	$I\delta_{2x\bar{y}}, \delta_{2x\bar{z}}, \delta_{2yz}$	$\delta_{3xyz}, \delta_{3xyz}^{-1}$
Λ_1, L_1	1	1	1
Λ_2, L_2	1	-1	1
Λ_3, L_3	2	0	-1

Δ -Punkt	E	δ_{2x}	$I\delta_{2yz}$	$I\delta_{2y\bar{z}}$
Δ_1	1	1	1	1
Δ_2	1	1	-1	-1
}	Δ_3	1	-1	-1
	Δ_4	1	-1	1

X -Punkt	E	δ_{2x}	δ_{2y}, δ_{2z}	$I\delta_{4x}^{-1}, I\delta_{4x}$	$I\delta_{2yz}, I\delta_{2y\bar{z}}$
X_1	1	1	1	1	1
X_2	1	1	1	-1	-1
X_3	1	1	-1	-1	1
X_4	1	1	-1	1	-1
X_5	2	-2	0	0	0

Tabelle 3.8: Charaktertafeln der kleinen Punktgruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}} = T_d$ an ausgewählten \vec{k} -Punkten. Die Darstellungen Δ_3 und Δ_4 sind via Zeitumkehrung entartet.

3.2 Vielteilchenaspekte

3.2.1 Born-Oppenheimer Approximation

Das zu lösende volle Vielteilchenproblem

$$H = T_e + T_K + V_{ee} + V_{eK} + V_{KK} \quad (3.14)$$

involviert die kinetischen Energien T_e und T_K der Elektronen und Kerne/Ionen sowie die Wechselwirkungsterme V_{ee} zwischen Elektronen, V_{KK} zwischen Kernen/Ionen, und V_{eK} zwischen Elektronen und Kernen/Ionen. Die Kerne/Ionen erzeugen im Festkörper das Gitterpotential für die Elektronen. Das Problem ist komplex und nur approximativ lösbar.

In der *Born-Oppenheimer-Approximation* hält man die Gittervektoren \vec{R}_i fest, d.h. $V_{KK}(\vec{R}_i)$ wird fixiert und $T_K = 0$. Ziel ist dann die Lösung des elektronischen Problems. Kennt man das Gitter so ergibt sich daraus durch Lösung des elektronischen Problems die Bandstruktur. Ist das Gitter unbekannt, so wählt man verschiedene Gittertypen und minimiert die totale Energie des Systems als Funktion des Gittertyps und der Gitterkonstanten. Auf diese Weise lässt sich der Grundzustand bestimmen und die Kristallstruktur aus Bandstrukturrechnungen ableiten. Durch die Änderung von Parametern wie äusserem Druck lassen sich ferner strukturelle Phasenübergänge vorher sagen und durch die Berechnung der Energie von deformierten Zuständen kann, unter Hinzunahme des kinetischen Terms T_K der Kerne, das Phononenspektrum gefunden werden.

Das in Born-Oppenheimer-Approximation zu lösende elektronische Problem

$$H\Psi = E\Psi, \quad H = T_e + V_{eK} + V_{ee} \quad (3.15)$$

für eine total antisymmetrische Wellenfunktion Ψ in einem periodischen Potential $V_{eK}(\vec{r})$ kennen wir aus der Quantenmechanik II. Eine geeignete Strategie zur approximativen Lösung dieses Vielteilchenproblems wird durch die Hartree-Fock Theorie gegeben.

3.2.2 Hartree und Hartree-Fock Approximation

Produktansätze für $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ wie Hartree, $\Psi_H = \prod_i \phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}_i)$, oder Hartree-Fock (HF), $\Psi_{HF} = \det[\phi_{\vec{k}_1}, \dots, \phi_{\vec{k}_N}]$, ergeben Eigenwertprobleme von bemerkenswerter Komplexität; die entsprechenden Differentialgleichungen ergeben sich aus der Variation des Funktionales $\mathcal{F}[\phi_{\vec{k}_1}, \dots, \phi_{\vec{k}_N}] =$

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \sum_i \varepsilon_i \langle \phi_{\vec{k}_i} | \phi_{\vec{k}_i} \rangle, \\
\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_{\text{eK}} + \sum_{j=1}^N e^2 \int d^3 r' \frac{|\phi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)_{\text{Hartree}} \phi_i(\vec{r}) \\
- \sum_{j=1}^N \left(\delta_{s_i s_j} e^2 \int d^3 r' \frac{\phi_j^*(\vec{r}') \phi_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)_{\text{Fock}} \phi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Hier sind wir mit zwei Problemen konfrontiert:

1. Die HF-Gleichungen sind sehr kompliziert, hauptsächlich wegen des nichtlokalen Austausch- oder Fockterms.
2. Wir haben durch unseren Produkt/Determinanten-Ansatz eine Approximation eingeführt und dabei die dynamischen Korrelationen zwischen den Elektronen vernachlässigt.

Um hinsichtlich der letzteren Frage die Qualität der HF Approximation abzuschätzen, untersuchen wir Na, für das die Freie-Elektronen-Approximation einen guten Startpunkt darstellt. Mit der Teilchendichte $n = 2.65 \cdot 10^{22}/\text{cm}^3$, ergibt sich $k_{\text{F}} = (3\pi^2 n)^{1/3} = 0.92 \text{ \AA}^{-1}$ und die Fermienergie $\varepsilon_{\text{F}} = 3.24 \text{ eV}$, ein guter Wert im Vergleich zum Resultat $\varepsilon_{\text{F}} \approx 3.2 \text{ eV}$ aus Photoemissionsexperimenten (vgl. Abb. 3.8) [Cit73].

Hartree-Approximation

Als nächstes bemerken wir, dass die Hartree Approximation mit dem Ionenpotential

$$V_{\text{eK}}(\vec{r}) = -e^2 \int d^3 r' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \tag{3.17}$$

einer homogen verteilten Ionenladung $n(\vec{r})n$ gerade das Resultat freier Elektronen reproduziert (*Jellium-Modell*), das heisst, die Hartree Gleichungen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \int d^3 r' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \left(n - \sum_j |\phi_j(\vec{r}')|^2 \right) \right] \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}). \tag{3.18}$$

werden durch die ebenen-Wellen Einteilchenzustände $\phi_{\vec{k}} = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}]/\sqrt{V}$ gelöst; deren Auffüllen bis zur Fermienergie $\varepsilon_{\text{F}} = \hbar^2 k_{\text{F}}^2/2m$ mit Elektronen (Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$) ergibt eine konstante Dichte $2 \sum_{|\vec{k}| < k_{\text{F}}} |\phi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 = n$ und das

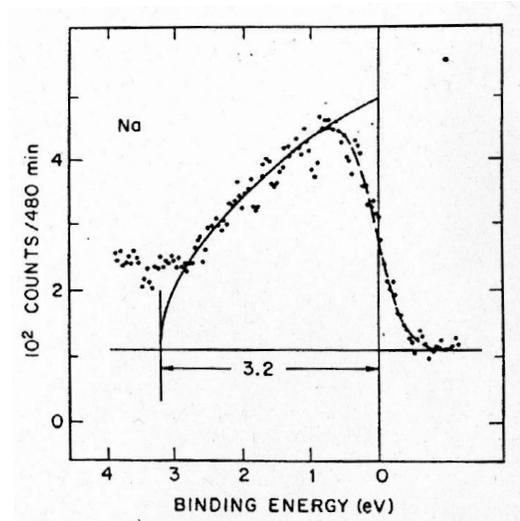


Abb. 3.8: Photoemissionsspektrum von Na aus dem sich die Bindungsenergie zu $\approx 3.2\text{eV}$ abschätzen lässt.

Hartree-Problem reduziert sich auf dasjenige von freien e^- . Auf der Stufe der Hartree-Approximation beschreiben wir Na (bis auf die totale Energie) bereits sehr gut.

Hartree-Fock-Approximation

Als nächstes verbessern wir unsere Approximation und gehen zu Hartree-Fock (HF) über. Innerhalb des Jellium-Modells sind die ebenen Wellen $\phi_{\vec{k}} = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}]/\sqrt{V}$ weiterhin Lösungen der HF-Gleichungen. Der Hartree-Term verschwindet (die Coulombwechselwirkungen der Elektronen mit sich selber, Ionen mit sich selber, und zwischen Elektronen und Ionen heben sich im Jellium Modell, d.h., konstante ausgeschmierte Ladungsdichten, gerade weg) und der Fock-Term ergibt

$$- \int d^3r' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \sum_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Sigma_x(k) \quad (3.19)$$

mit der Selbstenergie⁹

$$\Sigma_x(k) = -e^2 \sum_{\vec{k}'} \int d^3r' \frac{e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi e^2 \int_{k' < k_F} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} =$$

⁹Die Selbstenergie Σ_x entspricht physikalisch dem Austauschgraphen in Abb. 3.10 der Störungsreihe in e^2 .

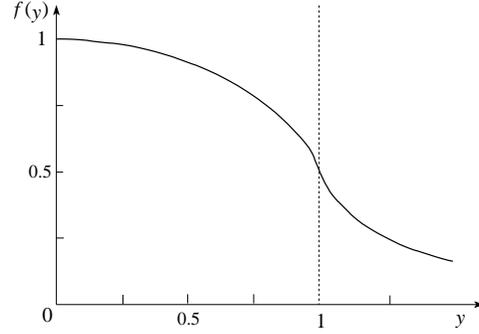


Abb. 3.9: Dimensionlose Selbstenergie $f(y)$ in Hartree-Fock Approximation, $\Sigma_x(k) = (-e^2 k_F / \pi) f(k/k_F)$, vgl. Gl. (3.21). Abbildung aus Referenz [Ash76].

$$= -\frac{e^2 k_F}{\pi} \int_0^1 dx \int_{-1}^1 dz \frac{x^2}{(k/k_F)^2 + x^2 - 2xz k/k_F} \quad (3.20)$$

$$= -\frac{e^2 k_F}{\pi} f(k/k_F),$$

$$f(y) = 1 + \frac{1-y^2}{2y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right|. \quad (3.21)$$

Die Funktion $f(y)$ ist in Abb. 3.9 skizziert und damit erhalten wir die Teilchenenergien in Hartree-Fock Approximation,

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Sigma_x(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{\pi} f(k/k_F). \quad (3.22)$$

Das Resultat für die Dispersion ist erschreckend (vgl. Abb. 3.10): für $r_s/a_B = 4$ erhöht sich die Bandbreite bis ε_F um mehr als das Doppelte gegenüber dem Hartree-Resultat!¹⁰ Damit haben wir ein grosses Problem; statt einer systematischen Verbesserung gegenüber der Hartree Approximation ergibt die Hartree-Fock Theorie eine Verschlechterung: Die Bandbreite wird zu gross und ausserdem zeigt die spezifische Wärme $c_V \sim T/|\ln T|$ wegen der logarithmischen Singularität in $\partial_y f$ einen unphysikalischen $\ln T$ -Faktor. Gehen wir in der Störungsreihe über die Hartree-Fock Approximation hinaus wird die Situation wieder besser – dynamische Korrelationen und Abschirmeffekte wie die Renormierung der Coulomb-Wechselwirkung, $v_{\vec{q}} \sim 1/q^2 \rightarrow 1/(q^2 + \lambda^2)$, reduzieren die Wichtigkeit des Austauschterms.¹¹

¹⁰ $a_B = \hbar^2/m_e e^2 = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{m}$ der Bohr-Radius, $r_s = [3/(4\pi n)]^{1/3}$ (Seitz-)Radius des (Kugel)-Volumens pro Leitungselektron. Für Metalle ist typischerweise $r_s/a_B \sim 2-6$.

¹¹ λ bezeichnet die Abschirmlänge, z.B., in Thomas-Fermi-Approximation, vgl. Abschnitt 3.2.3.

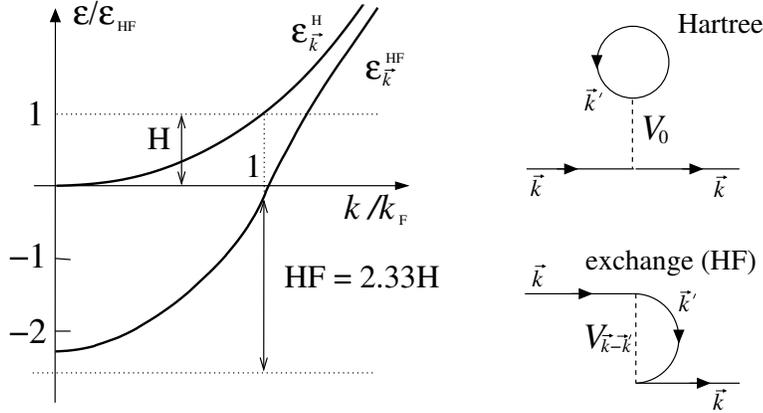


Abb. 3.10: Schematische Dispersionen $\varepsilon_{\vec{k}}^{\text{H}}$ und $\varepsilon_{\vec{k}}^{\text{HF}}$ in Hartree und Hartree-Fock Approximation (links). Die entsprechenden Feynman Diagramme aus der Störungstheorie, für die Hartree Energie (oben rechts) und für die Austausch Energie (unten rechts).

Lokale-Dichte-Approximation

Um verlässliche Bandstrukturrechnungen durchführen zu können brauchen wir eine andere Technik als (verbesserte) Störungstheorie. Offensichtlich produziert die \vec{k} -Abhängigkeit von $\Sigma_x(\vec{k})$ eine “Streckung” des Bandes; diese \vec{k} -Abhängigkeit ist eine Folge des nichtlokalen Potentials im Austauschterm. Das Ersetzen von $\Sigma_x(\vec{k})$ durch eine Konstante löst gleichzeitig zwei Probleme: Die Bandbreite wird zum Hartree-Wert renormiert und das Problem der Nichtlokalität der Austauschwechselwirkung verschwindet. Slater hat 1951 vorgeschlagen, die Austauschenergie $\Sigma_x(\vec{k})$ über alle \vec{k} -Werte zu mitteln und definiert damit ein Potential

$$V_x = \frac{\int_{k < k_F} d^3k \Sigma_x(\vec{k})}{4\pi k_F^3/3} = -\frac{3}{2}e^2 (3n/\pi)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.23)$$

Für das Jellium-Modell erhalten wir einen trivialen Shift; die Verallgemeinerung auf inhomogene Probleme mit ortsabhängigem $n(\vec{r})$ jedoch berücksichtigt die Austauscheffekte in nichttrivialer Weise. Später haben Kohn und Sham gezeigt, dass die korrekte Weise, Austauscheffekte in einer *lokalen Dichte-Approximation* zu berücksichtigen $\Sigma_x(k_F)$ und nicht den Mittelwert

$\overline{\Sigma_x(\vec{k})}$ involviert, so dass

$$V_x(\vec{r}) = -e^2 [3n(\vec{r})/\pi]^{1/3}. \quad (3.24)$$

3.2.3 Thomas-Fermi-Approximation

Die Ersetzung $n \rightarrow n(\vec{r})$ entspricht der wohlbekannten Thomas-Fermi-Idee: Betrachte ein inhomogenes Elektronenproblem im äusseren Potential $V(\vec{r})$. Aus der räumlichen Konstanz des chemischen Potentials (im Gleichgewicht) folgt

$$\mu = \varepsilon_F [n(\vec{r})] + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \quad (3.25)$$

mit

$$\varepsilon_F [n(\vec{r})] = \frac{\hbar^2 k_F^2 [n(\vec{r})]}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n(\vec{r})]^{2/3}, \quad (3.26)$$

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \int d^3r' \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (3.27)$$

womit wir eine Bestimmungsgleichung für die lokale Dichte $n(\vec{r})$ für gegebenes μ und $V(\vec{r})$ erhalten,

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\mu - V(\vec{r}) - \int d^3r' \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \right]^{3/2}. \quad (3.28)$$

Diese Gleichung folgt auch aus einem Variationsprinzip: Die totale Energie des Systems ist

$$\begin{aligned} E_{\text{TF}} [n(\vec{r})] &= \quad (3.29) \\ &= \int d^3r \left[V(\vec{r}) n(\vec{r}) + \frac{3(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{10m} n^{5/3}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r' \frac{e^2 n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \end{aligned}$$

und die TF-Gleichung 3.28 ergibt sich durch Variation von E_{TF} bezüglich $n(\vec{r})$ unter der Nebenbedingung $\int d^3r n(\vec{r}) = N$, die durch den Lagrangeparameter μ erzwungen wird.

Wir sehen, dass in TF-Approximation das Problem vollständig auf die Bestimmung einer Dichte $n(\vec{r})$ reduziert wurde. Die Idee von Slater kann nun trivial inkorporiert werden, indem wir zum effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}^{\text{TF}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + e^2 \int d^3r' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (3.30)$$

einen Term $-e^2 [3n(\vec{r})/\pi]^{1/3}$ bzw. in der Energie in Gl. (3.29) einen Term $\sim n^{4/3}$ hinzufügen,

$$V_{\text{eff}}^\times(\vec{r}) = V(\vec{r}) + e^2 \int d^3r' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^2 [3n(\vec{r})/\pi]^{1/3}. \quad (3.31)$$

Dieser TF-Zugang berücksichtigt offensichtlich Austauscheffekte in gemittelter Weise, behandelt aber die kinetische Energie nicht optimal, sondern nur via der mittleren Dichte. Indem wir zu Hartree zurückkehren, können wir den kinetischen Teil verbessern. Zu lösen ist dann das gekoppelte System von Eigenwertgleichungen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) + e^2 \int d^3r' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^2 [3n(\vec{r})/\pi]^{1/3} \right) \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (3.32)$$

mit der Dichte

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2, \quad (3.33)$$

wobei \sum_i über alle besetzten Zustände geht. Damit ist die Aufgabe auf folgendes gekoppeltes Eigenwertproblem reduziert:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{eff}}^\times[n(\vec{r}); \vec{r}] \right) \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}), \quad (3.34)$$

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2, \quad (3.35)$$

das heisst, das zu lösende Problem ist ein Einteilchenproblem im selbstkonsistenten periodischen Potential.¹²

3.2.4 Theorem von Hohenberg und Kohn

Die obigen Betrachtungen erscheinen dem kritischen Betrachter alles andere als rigoros. Tatsächlich steht die Gl. (3.34) auf durchaus gesundem Fundament, wie das **Theorem von Hohenberg und Kohn** zeigt.

Zuerst betonen Hohenberg und Kohn den fundamentalen Charakter der Dichte $n(\vec{r})$ des Grundzustandes unseres Vielteilchensystems:

¹²Der Ansatz von Slater $V_x = \overline{\Sigma_x(\vec{k})}$ war physikalisch sinnvoll, aber ad hoc. Der Wert $V_x = \Sigma_x(k_F)$ von Kohn-Sham folgt aus einem Variationsprinzip plus lokaler Dichte-Approximation. In der Folge wurden sog. X^α -Potentiale $V_{xc} = -(3/2)\alpha e^2 (3n/\pi)^{1/3}$ diskutiert, welche auch Korrelationseffekte mitnehmen. Allerdings zeigt es sich, dass für die meisten Metalle $\alpha = 2/3$ ist: Korrelationseffekte sind klein und auch nicht notwendigerweise durch einen Term $\sim n^{1/3}$ zu berücksichtigen.

1. Es gehöre die Dichte $n(\vec{r})$ zum Grundzustand $|\Psi\rangle$ unseres Vielteilchenproblems mit *externem* Potential $V(\vec{r})$. Ebenso gehöre $n'(\vec{r})$ zu $V'(\vec{r})$. Dann gilt: Falls $n'(\vec{r}) = n(\vec{r})$ ist $V'(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \text{const}$, d.h., die Dichte $n(\vec{r})$ legt $V(\vec{r})$ bis auf eine Konstante eindeutig fest.
2. Sei umgekehrt $V(\vec{r})$ gegeben. Dann minimiert die korrekte Dichte $n(\vec{r})$ die Grundzustands Energie des N -Teilchenproblems.

Damit folgt auch, dass für ein gegebenes Potential $V(\vec{r})$ ein Energiefunktional

$$E_V[n(\vec{r})] = \int d^3r n(\vec{r}) V(\vec{r}) + F[n(\vec{r})] \quad (3.36)$$

existiert, dessen Minimum gerade die korrekte Dichte $n(\vec{r})$ ist und das die korrekte Energie E_N liefert.¹³ Würden wir das Funktional kennen, so könnten wir $n(\vec{r})$ durch Minimierung leicht erhalten. Das Hauptproblem ist aber, F zu finden. Diese unlösbare Aufgabe behandeln wir, indem wir F aus bekannten Termen und einem unbekanntem (hoffentlich kleinen) Rest zusammensetzen. Wir setzen das Funktional

$$F[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + \frac{e^2}{2} \int d^3r d^3r' \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{\text{xc}}[n(\vec{r})] \quad (3.37)$$

an als Summe der kinetischen Energie (zu finden durch Lösung der Hartree-*typ* Differentialgleichungen für die Wellenfunktionen ϕ_i)

$$T[n(\vec{r})] = \sum_{i \text{ bes.}} \langle \phi_i | -\hbar^2 \Delta / 2m | \phi_i \rangle, \quad (3.38)$$

dem Hartree-Term aus Gl. 3.16 und einem unbekanntem Funktional $E_{\text{xc}}[n(\vec{r})]$, das zusätzliche Effekte von Austausch und Korrelation enthält. Dieser Zugang heisst *Dichte-Funktionaltheorie* [Hoh64, Koh65]. Um einen Ausdruck für $E_{\text{xc}}[n(\vec{r})]$ zu bekommen, nimmt man an, dass sich $n(\vec{r})$ auf der Skala λ_{TF} ($\lambda_{\text{TF}}^{-2} = 4\pi e^2 N(\varepsilon_{\text{F}})$, $N(\varepsilon_{\text{F}})$ die Zustandsdichte am Fermi Niveau) langsam ändert, so dass die *Lokale-Dichte-Approximation (LDA)* benutzt werden kann,

$$E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}[n(\vec{r})] = \int d^3r n(\vec{r}) \varepsilon_{\text{xc}}[n(\vec{r})]. \quad (3.39)$$

Dabei ist $\varepsilon_{\text{xc}}[n]$ die *Austausch-Korrelationsenergie pro Teilchen* für ein homogenes System (im Geiste von Thomas-Fermi). $\varepsilon_{\text{xc}}(n)$ wurde von Ceperley und Adler durch Monte-Carlo-Simulationen berechnet [Cep80].

¹³Beachte, dass eine Funktion von 3 Variablen eine Vielteilchen Wellenfunktion mit $3N$ Variablen festlegt.

Weitere Verbesserungen erhält man, indem zusätzlich Gradiententerme der Form $\int dr^3 h[n(\vec{r}); |\nabla n(\vec{r})|]$ berücksichtigt werden, sogenannte Becke-Perdew-Korrekturen [Bec92, Per92]. Damit können Chemiker ihre Moleküle mit grosser Genauigkeit beschreiben.

Das Theorem von Hohenberg und Kohn rechtfertigt die Suche nach einem optimalen Funktional welches Austausch- und Korrelationseffekte im Grundzustand des Elektronensystems korrekt berücksichtigt. Damit ist diese Aufgabe ‘im Prinzip’ lösbar. Probleme die sich heute stellen, sind stark Korrelierte Systeme in welchen die elektronischen Eigenschaften von den Wechselwirkungen dominiert werden, z.B., via Öffnung einer Mott Isolator Lücke; eine neue Methode die kürzlich entwickelt wurde um diese schwierigen Fälle zu behandeln ist die ‘Dynamical Mean Field Theory’ (DMFT) oder andere Techniken wie LDA+U.

In der Folge wenden wir uns dem zweiten Thema zu: Gegeben ein gutes effektives Potential für die Elektronen, wie wird das komplexe elektronische Problem effizient gelöst. Dazu leiten wir als Intermezzo erst ein Variationsprinzip für Blochfunktionen her.

3.3 Bandstrukturrechnungen

3.3.1 Elektronen im periodischen Potential

Fast freie Elektronen

Fast freie Elektronen bewegen sich in einem schwachen periodischen Gitter. Das Gitter bewirkt eine Veränderung der Dispersion, von freien Elektronen mit $\varepsilon_k \propto k^2$ zu einem Spektrum mit Bandlücken = verbotenen Zonen in der Energie wo die Teilchen nicht mehr propagieren können, siehe Abb. 3.11 für ein 1D-Beispiel. Dieses Resultat ist aus der Quantenmechanik I und/oder der Festkörperphysik I bekannt, siehe (Bloch-) Elektronen im Kristall. Die Lücken lassen sich im 1D Kronig-Penney Model exakt berechnen oder folgen via (fast) entarteter Störungstheorie im Potential $V_{\vec{k}}$ im Unterraum zu \vec{k} und $\vec{k} + \vec{K}_{\vec{m}}$ für ein geeignetes \vec{k} auf dem BZ-Rand¹⁴; die fast entartete

¹⁴Z.B., $\vec{k} \approx -\vec{K}_{\vec{m}}/2$ im Zentrum des BZ-Randes. Alternativ sind die Wellenfunktionen der sich schneidenden Bänder zu mischen.

Störungstheorie führt dann auf den effektiven Hamiltonoperator

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}} + V_0 & V_{\vec{K}_{\vec{m}}}^* \\ V_{\vec{K}_{\vec{m}}} & \varepsilon_{\vec{k} + \vec{K}_{\vec{m}}} + V_0 \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

im entsprechenden Unterraum, den es zu diagonalisieren gilt. Die Eröffnung einer Bandlücke modifiziert die freie Dispersion $\varepsilon_k \rightarrow \varepsilon_{\vec{k}}$ und damit auch die freie Zustandsdichte (in 3D) $\rho(\varepsilon) = [(2m/\hbar^2)^{3/2}/2\pi^2]\sqrt{\varepsilon}$.¹⁵ Zusätzlich zu den Bandlücken treten Hybridisierungen von Bändern gleicher Symmetrie auf, vgl. die Δ_1 Bänder in Abb. 3.5 für Ge oder die Δ_1 -Bänder entlang ΓX für Cu (fcc) in Abb. 3.11.

Fast gebundene Elektronen

Den Fall fast gebundener Elektronen haben wir in der Festkörperphysik I und/oder der Quantenmechanik II behandelt und wir repetieren die wichtigsten Resultate. Wird das Gitterpotential hochgefahren, so gehen die parabolischen Bänder mit der Dispersion $\varepsilon_k \approx \hbar^2 k^2/2m$ (fast) freier Elektronen zu $\cos(k_i a_i)$ -Bändern fast gebundener Elektronen über. Startpunkt für die fast gebundenen Elektronen ist ein Gittermodell mit fermionischen Operatoren $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$ welche Elektronen am Platz i mit spin σ erzeugen und vernichten. Ein (Tunnel-) Matrixelement t erlaubt diesen Elektronen zu den nächsten Nachbarn Positionen ($\langle i, j \rangle$) zu hüpfen und damit (delokalisierungs-) Energie zu gewinnen; für ein einfach kubisches Gitter ergibt sich der Hamiltonoperator,

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle \sigma} t c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}, \quad (3.41)$$

$$\varepsilon_{\vec{k}} = -2t \sum_i \cos k_i a_i + \text{const.} \quad (3.42)$$

Starke Gitterpotentiale, d.h., schwache Hüpfamplituden t , führen auf flache Bänder und breite Bandlücken. Durch Entwickeln von $\varepsilon_{\vec{k}}$ um die Extrema bis in $O(k^2)$, $t(\sum_{i=1}^d (k_i a_i)^2) = ta^2 k^2$, kann die Dispersion durch eine effektive Masse m_i^* ausgedrückt werden, $\hbar^2/2m_i^* a_i^2 = t$. Eine grosse (kleine) Bandbreite $4dt$ entspricht dabei einer kleinen (grossen) Masse m_i^* .

Die Zustandsdichte (dS bezeichnet das Flächenelement im Raum konstanter

¹⁵In $d = 1, 2$ Dimensionen skaliert die Zustandsdichte wie $\sim 1/\sqrt{E}$, ~ 1 .

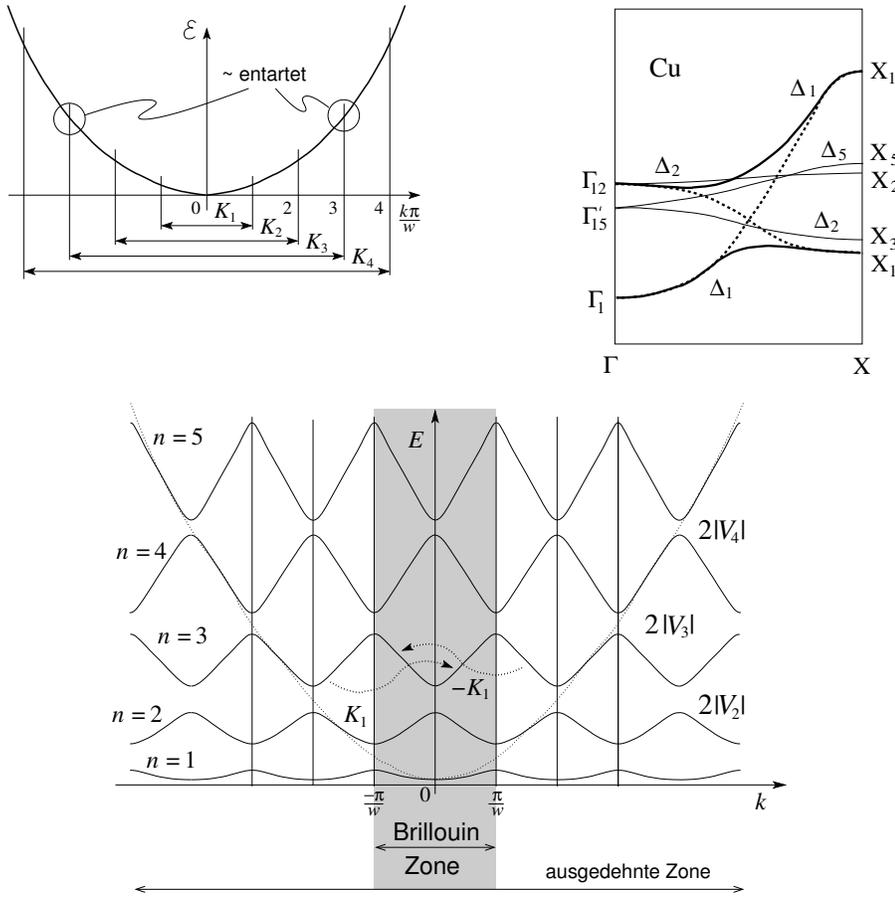


Abb. 3.11: Links oben: In der fast entarteten Störungstheorie werden die Zustände im Unterraum k und $k + K_n$ gemischt wenn $k \rightarrow -K_n/2$. Unten: Die durch die Fourierkomponenten V_n des periodischen Potentials $V(x) + V(x + w)$ induzierten Mischungen der Zustände eröffnen Bandlücken bei $\pm K_n/2$. Die Dispersion lässt sich in der ausgedehnten Zone darstellen mit beliebig grossen k -Werten; der Symmetrie angepasst ist die Darstellung in der reduzierten Brillouin Zone mit $k \in [-\pi/w, \pi/w]$ dem Kristallimpuls (gegeben durch den k -Wert der irreduziblen Darstellung der Translationsgruppe). Das Zurückfalten der Bänder in die erste BZ bedingt die Nummerierung n der Bänder gemäss den assoziierten Shifts K_n ; äquivalent gibt der Bandindex n die Form $u_n(x) \sim \exp[2\pi i(n - 1)x/w]$ des periodischen Anteils der Blochfunktion an. Rechts oben: Bandstruktur von Kupfer entlang der Γ - X Linie. Die beiden Δ_1 Bänder Hybridisieren unter der Wirkung des periodischen Gitterpotentials (Abb. aus Bondi).

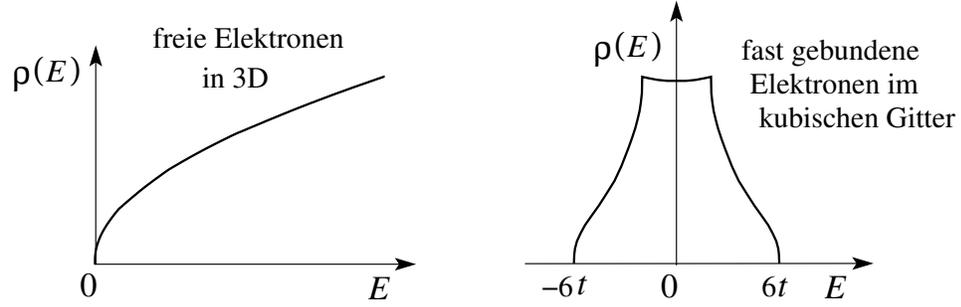


Abb. 3.12: Schematische Zustandsdichten in 3 Dimensionen von (links) fast freien ($\sim \sqrt{\varepsilon}$) und (rechts) von fast gebundenen Elektronen im kubischen Gitter mit cos-Bändern und Van-Hove-Singularitäten.

Energie)

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\varepsilon_{\vec{k}=\varepsilon}} \frac{dS_{\vec{k}}}{|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}|} \quad (3.43)$$

von fast freien und fast gebundenen Elektronen in 3 Dimensionen ist in Abb. 3.12 gezeigt. Für fast gebundene Elektronen beachte man die sog. van-Hove-Singularitäten in $\rho(\varepsilon)$ an den Extrema der cos-Bänder wo $\nabla_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} = 0$.

Exkurs: Variationsprinzip für Blochfunktionen

Als Hilfsmittel formulieren wir das Blochproblem als Variationsproblem. Es sei $\mathcal{H}_{\vec{k}}$ der Raum der differenzierbaren¹⁶ (Bloch)-Funktionen $\Psi_{\vec{k}}$ zum Wellenvektor \vec{k} und

$$F[\Phi, \chi] = \int d^3r \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Phi^* \cdot \nabla \chi + V(\vec{r}) \Phi^* \chi \right) \quad (3.44)$$

eine Bilinearform über $\mathcal{H}_{\vec{k}}$. Das Skalarprodukt sei bezeichnet als

$$(\Phi, \chi) = \int d^3r \Phi^* \chi. \quad (3.45)$$

Die Lösungen $\Psi_{\vec{k}}$ zum Schrödingerproblem mit $V(\vec{r})$ periodisch

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_{\vec{k}} + V(\vec{r}) \Psi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} \Psi_{\vec{k}} \quad (3.46)$$

¹⁶nicht notwendigerweise stetig differenzierbaren

minimieren das Energiefunktional

$$E[\Psi] = \frac{F[\Psi, \Psi]}{(\Psi, \Psi)}. \quad (3.47)$$

Beweis: **(i)** Falls $\Psi_{\vec{k}}$ eine Lösung von Gl. (3.46) zur Energie $\varepsilon_{\vec{k}}$ ist, dann gilt für $\Phi \in \mathcal{H}_{\vec{k}}$,

$$F[\Phi, \Psi_{\vec{k}}] = \varepsilon_{\vec{k}} (\Phi, \Psi_{\vec{k}}), \quad (3.48)$$

$$F[\Psi_{\vec{k}}, \Phi] = \varepsilon_{\vec{k}} (\Psi_{\vec{k}}, \Phi). \quad (3.49)$$

Beweis durch partielle Integration und Ausnutzung der Blochbedingung (Bloch-Periodizität).

(ii) Falls nun $\Psi = \Psi_{\vec{k}} + \delta\Psi \in \mathcal{H}_{\vec{k}}$, dann ist $\delta\Psi \in \mathcal{H}_{\vec{k}}$ und

$$F[\Psi, \Psi] = \varepsilon_{\vec{k}} [(\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}}) + (\Psi_{\vec{k}}, \delta\Psi) + (\delta\Psi, \Psi_{\vec{k}}) + O(\delta\Psi^2)], \quad (3.50)$$

$$(\Psi, \Psi) = (\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}}) + (\Psi_{\vec{k}}, \delta\Psi_{\vec{k}}) + (\delta\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}}) + O(\delta\Psi^2). \quad (3.51)$$

Demnach wird das Energiefunktional $E[\Psi]$ gerade durch $\Psi_{\vec{k}}$ minimiert, denn

$$E[\Psi] = \varepsilon_{\vec{k}} + O(\delta\Psi^2). \quad (3.52)$$

3.3.2 Überblick über Methoden zur Berechnung der Bandstruktur

In den folgenden Abschnitten besprechen wir einige klassische Methoden zur Berechnung von Bandstrukturen und wir beginnen mit einem kurzen Überblick. Das zu lösende Problem wird durch Gl. (3.34) gegeben (V kurz für V_{eff}^{\times}),

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (3.53)$$

wobei die Einteilchen-Wellenfunktion $\Psi_{\vec{k}}$ die Blochbedingung erfüllt,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{n}}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.54)$$

Das Potential $V(\vec{r})$ zeigt die Gittersymmetrie, $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{n}})$, und enthält im allgemeinen Vielteilcheneffekte in LDA-Approximation, d.h., die Lösung $\Psi_{\vec{k}}$ wird in einer Selbstkonsistenz-Schleife zur Berechnung von $V(\vec{r})$ herangezogen.

Die Lösung von Gl. (3.53) involviert zwei Aspekte: Gl. (3.54) zeigt, dass die Wellenfunktionen über den ganzen Kristall ausgedehnt sind (Aspekt freier Elektronen); Gl. (3.53) enthält das (im allgemeinen) attraktive Potential der Kerne bzw. Ionen (Aspekt gebundener Atomorbitale). Bandstrukturrechnungen versuchen diese beiden (gegensätzlichen) Aspekte möglichst effizient unter einen Hut zu bringen und es gibt die beiden folgenden grundlegenden Strategien.

Kristallmethoden

Die prinzipielle Vorgehensweise ist:

1. Starte von der Bloch-Periodizität in Gl. (3.54) und entwickle $\Psi_{\vec{k}}$ in ein vollständiges System von Blochfunktionen $\psi_{n\vec{k}}$,

$$\Psi_{\vec{k}} = \sum_n c_n \psi_{n\vec{k}}. \quad (3.55)$$

2. Berechne die Koeffizienten c_n so, dass die Schrödingergleichung (3.53) erfüllt wird.

Beispiele von Techniken die dieser Strategie folgen sind

- *(N)FE*: (Nearly) Free Electrons (Abschnitt 3.3.3),
- *TBA*: Tight Binding Approximation (Abschnitt 3.3.3)
- *OPW*: Orthogonalized Plane Wave Approximation (Abschnitt 3.3.3)
- *PSP*: Pseudo-Potential Approximation (Abschnitt 3.3.3)

Zelluläre Methoden

Vorgehensweise:

1. Löse das Schrödingerproblem in einer Zelle, entweder der Wigner-Seitz-Zelle oder in einer Kugel mit Radius r_0 innerhalb der Wigner-Seitz-Zelle. Im letzteren Fall wird das Potential üblicherweise durch das *Muffin-Tin-Potential*¹⁷

$$V^{\text{MT}}(\vec{r}) = \begin{cases} V(\vec{r}), & r < r_0, \\ 0, & r > r_0, \end{cases} \quad (3.56)$$

¹⁷”Kuchen-Büchse”, vgl. Abb. 3.18.

genähert.

2. Superponiere die Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit fester Energie zu Blochfunktionen so dass die korrekten Randbedingungen am Zellenrand erfüllt sind.

Beispiele von Techniken die diese Strategie benutzen sind

- *WSCM*: Wigner-Seitz Cellular Method (Abschnitt 3.3.4),
- *APW*: Augmented Plane Waves (Abschnitt 3.3.4),
- *KKR*: Korringa-Kohn-Rostocker Green's function method (3.3.4).

3.3.3 Kristallmethoden zur Bandstrukturrechnung

Nearly Free Electrons (NFE) vs. Tight Binding Approximation (TBA)

Wir starten von diametralen Ansätzen für die Bloch-artigen Wellenfunktionen, und zwar ebene Wellen in der *Nearly Free Electron*-Methode oder eine Überlagerung von lokalisierten Zuständen (Orbitalen) ψ_n bei der *Tight Binding Approximation*,¹⁸

$$\phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{K}_n\cdot\vec{r}}, \quad (3.57)$$

$$\phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} = \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad (3.58)$$

(wir nummerieren die Gittervektoren \vec{K}_n und Gitterpunkte \vec{R}_n fortlaufend). Beide Ansätze genügen der Blochbedingung (wir nutzen, dass $\vec{K}_n \cdot \vec{R}_i = 0$, resp., $\vec{R}_m \rightarrow \vec{R}_m + \vec{R}_i = \vec{R}'_m$),

$$\phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE/TBA}}(\vec{r} + \vec{R}_i) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE/TBA}}(\vec{r}). \quad (3.59)$$

Aus diesen Wellenfunktionen werden die allgemeinen Lösungen

$$\Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE/TBA}} = \sum_n c_n \phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE/TBA}} \quad (3.60)$$

der Schrödingergleichung, $H\Psi_{\vec{k}} = E\Psi_{\vec{k}}$, kombiniert. Durch Projektion auf $\phi_{m\vec{k}}^{\text{NFE}}$ bzw. ψ_m ergeben sich daraus die Gleichungen für die Koeffizienten c_n .

¹⁸Die Indizes NFE und TBA lassen wir später, soweit möglich, wieder weg.

NFE

In NFE erhalten wir

$$0 = \left[\frac{\hbar^2(\vec{k} - \vec{K}_m)^2}{2m} - \varepsilon_{\vec{k}} \right] c_m + \sum_n V(\vec{K}_n - \vec{K}_m) c_n, \quad (3.61)$$

$$V(\vec{k}) = \int_{V_{uc}} \frac{d^3r}{V_{uc}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}). \quad (3.62)$$

Wir sehen, dass sich für $V = 0$ wieder die Dispersion $\varepsilon_{\vec{k}_m} = (\hbar^2/2m)(\vec{k} - \vec{K}_m)^2$ freier Elektronen ergibt. Für kleines $V \neq 0$ ergibt sich für isolierte Bänder in nichtentarteter Störungstheorie ein (kleiner) Shift, an Kreuzungsstellen hingegen hybridisieren die Bänder in entarteter Störungstheorie; es entstehen Energiegaps und schneidende Bänder gleicher Symmetrie meiden sich, vgl. Abb. 3.11.

TBA

In TBA findet man das Gleichungssystem

$$0 = (E_m - \varepsilon_{\vec{k}}) c_m + \sum_n U_{mn} c_n, \quad (3.63)$$

$$U_{mn} = \sum_{\vec{R}_i \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \left[(E_m - \varepsilon_{\vec{k}}) S_{mn}(\vec{R}_i) + \delta V_{mn}(\vec{R}_i) \right] + \delta V_{mn}(0),$$

$$S_{mn}(\vec{R}) = \int d^3r \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r} - \vec{R}), \quad (3.64)$$

$$\delta V_{mn}(\vec{R}) = \int d^3r \psi_m^*(\vec{r}) [V(\vec{r}) - V_{\text{atom}}(\vec{r})] \psi_n(\vec{r} - \vec{R}). \quad (3.65)$$

Zur Analyse dieser Gleichungen erstellen wir vorab eine grobe Abschätzung der Terme: Für lokalisierte Atomorbitale $\psi_m(\vec{r})$ ist sowohl der Überlapp $S_{mn}(\vec{R}) \sim 0$ als auch $\delta V_{mn}(\vec{R} \neq 0) \sim 0$; falls $V \sim V_{\text{atom}}$ im Bereich wo $\psi_m^* \psi_n \neq 0$ so ist auch $\delta V_{mn}(0)$ vernachlässigbar. Sind die Atomorbitale $\psi_m(\vec{r})$ auf die ganze Einheitszelle ausgedehnt, ist U_{mn} endlich, aber immer noch relativ klein. Aus Gl. (3.63) folgt dann $(E_m - \varepsilon_{\vec{k}}) c_m \sim 0$, also ist entweder $\varepsilon_{\vec{k}} \approx E_m$ oder $c_m \approx 0$.

Damit finden wir, dass für ein j -fach entartetes Orbital mit Energie E_m die j Koeffizienten $c_{m,0}, \dots, c_{m,j}$ zu berücksichtigen sind und das entsprechende $j \times j$ -Matrixproblem zu lösen ist. Sind zum Beispiel die $2l + 1$ Atomorbitale s, p, d, \dots mit Drehimpuls $l = 0, 1, 2, \dots$ entartet, so entstehen

$2l + 1 = 1, 3, 5, \dots$ hybridisierte s, p, d, \dots -Bänder. Für Übergangsmetalle können auch die s und d -Orbitale benachbarter Schalen fast entartet sein, $E_{n,2} \sim E_{n+1,0}$, so dass 6 hybridisierte sd -Bänder entstehen.

Schliesslich betrachten wir das verfeinerte Resultat für ein s -Band in TBA

$$\varepsilon_{\vec{k}} = E_0 + \frac{\delta V_{00} + \sum_{\vec{R}_i} \delta V_{00}(\vec{R}_i) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i}}{1 + \sum_{\vec{R}_i} S_{00}(\vec{R}_i) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i}}, \quad (3.66)$$

wobei E_0 und $S_{00}(\vec{R}_i)$ die Energie und den Überlap der um \vec{R}_i verschobenen Eigenfunktion des atomaren s -Orbitals bezeichnen. Für ein symmetrisches Potential und $S_{00} \ll 1$, $\delta V_{00}(R > R_{\text{nn}}) \sim 0$ (mit \vec{R}_{nn} der Abstand zwischen nächsten Nachbarn) erhält man wieder die \cos -Bänder

$$\varepsilon_{\vec{k}} = E_0 + \delta V_{00} + \delta V_{00} \sum_{\vec{R}_{\text{nn}}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}_{\text{nn}}). \quad (3.67)$$

Für ein sc, bcc, fcc kubisches Gitter sind 6, 8, und 12 nächste Nachbarn zu berücksichtigen und ergeben damit verschiedene Formen für die s -Bänder.

Es folgt, dass die NFE-Approximation gut ist für schwache Gitterpotentiale V , wohingegen die TBA gute Resultate liefert, wenn die ursprünglichen atomaren Orbitale gut lokalisiert sind – in beiden Fällen brauchen wir nur wenige Koeffizienten c_n um die Bloch Zustände aufzubauen. Deshalb ist die TBA gut zur Berechnung der (energetisch tiefen) Kern-Bänder der Gitterionen geeignet. Bei den höheren Energien der Valenz- und Leitungsbänder können wir atomare Streuzustände nicht vernachlässigen, d.h., wir brauchen einen vollständigen Satz von ψ_n in Gl. 3.58, und die TBA wird aufwendig wegen der vielen c_n und dem kontinuierlichen Spektrum. Man könnte dann versucht sein zu argumentieren, dass für die hochenergetischen Valenz- und Leitungselektronen das Potential $V(\vec{r})$ klein ist und die NFE-Approximation gute Resultate geben sollte. Dieses simple Argument ist falsch, obwohl ein Aspekt dieses Arguments in der PSP (Pseudo Potential) -Approximation aus folgendem Grund überlebt:

Wir betrachten das nackte Kerngitter $V_{\text{K}} = -\sum_{\vec{R}_i} Z e^2 / |\vec{r} - \vec{R}_i|$. Die niedrigsten Zustände füllen wir mit Tight-Binding-Bändern; die korrespondierenden Wellenfunktionen sind auf eine enge Umgebung um die Kerne herum lokalisiert, vgl. Abb. 3.13. Um die Kerne herum zeigen die Wellenfunktionen starke Oszillationen, wenn die potentielle Energie in kinetische umgewandelt wird. Zweitens ist zu beachten, dass die Wellenfunktionen zu höherer Energie orthogonal auf denjenigen niedrigerer Energie stehen und damit

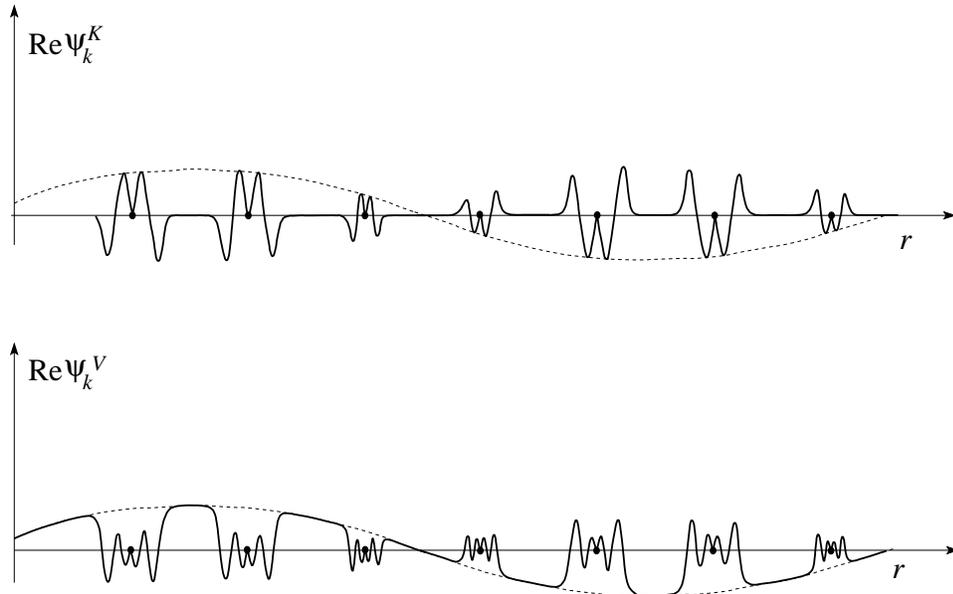


Abb. 3.13: Schematische Wellenfunktionen: (oben) Kern-Elektronen $\text{Re } \Psi_k^K$, die bei den atomaren Orbitalen lokalisiert sind und auf der Skala $2\pi/k$ moduliert werden, (unten) Valenzelektronen $\text{Re } \Psi_k^V$, die zwischen den Atomen eine ebene Welle sind, aber an den Atomen Oszillationen zeigen [Ash76].

mehr Knoten im Bereich der Kerne zeigen. Diese Eigenschaft bleibt erhalten, wenn wir zu den Valenzelektronen übergehen. Die Valenzelektronen sind ihrer schwachen Bindung wegen auf den ganzen Bereich zwischen den Kernen ausgedehnt und zeigen aber trotz der schwachen Bindung im Kernbereich starke Oszillationen, vgl. Abb. 3.13. Genau diese Oszillationen verlieren wir in der NFA und machen damit eine unkontrollierte Approximation.

Warum sehen viele Bandstrukturen dennoch wie diejenige freier Elektronen in einer bestimmten Kristallsymmetrie aus? Der Grund liegt darin, dass wir eine zweite ungerechtfertigte Approximation benutzen, und zwar die eines schwachen Potentials V . Das Potential V ist aber nicht schwach,

$$V(\vec{K}_i) \sim \frac{4\pi Z e^2}{V_{\text{uc}} k^2} \sim \underbrace{\frac{e^2}{2a_B}}_{13.6\text{eV}} \underbrace{\frac{a_B^3}{V_{\text{uc}}}}_{\approx 10^{-3}} \underbrace{\frac{1}{(a_B k)^2}}_{\approx 1} \underbrace{8\pi Z}_{\approx 10^2-10^3} \sim \text{eV}, \quad (3.68)$$

$$E_{\text{kin}} \sim \varepsilon_{\text{F}} = \frac{\hbar^2 k_{\text{F}}^2}{2m} \sim \text{eV}. \quad (3.69)$$

Damit ist $E_{\text{pot}} \sim E_{\text{kin}}$ und die Elektronen sind nicht fast-frei. Diese beiden falschen Annahmen fast-freier Elektronen und schwachen Potentials kompensieren sich gerade – wie, das sehen wir, wenn wir die OPW-Methode analysieren.

Orthogonalized Plane Waves (OPW)

Als Bloch-artige Welle wie in Gl. (3.55) setzen wir eine freie ebene Welle an, die auf die TB-Wellenfunktionen des Kerns orthogonal ist,

$$\phi_{n\vec{k}}^{\text{OPW}} = \underbrace{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{K}_n\cdot\vec{r}}}_{\phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE}}} - \sum_{\text{TBA}} \left\langle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} \left| \phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE}} \right. \right\rangle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}}, \quad (3.70)$$

wobei die Summe \sum_{TBA} über alle besetzten Kern-Zustände geht und

$$\phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} = \sum_{\vec{R}_{\vec{m}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{m}}} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{m}}). \quad (3.71)$$

Die OPW-Methode vereinigt damit Aspekte von NFE und TBA. Die Koeffizienten c_n in

$$\Psi_{\vec{k}}^{\text{OPW}} = \sum_n c_n \phi_{n\vec{k}}^{\text{OPW}}, \quad (3.72)$$

vgl. Gl. (3.55), finden wir dann, indem wir das Energiefunktional $E[\Psi_{\vec{k}}]$ nach den Koeffizienten c_n minimieren. Beachte dabei, dass die Minimierung unter der Nebenbedingung der Erhaltung der Norm erfolgt,

$$\min_{c_n} E = \min_{c_n} [F[\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}}] - \lambda (\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}})]. \quad (3.73)$$

Wir erhalten wieder ein Eigenwertproblem ($\lambda \rightarrow \varepsilon_{\vec{k}}$),

$$\det \left\langle \phi_{n\vec{k}}^{\text{OPW}} \left| -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) - \varepsilon_{\vec{k}} \right| \phi_{n'\vec{k}}^{\text{OPW}} \right\rangle = 0, \quad (3.74)$$

für die Banddispersion $\varepsilon_{\vec{k}}$ der Valenz- und Leitungselektronen; die Koeffizienten (Eigenvektoren) c_n bestimmen die Blochfunktionen $\Psi_{\vec{k}}$.

Im OPW-Schema behandeln wir demzufolge die

- Kern-Elektronen in TBA,
- Valenz- und Leitungs-Elektronen in OPW.

Je mehr Valenz- und Leitungsbänder wir brauchen und je genauer wir sie berechnen wollen, desto mehr OPW müssen wir verwenden (typisch 10 – 100). In den Symmetriepunkten der Brillouinzone können wir durch geschickte Linearkombination die Matrix in Gl. (3.74) in Blockform bringen, d.h., unter Verwendung der irreduziblen Darstellungen ausreduzieren.

Betrachten wir als nächstes das Eigenwert-Problem in Gl. (3.74) etwas genauer. Mit $H\Psi_{\vec{k}}^{\text{OPW}} = \varepsilon_{\vec{k}}\Psi_{\vec{k}}^{\text{OPW}}$ und dem OPW-Ansatz Gl. (3.70)

$$\begin{aligned}\Psi_{\vec{k}}^{\text{OPW}} &= \sum_n c_n \phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE}} - \sum_n c_n \sum_{\text{TBA}} \langle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} | \phi_{n\vec{k}}^{\text{NFE}} \rangle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} \\ &= \Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} - \sum_{\text{TBA}} \langle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} | \Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} \rangle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}}\end{aligned}\quad (3.75)$$

erhalten wir die Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V^{\text{Pseudo}} \right) \Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} = \varepsilon_{\vec{k}} \Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} \quad (3.76)$$

mit einem speziellen nichtlokalen Pseudopotential V^{Pseudo} ; dies führt uns direkt auf die Methode der Pseudopotentiale die wir im nächsten Abschnitt diskutieren.

Pseudopotentiale

Das *Pseudopotential*

$$V^{\text{Pseudo}}\Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} = V(\vec{r})\Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} + \sum_n (\varepsilon_{\vec{k}} - E_n^{\text{TBA}}) \langle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} | \Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} \rangle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} \quad (3.77)$$

ist abhängig vom gesuchten Eigenwert $\varepsilon_{\vec{k}}$ und wegen des Skalarproduktes im zweiten Term zudem nichtlokal; somit ist V^{Pseudo} ein schwierig zu behandelndes Potential. Andererseits können wir leicht einsehen, dass die Relation $\varepsilon_{\vec{k}} > E_n^{\text{TBA}}$ einen positiven Korrekturterm $\sum_n (\varepsilon_{\vec{k}} - E_n^{\text{TBA}}) \langle \phi_{n\vec{k}}^{\text{TBA}} | \Psi_{\vec{k}}^{\text{NFE}} \rangle > 0$ erzeugt der das negative (attraktive) Kernpotential $V < 0$ zumindest teilweise kompensiert und damit das effektive Potential V^{Pseudo} reduziert. Das Pseudopotential fungiert damit gerade als schwaches Gitterpotential der NFA – das ist der Grund, warum die NFA oft so gut funktioniert.

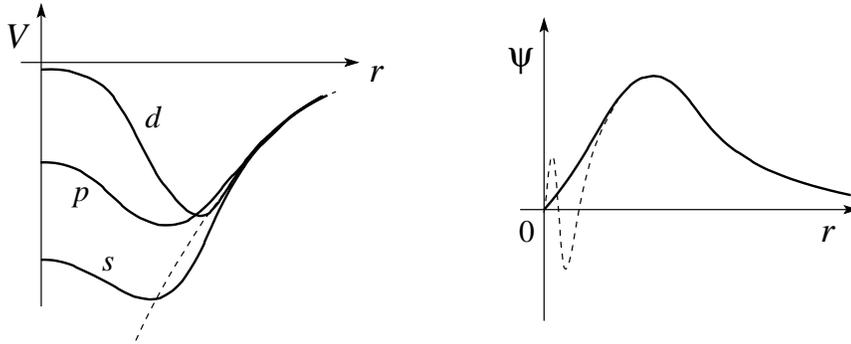


Abb. 3.14: Links: Skizze der Pseudopotentiale für $l = 0, 1, 2$ in Si (Coulombpotential gestrichelt); Rechts: Si-3s-Wellenfunktion für das Pseudopotential V^{pseudo} (durchgezogene Linie, keine Knoten) und für das atomare Potential V (gestrichelte Linie, 2 Knoten).

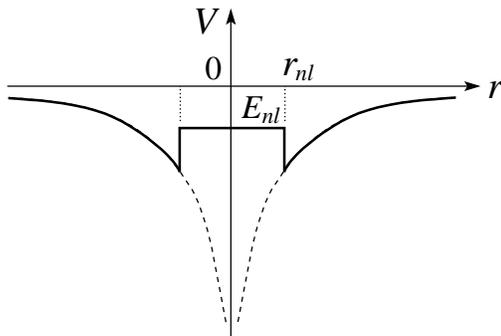


Abb. 3.15: Semi-Empirische Pseudopotentiale: (a) nicht abgeschirmtes ionogenes Potential, (b) nicht abgeschirmtes Pseudopotential, (c) abgeschirmtes Pseudopotential.

Hat man die Funktionsweise des Pseudopotentials erkannt, so ändert man die Philosophie: Suche gute Pseudopotentiale, welche im “Aussenraum” (d.h., weit weg von den Atomen) gerade die korrekte Valenz-Wellenfunktion erzeugen und im “Innenraum” (in der Nähe der Kerne) die stark oszillierende Valenz-Wellenfunktion durch eine weiche NFE-Wellenfunktion ersetzen. Für eine Skizze von typischen Pseudopotentialen siehe Abb. 3.14.

Nichtlokale *ab-initio*-Pseudopotentiale werden einmalig berechnet und ergeben zusammen mit einem DFT-LDA-Zugang gute Resultate für Bandstrukturen. Beachte, dass Pseudopotentiale transferierbar sind; einmal berechnet für fixes Z , n , l können sie in verschiedenen Umgebungen benutzt werden. In einem anderen Zugang wird das Pseudopotential parametrisch angesetzt und die erhaltene Bandstruktur wird an experimentelle Daten gefittet, z.B.

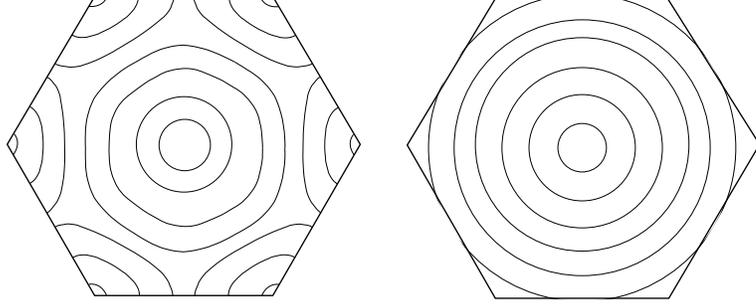


Abb. 3.16: Das tatsächliche Gitterpotential (links, mit gittersymmetrischen Äquipotentiallinien) wird durch ein zentralsymmetrisches Potential in der Einheitszelle (rechts, sphärisch symmetrische Äquipotentiallinien) (Abb. aus [Ash76]).

an optische Übergänge (*semi-empirische Pseudopotentiale*), vgl. Abb. 3.15.

3.3.4 Zelluläre Methoden zur Bandstrukturberechnung

Wir betrachten (wie zuvor) den einfachsten Fall mit einem Atom pro Einheitszelle und nehmen für letztere gerade die Wigner-Seitz-Zelle mit der vollen Symmetrie des Gitters. Mit

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{m}}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.78)$$

genügt es, das Schrödingerproblem in einer Zelle zu lösen. Um eine Lösung für das Kristallproblem zu erhalten, müssen wir noch die Randbedingungen am Zellenrand erfüllen. Sie lauten gerade

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{m}}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}), \quad (3.79)$$

$$\vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \Psi_{\vec{k}} = -e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{m}}} \vec{n}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}) \cdot \vec{\nabla} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}), \quad (3.80)$$

wobei beide Positionen \vec{r} und $\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}$ auf dem Zellenrand liegen und \vec{n} die Aussennormale auf dem Rand der Brillouinzone ist.

Als grundlegende Approximation wird jetzt $V(\vec{r})$ als zentral-symmetrisch angenommen, vgl. Abb. 3.16, und es bleibt folgendes Problem zu lösen:

$$\Psi_{\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(\vec{k}) Y_{lm}(\phi, \theta) R_l(\varepsilon_{\vec{k}}, r), \quad (3.81)$$

$$0 = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R_l) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_{\vec{k}} - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l, \quad (3.82)$$

$$\left. \begin{array}{l} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ -\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{array} \right\} = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{m}}} \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}) \\ \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_{\vec{m}}) \end{array} \right\}. \quad (3.83)$$

Die Randbedingungen legen dann die Koeffizienten c_{lm} sowie die Energie $\varepsilon_{\vec{k}}$ fest: Dazu beschränken wir die Anzahl der Koeffizienten c_{lm} in Gl. (3.81) auf M und die Anzahl Punkte, auf denen wir die Randbedingungen von Gl. (3.83) implementieren, demzufolge ebenfalls auf M . Wir wählen eine Energie E und fixieren $\varepsilon_{\vec{k}} = E$, bestimmen die (im Ursprung regulären) Lösungen $R_l(E, r)$ von (3.82) und erhalten aus den Randbedingungen (3.83) ein lineares Gleichungssystem \mathcal{S} für die Koeffizienten c_{lm} . Die Variation von \vec{k} , so dass die Determinante von \mathcal{S} verschwindet, $\det \mathcal{S} = 0$, bestimmt das zu E gehörige \vec{k} und wir erhalten das gesuchte Resultat $\varepsilon_{\vec{k}} = E$. Die anschließende Variation von E ergibt sich die vollständige Dispersionsrelation $\varepsilon_{\vec{k}}$.

Die mühsame Eigenschaft dieser zellulären Methode ist die Implementierung der Randbedingungen. 1937 hat Slater die APW-Methode zur Vereinfachung dieses Problems vorgeschlagen, vgl. den übernächsten Abschnitt, 3.3.4. Zuvor diskutieren wir die Berechnung der Kohäsionsenergie eines einfachen Metalles mit der Wigner-Seitz Methode.

Wigner und Seitz

Wigner und Seitz haben mit der folgenden Methode bereits 1933 metallisches Na (bcc, 3s Valenzelektronen) untersucht und die Kohäsions-Energie durch Bestimmung des unteren Bandrandes $\varepsilon_{\vec{k}=0}$ berechnet. Die Symmetrie am Γ -Punkt ist Γ_1 (3s-Welle) und demnach brauchen wir Zustände mit $l = 0, 4, 6$ in Gl. (3.82), da laut Tabelle 2.8 die irreduzible Darstellung Γ_1 von O_h mit den Darstellungen \mathcal{D}^{0+} , \mathcal{D}^{4+} und \mathcal{D}^{6+} kompatibel ist. $l = 4, 6$ haben eine hohe Energie und wir beschränken uns deshalb auf $l = 0$. Wir lösen also das Eigenwertproblem

$$\left[\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] \phi_0(r) = 0 \quad (3.84)$$

mit den Randbedingungen $\phi_0(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ (für ein freies Atom), $\partial_r \phi_0|_{r=r_0} = 0$ (für ein Atom im Gitter mit $\vec{k} = 0$ am unteren Bandrand) oder $\phi_0|_{r=r_0} = 0$ (mit $\vec{k} \in \text{Rand der BZ}$ am oberen Bandrand). Dabei haben

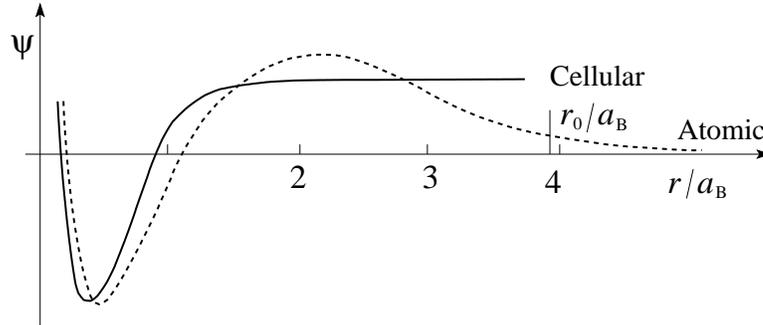


Abb. 3.17: $3s^1$ -Wellenfunktion ϕ_0 in Wigner-Seitz-Approximation im Vergleich zum atomaren Orbital (gestrichelt). Die Randbedingung $\partial_r \phi_0|_{r=r_0} = 0$ führt auf eine Absenkung des Energieeigenwertes verglichen mit demjenigen im freien Atom (Abb. aus [Ash76]).

wir die Wigner-Seitz-Zelle durch eine Kugel approximiert. Die Lösung für ϕ_0 ist in Abb. 3.17 gezeigt.

Durch die Absenkung der Energie der $3s$ Elektronen beim Übergang vom Gas zum Kristall ergibt sich die Kohäsions (innere Bindungs-) Energie des Kristalls. Beachte, dass im Na mit einem Elektron pro Atom nur die Hälfte des Bandes aufgefüllt wird; entsprechend werden nur die energetisch günstigeren (abgesenkten) Zustände gefüllt, währenddem die ungünstigen Zustände am Zonenrand (wo $\phi_0|_{r=r_0} = 0$) leer bleiben.

Augmented Plane Waves (APW)

In der APW-Methode wird das Potential durch ein sphärisches Muffin-Tin-Potential ersetzt (vgl. Abb. 3.18),

$$V^{\text{MT}}(r) = \begin{cases} V(r), & r < r_0, \\ 0, & r > r_0. \end{cases} \quad (3.85)$$

Die Lösungen zu diesem Potential haben die Form

$$\phi_{\vec{k}, \varepsilon_{\vec{k}}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Theta(r - r_0) + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(\vec{k}) Y_{lm}(\phi, \theta) R_l(\varepsilon_{\vec{k}}, r) \Theta(r_0 - r), \quad (3.86)$$

d.h., eine ebene Welle ausserhalb von r_0 und ein Orbital zum Potential V innerhalb von r_0 (mit der gesuchten Dispersion $\varepsilon_{\vec{k}}$ als Parameter). Die

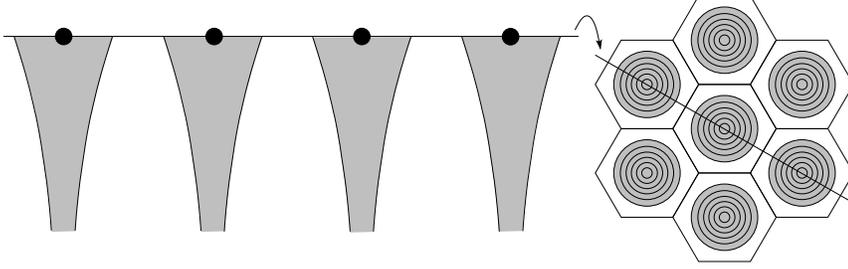


Abb. 3.18: Muffin-Tin-Potential V^{MT} entlang der Diagonalen (rechts). Das zentralsymmetrische Potential in der Umgebung der Ionen wird durch ein konstantes Potential im Zwischenbereich ergänzt. Abb. aus [Ash76].

Stetigkeit bei $r = r_0$ implementieren wir via entwickeln der ebenen Welle $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ in sphärische Harmonische und erhalten

$$c_{lm}(\vec{k}) = 4\pi Y_{lm}^*(\theta_{\vec{k}}, \phi_{\vec{k}}) \frac{j_l(kr_0)}{R_l(\varepsilon_{\vec{k}}, r_0)}, \quad (3.87)$$

wobei $\theta_{\vec{k}}, \phi_{\vec{k}}$ die sphärischen Koordinaten des Vektors \vec{k} sind. Die Augmented Plane Waves sind durch die Gl. (3.86) und (3.87) definiert und sind stetig, aber nicht unbedingt stetig differenzierbar. An den Rändern des MT-Potentials bei $r = r_0$ zeigen die Ableitungen Sprünge, was δ -Funktionen im Operator der kinetischen Energie erzeugt. Obwohl wir im Bereich $r < r_0$ einen vollständigen Satz angesetzt haben, haben wir in den Zwischenbereichen nur eine einzige ebene Welle angepasst. Wir sollten aber alle ebenen Wellen $\exp[i(\vec{k} + \vec{K}_{\vec{m}}) \cdot \vec{r}]$ zulassen und damit zur Superposition

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}_{\vec{m}}} c_m(\vec{k}) \phi_{\vec{k} + \vec{K}_{\vec{m}}, \varepsilon_{\vec{k}}}(\vec{r}) \quad (3.88)$$

übergehen. Dass die Blochbedingung erfüllt ist, folgt sofort aus der Evaluation von $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_i)$ im Zwischenbereich und mit Gl. (3.88) wird das Matching-Problem elegant gelöst. Es bleibt die Bestimmung der Koeffizienten $c_m(\vec{k})$. Das Einsetzen von Gl. (3.88) ins Energiefunktional von Gl. (3.47) und das Minimieren bezüglich $c_m(\vec{k})$,

$$\frac{\partial E[\Psi_{\vec{k}}]}{\partial c_m(\vec{k})} = 0, \quad (3.89)$$

ergibt ein lineares Gleichungssystem \mathcal{S} für die $c_m(\vec{k})$. Die Bedingung $\det \mathcal{S} = 0$ bei gegebenem $E = \varepsilon_{\vec{k}}$ und variierendem \vec{k} bestimmt schliesslich die Dispersion. Eine noch elegantere Lösung des Problems der Randbedingungen in der zellulären Methode ist die Green's-Funktionen-Methode im folgenden Abschnitt.

Methode von Korringa, Kohn und Rostoker (KKR)

Bei dieser Methode findet man zuerst (und ein für alle mal für einen bestimmten Gittertyp) die Gitter-Green's-Funktion,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E \right) G_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{r}', E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.90)$$

$$G_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_m, E) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} G_{\vec{k}}(\vec{r}, E), \quad (3.91)$$

$$G_{\vec{k}}(\vec{r}, E) = -\frac{1}{NV_{\text{uc}}} \sum_n \frac{e^{i(\vec{k} - \vec{K}_n) \cdot \vec{r}}}{\frac{\hbar^2(\vec{k} + \vec{K}_n)^2}{2m} - E}. \quad (3.92)$$

Wie in der Streutheorie wird dann das Differentialproblem (vgl. Gl. 3.53) in ein Integralproblem (Lippmann-Schwinger-Gleichung) transformiert, welches die Bloch'schen Randbedingungen unter Gittertranslationen bereits berücksichtigt,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \int_{K_{r_0}} d^3r' G_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{r}', E) V(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}'), \quad (3.93)$$

mit K_{r_0} die Kugel zum Muffin-Tin Potential V^{MT} . Der Ansatz (3.81) für $\Psi_{\vec{k}}$ mit Lösungen R_l von (3.82) zu einer gewählten Energie $\varepsilon_{\vec{k}} = E$ gibt uns wiederum ein lineares Gleichungssystem \mathcal{S} für die Koeffizienten c_{lm} und die Bedingung $\det = 0$ bestimmt die Dispersion.¹⁹ Die APW und KKR sind sehr ähnlich; während APW die Anzahl ebener Wellenvektoren $\vec{K}_{\vec{m}}$ im Zwischenbereich limitiert, begrenzt KKR die Anzahl der "Atomorbitale" im Kernbereich.

3.3.5 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Methode

Die $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Methode soll keine komplette Bandstruktur ergeben, sondern ist vorwiegend ein theoretisches Werkzeug um die Bandstruktur in gewissen

¹⁹In diesem Schema werden die Koeffizienten also nicht durch die Randbedingungen (3.83) sondern durch die Lippmann-Schwinger Gleichung (3.93) bestimmt.

Punkten der B.Z. zu approximieren, z.B. die Beschreibung der Dispersion via einer *effektiven Masse* m^* ,

$$\varepsilon_{\vec{k}}|_{\vec{k} \rightarrow 0} \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (3.94)$$

Wir starten mit der Blochfunktion $\Psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r})$ zu \vec{k}_0 , welche wir als bekannt voraussetzen. Die Wellenfunktionen $\exp[i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}] \Psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r})$ sind dann Blochwellen zu \vec{k} . Damit wir die Lösungen von $H\Psi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}}\Psi_{\vec{k}}$ erhalten, gehen wir zur Superposition

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_m c_m e^{i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}} \Psi_{m\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad (3.95)$$

über. Beachte dabei, dass wir die Blochfunktionen zu \vec{k} in diejenigen zu \vec{k}_0 entwickeln. Die Anwendung des Variationsprinzips oder die Projektion auf $\exp[i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}] \Psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r})$ ergibt das Eigenwertproblem

$$\left[E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 - \varepsilon_{n\vec{k}} \right] c_n + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \sum_m \vec{M}_{mn}(\vec{k}_0) c_m = 0 \quad (3.96)$$

mit²⁰

$$\vec{M}_{nm}(\vec{k}_0) = \int d^3r \Psi_{n\vec{k}_0}^*(\vec{r}) \vec{p} \Psi_{m\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad (3.97)$$

$$= \frac{m}{i\hbar} [E_n(\vec{k}_0) - E_m(\vec{k}_0)] \int d^3r \Psi_{n\vec{k}_0}^*(\vec{r}) \vec{r} \Psi_{m\vec{k}_0}(\vec{r}). \quad (3.98)$$

Die Idee ist es dann, z.B. die $\vec{k}_0 = 0$ -Energien und Wellenfunktionen²¹ via OPW, APW, ... zu berechnen und dann, via Gln. (3.96) und (3.98), die Dispersion im Rest der B.Z. zu erhalten. Die Matrixelemente können via Symmetriebetrachtungen durch ein reduziertes Set von Parametern ausgedrückt werden. Ausserdem sind die Gleichungen hier viel leichter zu lösen als mit der APW-, OPW- etc. Methode.

Für \vec{k} nahe \vec{k}_0 können wir Gl. (3.96) und (3.98) in Störungstheorie lösen. Für ein extremales \vec{k}_0 verschwinden die diagonalen Matrixelemente $M_{nn}(\vec{k}_0) = 0$ und wir erhalten

$$\varepsilon_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{i \neq n} \frac{|(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{M}_{ni}(\vec{k}_0)|}{E_n(\vec{k}_0) - E_i(\vec{k}_0)}. \quad (3.99)$$

²⁰Benutze $[H, \vec{r}] = \frac{\hbar}{im} \vec{p}$

²¹Allgemein, die Energien und Wellenfunktionen in der Umgebung eines Hochsymmetriepunktes

Damit erhalten wir die effektive Masse in Richtung $\vec{s} = (\vec{k} - \vec{k}_0)/|\vec{k} - \vec{k}_0|$:

$$\frac{1}{m_s^*} = \frac{1}{m} \left[1 + \sum_{i \neq n} \frac{|\vec{s} \cdot \vec{M}_{ni}(\vec{k}_0)|^2 (2/m)}{E_n(\vec{k}_0) - E_i(\vec{k}_0)} \right]. \quad (3.100)$$

Die effektive Masse höherer Bänder wird auf Grund der Wechselwirkung mit niedrigeren (höheren) Bändern reduziert (erhöht). Für die Sequenz Li, Na, K, Rb, Cd (ns^1 , $n = 2, \dots, 6$) der Alkali Atome haben wir $m_{\text{cond}} = 1.33, 0.96, 0.86, 0.76, 0.73 m_e$; die Abnahme der effektiven Masse entspricht der Zunahme der Anzahl von Kernzuständen. In direkten Halbleitern ist $m_{\text{valenz}} > m_{\text{cond}}$. Und Isolatoren mit kleinen Gaps haben tendenziell kleinere Massen.

Kapitel 4

Elektronengas

4.1 Grundzustand und Anregungsspektrum

Freie Elektronen im Vakuum werden beschrieben durch ebene Wellen $\psi_{\vec{k}\sigma} = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \chi_{\sigma}$, die Dispersion $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ und die Zustandsdichte¹

$$\rho_{\text{frei}}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon}. \quad (4.1)$$

Im kristallinen Festkörper treten an ihre Stelle die Blochwellen²

$$\psi_{n\vec{k}\sigma} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \chi_{\sigma} \quad (4.2)$$

mit $\vec{k} \in \text{B.Z.}$, $u_{n\vec{k}}$ periodisch, mit der Dispersion/Bandstruktur $\varepsilon_{n\vec{k}}$ und der Zustandsdichte

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_n \int_{\varepsilon=\varepsilon_{n\vec{k}}} \frac{dS_{\vec{k}}}{|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon_{n\vec{k}}|}. \quad (4.3)$$

Den Aspekt des Kristallgitters haben wir in Kapitel 3 diskutiert. Hier sind wir an den Aspekten *Anregungen*, *Statistik* und *Struktur* des e^- -Gases im Festkörper interessiert und weniger an den Details der Bandstruktur. Wir können dann die Bandstruktur in einfachster Weise durch eine *effektive Bandmasse* m_n^* berücksichtigen, indem wir für die Dispersion schreiben,

$$\varepsilon_{n\vec{k}} \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} + \text{const.} \quad (4.4)$$

¹im folgenden in 3 Dimensionen

²ohne Spin-Bahn-Kopplung

Es ist $m_n^* > 0$ ($m_n^* < 0$) für die Entwicklung um ein Minimum (Maximum) von $\varepsilon_{n\vec{k}}$ und m_n^* kann grösser oder kleiner als die Elektronenmasse m_e sein. Stark gebundene Elektronen geben $m_n^* \gg m_e$ (flache Bänder, TBA), aber auch $m_n^* \ll m_e$ (steile Bänder) treten auf, z.B. in Halbleitern mit direktem Gap (vgl. Abschnitt 3.3.3 über NFE und TBA). In einigen Halbleitern (z.B. Si, Ge) ist die effektive Masse der Leitungselektronen anisotrop und durch eine Matrix M_n^* beschrieben

$$\varepsilon_{n\vec{k}} \approx \text{const.} + \frac{\hbar^2}{2} (\vec{k} - \vec{k}_0) M_n^{*-1} (\vec{k} - \vec{k}_0). \quad (4.5)$$

Wir werden in der Folge sehen, dass die Elektronen im Festkörper ihre Masse auch durch Wechselwirkungen ändern können, z.B. durch die e^-e^- -Wechselwirkung oder die Elektron-Phonon-Wechselwirkung, $m_n^* = m(1 + \lambda)$; man sollte deshalb die effektive Masse genauer, z.B. als *Bandmasse*, spezifizieren. Im folgenden notieren wir für die Bandmasse m statt m_n^* und setzen $\hbar = 1$; entsprechend sind $(\omega, \vec{k}) \hat{=} (E, \vec{p})$.

4.1.1 Grundzustand

Der Grundzustand des Elektronengases ist gegeben durch das Auffüllen der tiefsten Zustände mit Kristallimpuls \vec{k} mit maximal 2 Elektronen verschiedenen Spins σ bis zur Fermienergie $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$, vgl. Abb. 4.1. Die Teilchendichte (in 3 Dimensionen) ist damit

$$n = \frac{N}{V} = 2 \int_{k < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{2}{8\pi^3} 4\pi \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (4.6)$$

und der Fermiimpuls k_F ist gegeben als $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$. Mit jedem Zustand $|\vec{p}, \sigma\rangle$ ist auch (für eine gerade Teilchenzahl N) der Zustand $|\vec{p}, -\sigma\rangle$ besetzt und der Grundzustand hat Gesamtimpuls $\vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i = 0$ und Spin 0.

4.1.2 Anregungen des Elektronengases

Teilchen und Löcher

Die tiefliegenden Anregungen des Elektronengases erhalten wir, indem wir Elektronen mit $p_0 < p_F$ in unbesetzte Zustände mit $p > p_F$ transferieren, z.B. $|\vec{p}_0, \sigma\rangle \rightarrow |\vec{p}, \sigma\rangle$. Das angeregte e^- -System besitzt dann einen Gesamtimpuls $\vec{p} - \vec{p}_0$ und die Energie $(p^2 - p_0^2) / 2m$ wurde dem System hinzugefügt. Beachte,

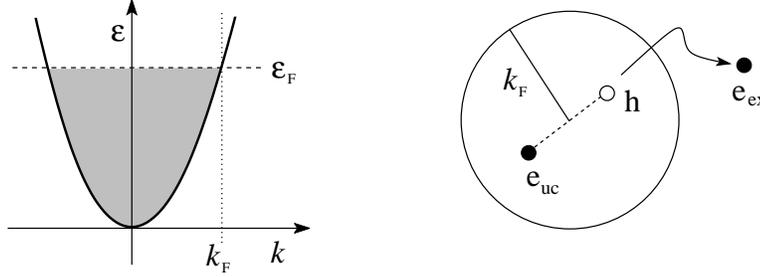


Abb. 4.1: Links: Bis zur Fermienergie ε_F gefüllter Fermisee; Rechts: Anregung eines Elektrons (e_{ex}) zum Impuls \vec{p} , $p > p_F$ unter Erzeugung eines Loches (h) und eines unkompenzierten Elektrons (e_{uc}) im Fermisee.

dass der Gesamtimpuls der Anregung die Summe der Impulse \vec{p} des angeregten Elektrons und $-\vec{p}_0$ des unkompenzierten Elektrons ist; demgegenüber ist die Anregungsenergie *nicht* die Summe der Energien des angeregten ($p^2/2m$) und des unkompenzierten Elektrons ($p_0^2/2m$). Wir können also den angeregten Zustand nicht einfach durch die Energien und Impulse der angeregten bzw. unkompenzierten Elektronen beschreiben.

Wir führen deshalb eine neue Sichtweise ein:

$$\begin{aligned}
 \text{Gefüllter Fermisee} &= \text{neues Vakuum} = \text{Grundzustand} \\
 \text{Elektron} - \text{Loch} - \text{Anregungen} &= \text{Quasiteilchen} \\
 \text{Anregungsenergie} &= E - E_0,
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

wobei E die Energie des angeregten Zustandes und E_0 die Energie des gefüllten Fermisees ist. Für die Anregungsenergie $E - E_0$ finden wir dann (mit $\xi_{\vec{p}} \equiv \varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F$)

$$E - E_0 = \sum_{\vec{p}, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma} - \sum_{p < p_F, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}} = \tag{4.8}$$

$$= \sum_{p > p_F, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma} - \sum_{p < p_F, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}} (1 - n_{\vec{p}\sigma}) = \tag{4.9}$$

$$= \sum_{p > p_F, \sigma} \xi_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma} + \sum_{p < p_F, \sigma} |\xi_{\vec{p}}| (1 - n_{\vec{p}\sigma}). \tag{4.10}$$

Dabei ist $n_{\vec{p}\sigma}$ ($\in \{0, 1\}$ für $T = 0$) die Besetzung des Zustandes $|\vec{p}, \sigma\rangle$ und Gl. 4.10 lässt sich als Summe der Energien der Elektronen ($p > p_F$) und

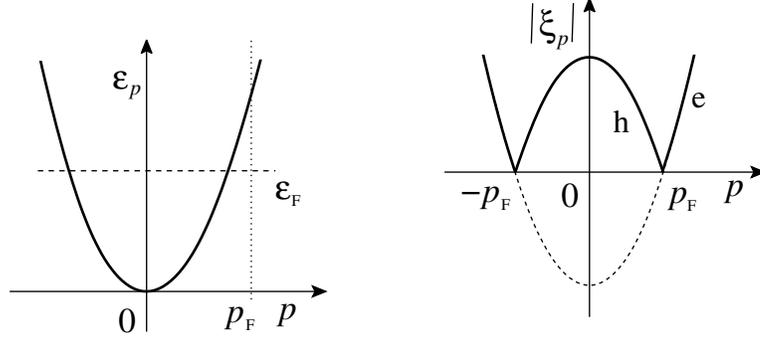


Abb. 4.2: Dispersion $\varepsilon_{\vec{p}}$ und Anregungsenergie $|\xi_{\vec{p}}| > 0$ für Elektronen (e) und Löcher (h). Die Erzeugung einer Teilchen/Loch Anregung *kostet* immer eine Energie $|\xi_{\vec{p}}| > 0$.

Löcher ($p < p_F$) interpretieren. Beachte, dass die Erzeugung eines Teilchens (e^-) oder eines Loches (h) immer die Energie $|\xi_{\vec{p}}| > 0$ kostet (vgl. Abb. 4.2).

Ebenso erhalten wir den Impuls

$$\vec{p} - \vec{p}_0 = \sum_{\vec{p}, \sigma} \vec{p} n_{\vec{p}\sigma} - \underbrace{\sum_{p < p_F, \sigma} \vec{p}}_{=0} = \quad (4.11)$$

$$= \sum_{p > p_F, \sigma} \vec{p} n_{\vec{p}\sigma} + \sum_{p < p_F, \sigma} (-\vec{p}) (1 - n_{\vec{p}\sigma}). \quad (4.12)$$

Wir können jetzt das Teilchen-Loch (e^- -h)-Anregungsspektrum im Elektronengas konstruieren (*particle-hole excitations, pair excitations*); dabei unterscheiden wir zwischen *Einteilchen-Anregungen (single-particle excitations)*, welche dem System ein Teilchen hinzufügen/entnehmen, bzw. ein Loch entnehmen/hinzufügen (Teilchenzahl ist nicht erhalten), und Paaranregungen mit erhaltener Teilchenzahl.³

Paaranregungen haben keine eindeutige Beziehung zwischen Energie und Impuls und ergeben ein Kontinuum. Um das Anregungsspektrum (die erreichbaren Anregungsenergien) zu fixem Impuls \vec{p}_0 zu erhalten, verschieben wir die Fermikugel um \vec{p}_0 , vgl. Abb. 4.3; ein Teilchen mit einem Impuls \vec{p}

³Daneben gibt es auch *kollektive Anregungen*, z.B. den *nullten Schall (zero sound)*, den *ersten Schall (first sound)*, die *Plasmaschwingungen (Plasmonen $\hat{=}$ plasmons)*, die auf die (hier nicht vorhandene) Wechselwirkung zwischen den Teilchen zurückzuführen sind.

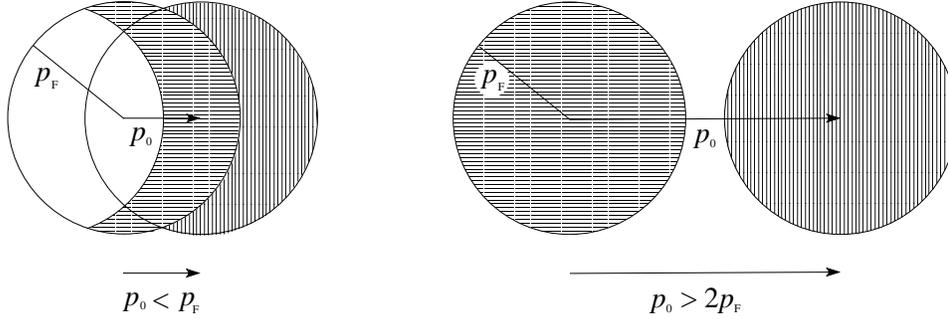


Abb. 4.3: Fermikugel und um p_0 verschobene Fermikugel. Elektronen aus der waagrecht schraffierten Fläche können in leere Zustände im senkrecht schraffierten Gebiet angeregt werden. Die minimalen und maximalen Anregungsenergien ergeben sich durch die kürzesten und längsten Distanzen des senkrecht schraffierten Bereichs vom Nullpunkt (links, p_F und $p_F + p_0$ und p_0 ; rechts $p_F - p_0$ und $p_F + p_0$), wobei das Elektron immer der Fermioberfläche entnommen wird.

im waagrecht schraffierten Gebiet kann in das senkrecht schraffierte Gebiet angeregt werden. Für $p_0 < 2p_F$ schneiden sich die beiden Kugeln und die minimale Anregungsenergie ist $E - E_0 = 0$. Die maximale Anregungsenergie ergibt sich zu,

$$E - E_0 = \frac{1}{2m} [(p_0 + p_F)^2 - p_F^2] \stackrel{p_0 \ll p_F}{\approx} \frac{p_0 p_F}{m} = v_F p_0. \quad (4.13)$$

Für $p_0 > 2p_F$ schneiden sich die Kugeln nicht mehr und die minimalen und maximalen Anregungsenergien sind gegeben durch

$$E - E_0 = \frac{1}{2m} [(p_0 \mp p_F)^2 - p_F^2] = \frac{1}{2m} (p_0^2 \mp 2p_0 p_F). \quad (4.14)$$

Man definiert die Anregungsenergie $\omega = E - E_0$ und erhält das Paaranregungsspektrum in Abb. 4.4.

Zweite Quantisierung

Wir schreiben diese Ideen in die zweit-quantisierte Form um (Bogoliubov-Valatin Transformation) und starten mit dem Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma}, \quad (4.15)$$

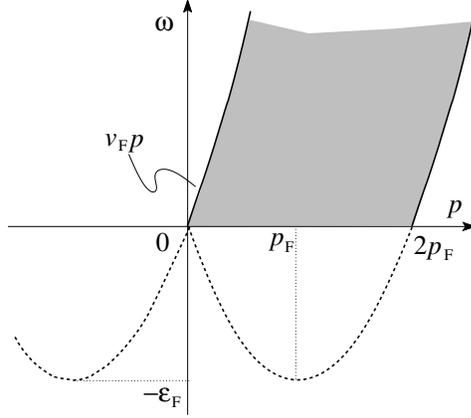


Abb. 4.4: Paar Anregungsspektrum des freien Elektronengases. Das schattierte Gebiet entspricht den erlaubten Anregungsenergien. Die beiden Parabeln $\omega_{\max} = [(p + p_F)^2 - p_F^2]/2m$ und $\omega_{\min} = [(p - p_F)^2 - p_F^2]/2m$ definieren die maximalen und minimalen Anregungsenergien. Die lineare Steigung am Ursprung wird durch die Fermigeschwindigkeit v_F festgelegt [vgl. auch mit dem Formfaktor $S^0(\vec{q}, \omega)$ in Gl. (5.58)].

wobei $c_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ der (fermionische) Erzeuger eines Elektrons mit \vec{p}, σ ist; entsprechend gelten die Anti-Kommutatoren $\{c_{\vec{p}\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}'\sigma'}\} = \delta_{\vec{p}\vec{p}'}\delta_{\sigma\sigma'}$. Wir gehen über zu den Energien $\xi_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F$ und erhalten⁴

$$K = H - \varepsilon_F N = \sum_{\vec{p}\sigma} \xi_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma}. \quad (4.16)$$

Wir definieren nun

- $c_{\vec{p}\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}\sigma}$: Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Elektronen (e^-) ausserhalb der Fermikugel, $p > p_F$,
- $d_{\vec{p}\sigma}^\dagger, d_{\vec{p}\sigma}$ mit $d_{\vec{p}\sigma} = c_{\vec{p}\sigma}^\dagger$: Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Löcher (h) innerhalb der Fermikugel, $p < p_F$.

Die Operatoren $d_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ ($d_{\vec{p}\sigma}$) erzeugen (vernichten) eine Lochanregung mit Impuls $-\vec{p}$ und Spin $-\sigma$. Mit $1 - c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} = c_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger = d_{\vec{p}\sigma}^\dagger d_{\vec{p}\sigma}$ erhalten wir

$$K = \sum_{p < p_F, \sigma} \xi_{\vec{p}} + \sum_{p > p_F, \sigma} \xi_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} + \sum_{p < p_F, \sigma} |\xi_{\vec{p}}| d_{\vec{p}\sigma}^\dagger d_{\vec{p}\sigma}. \quad (4.17)$$

⁴Beachte, dass mit $\varepsilon_F \rightarrow \mu$ (μ chemisches Potential) der Übergang $H \rightarrow K$ gerade dem Übergang vom kanonischen (feste Teilchenzahl) zum grosskanonischen (variable Teilchenzahl) Ensemble entspricht. Das thermodynamische Potential $F(V, T, N)$ wird durch $\Omega(V, T, \mu) = F - \mu N$ ersetzt (tatsächlich, $\Omega(V, T, z)$ mit der Fugazität $z = \exp(\mu/T)$) und es ist $\langle N \rangle = -\partial\Omega/\partial\mu$ bzw. $\mu = \partial F/\partial N$.

Für die Grundzustandsenergie des gefüllten Fermisees finden wir $E_{FS} = \langle FS|H|FS \rangle = \langle FS|K|FS \rangle + N\varepsilon_F = (3/5)\varepsilon_F N$, denn

$$\begin{aligned} \langle FS|K|FS \rangle &= \sum_{p < p_F, \sigma} \xi_{\vec{p}} + \\ &+ \sum_{p > p_F, \sigma} \xi_{\vec{p}} \underbrace{\langle FS|c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma}|FS \rangle}_{=0} + \sum_{p < p_F, \sigma} |\xi_{\vec{p}}| \underbrace{\langle FS|d_{\vec{p}\sigma}^\dagger d_{\vec{p}\sigma}|FS \rangle}_{=0} \\ &= -\frac{2}{5}\varepsilon_F N. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Quasiteilchen-Operatoren

Es ist etwas unangenehm, mit zwei Typen von Operatoren zu arbeiten. Wir definieren deshalb die Quasiteilchenoperatoren $\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger$ und $\alpha_{-\vec{p}\downarrow}$ durch Linearkombination von Erzeugern $c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger$ und Vernichtern $c_{-\vec{p}\downarrow}$ (d.h. Erzeugern eines Loches mit \vec{p}, \uparrow),

$$\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger = u_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger - v_{\vec{p}} c_{-\vec{p}\downarrow}, \quad (4.19)$$

$$\alpha_{-\vec{p}\downarrow} = v_{\vec{p}} c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger + u_{\vec{p}} c_{-\vec{p}\downarrow}. \quad (4.20)$$

Die Fermi-Antivertauschungsrelationen gelten für die neuen Operatoren $\alpha_{\vec{p}\sigma}$, falls $u_{\vec{p}}^2 + v_{\vec{p}}^2 = 1$, was mit unserer Definition⁵

$$u_{\vec{p}} = 1 \quad , \quad v_{\vec{p}} = 0, \quad \text{für } p > p_F, \quad (4.21)$$

$$u_{\vec{p}} = 0 \quad , \quad v_{\vec{p}} = 1, \quad \text{für } p < p_F, \quad (4.22)$$

gewährleistet ist. Damit erzeugt $\alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ für $p > p_F$ ein Elektron mit Impuls \vec{p} und Spin σ und für $p < p_F$ ein Loch mit Impuls \vec{p} und Spin σ . $\alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ ist also ein Erzeuger für Quasiteilchen mit \vec{p}, σ für alle \vec{p} . Das Einsetzen der Definitionen in den Gl. (4.19) – (4.22) in Gl. (4.16) ergibt

$$K = H - \varepsilon_F N = \sum_{p < p_F, \sigma} \xi_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}\sigma} |\xi_{\vec{p}}| \alpha_{\vec{p}\sigma}^\dagger \alpha_{\vec{p}\sigma}. \quad (4.23)$$

⁵Diese Wahl von $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ bewirkt, dass $\xi_{\vec{p}}$ im Hamiltonian K durch $|\xi_{\vec{p}}|$ ersetzt wird, womit alle Anregungsenergien für Teilchen- und Loch Anregungen positiv werden.

4.2 Endliche Temperaturen

Unser Ziel ist es, die Verteilungsfunktion $n(\varepsilon_{\vec{k}})$ für die Gleichgewichtsbesetzung der Zustände bei endlicher Temperatur $k_B T = 1/\beta$ zu finden.⁶ Bei $T = 0$ ist (im Gleichgewicht) das System im Grundzustand und wir wissen aus dem vorigen Abschnitt, dass nur die Fermikugel besetzt ist,

$$n(\varepsilon_{\vec{k}}, T = 0) = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\vec{k}}). \quad (4.24)$$

Elektronen bei endlicher Temperatur $T \neq 0$ im thermodynamischen Gleichgewicht werden durch die *Fermiverteilung* $f(\varepsilon)$ beschrieben,

$$n(\varepsilon_{\vec{k}}, T) = f(\varepsilon_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)} + 1}. \quad (4.25)$$

Ist das System nicht im thermodynamischen Gleichgewicht (z.B. in Gegenwart eines Temperatur Gradienten $\nabla T \neq 0$ oder einer chemischen Kraft $\nabla \mu \neq 0$) so ist $n(\varepsilon) \neq f(\varepsilon)$ und die Verteilungsfunktion $n(\varepsilon)$ muss durch die Lösung eines kinetischen Problems, z.B. der Boltzmann-Gleichung, bestimmt werden.

Seien nun E_n und $|n\rangle$ die Energien und Eigenzustände eines Systems mit dem Hamiltonoperator H , im fixen Volumen V und fixer Teilchenzahl N . Dann gibt die *Gibbsverteilung*

$$w_n = \frac{1}{Z_N} e^{-E_n/T}, \quad Z_N = \sum_n e^{-E_n/T}, \quad (4.26)$$

die Wahrscheinlichkeit an, das System im Zustand $|n\rangle$ zu finden (Z_N die *kanonische Zustandssumme*). Der Erwartungswert der Grösse A berechnet sich dann aus

$$\langle A \rangle_N = \sum_n \langle n | A | n \rangle w_n = \sum_n A_n w_n \quad (4.27)$$

und das thermodynamische Potential ist $F(V, T, N) = -T \ln Z_N$.

Erlauben wir zusätzlich den Teilchenaustausch mit dem Reservoir, gehen wir zur *grosskanonischen* Beschreibung über: Der Transfer eines Teilchens kostet dabei gerade die Energie $E(N+1) - E(N) = \mu$, die durch das chemische Potential μ gegeben ist. Die Wahrscheinlichkeit, einen N -Teilchenzustand $|n\rangle$ mit Energie E_n zu finden, ist dann⁷

$$w_{nN} = \frac{1}{Z} e^{-(E_n - \mu N)/T}, \quad Z = \sum_{nN} e^{-(E_n - \mu N)/T}, \quad (4.28)$$

⁶Wir setzen $k_B = 1$ und messen Temperaturen in Einheiten der Energie, $1\text{eV} = 11605\text{K}$.

⁷Beachte, dass hier E_n von N abhängig ist.

mit der grosskanonischen Zustandssumme Z . Das zugehörige thermodynamische Potential ist $\Omega(V, T, z = e^{\mu/T}) = F - \mu N = -pV = -T \ln Z$.

Eine elegante Beschreibung ergibt sich durch die Definition des *Dichteoperators* (*statistischer Operator, Dichtematrix*),⁸

$$\hat{\rho}_N = \frac{1}{Z_N} e^{-H/T}, \quad \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-K/T}. \quad (4.29)$$

Damit lassen sich Erwartungswerte von Operatoren A einfach schreiben als $\langle A \rangle_N = \text{tr}(\hat{\rho}_N A)$ bzw. $\langle A \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} A)$.

Sei unser System nun der einzelne Quantenzustand $|\vec{p}\sigma\rangle$ im Fermigas. Dieser Zustand kann nur 0- oder 1-fach besetzt werden (Fermistatistik) und damit wird

$$Z_{\vec{p}\sigma} = \sum_{n_{\vec{p}\sigma}} e^{-\beta \xi_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma}} = 1 + e^{-\beta \xi_{\vec{p}}}, \quad (4.30)$$

$$\rho_{\vec{p}\sigma} = \frac{1}{1 + e^{-\beta \xi_{\vec{p}}}} \exp\left(-\beta \xi_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma}\right). \quad (4.31)$$

Durch elementare Rechnung erhält man daraus die Fermiverteilung $f(\varepsilon_{\vec{p}})$ für die Besetzung des Zustandes $|\vec{p}\sigma\rangle$ im Gleichgewicht,

$$\langle n_{\vec{p}\sigma} \rangle = \text{tr}(n_{\vec{p}\sigma} \rho_{\vec{p}\sigma}) = \sum_n \langle n | c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} \rho_{\vec{p}\sigma} | n \rangle = \quad (4.32)$$

$$= \langle 1 | \rho_{\vec{p}\sigma} | 1 \rangle = \frac{e^{-\beta \xi_{\vec{p}}}}{1 + e^{-\beta \xi_{\vec{p}}}} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu)}} = f(\varepsilon_{\vec{p}}). \quad (4.33)$$

Die Fermiverteilung $f(\varepsilon, T)$ ist in Abb. 4.5 graphisch dargestellt.

Mit $\lim_{T \rightarrow 0} f(\varepsilon, T) = \Theta(\mu - \varepsilon)$ erhalten wir bei $T = 0$ wieder die korrekte Verteilungsfunktion für den Grundzustand. Beachte auch die scharfe Form der Ableitung

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)|_{T=0} \approx -\delta(\varepsilon - \mu)|_{T>0}. \quad (4.34)$$

Indem wir die Besetzungszahl $f(\varepsilon)$ aufintegrieren, erhalten wir das chemische Potential $\mu(T)$,

$$n = \frac{N}{V} = \int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon \sqrt{\varepsilon}}{1 + e^{(\varepsilon - \mu)/T}} =$$

⁸Vergleiche Quantenmechanik I: $\hat{\rho}_N = \sum_i w_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|$ wird im Gleichgewicht gerade durch $\hat{\rho}_N = \sum_n \underbrace{Z_N^{-1} e^{-E_n/T}}_{=w_n} |n\rangle \langle n| = Z_N^{-1} e^{-H/T} \sum_n |n\rangle \langle n|$ gegeben.

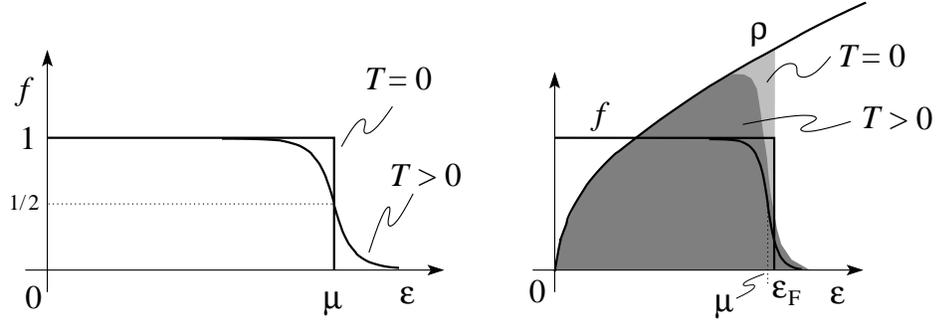


Abb. 4.5: Fermiverteilung $f(\epsilon, T)$ in Abhängigkeit von der Temperatur T und $\rho(\epsilon)f(\epsilon, T)$. Die bezüglich μ symmetrische Fermifunktion wird durch $\rho(\epsilon > \mu)$ schwächer gewichtet als durch $\rho(\epsilon < \mu)$. Vergleiche die besetzten Zustände in $\rho(\epsilon)f(\epsilon, T)$ mit der Photointensität in Abb. 3.8.

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} F(\mu/T) \quad (4.35)$$

mit dem Fermiintegral

$$F(y) = \int_0^\infty \frac{dx\sqrt{x}}{1+e^{x-y}} = \begin{cases} \sqrt{\pi}e^y/2, & y \ll -1, \\ 2y^{\frac{3}{2}}/3, & y \gg 1. \end{cases} \quad (4.36)$$

Für Halbleiter mit $y = \mu/T \ll -1$ ergibt sich

$$n \approx 2 \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-|\mu|/T}, \quad (4.37)$$

während für Metalle mit $y \gg 1$ gilt:

$$n \approx \frac{2}{3} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \underset{\mu \approx \hbar^2 k_F^2 / 2m}{\approx} \frac{k_F^3}{3\pi^2}. \quad (4.38)$$

Die nächste Ordnung in $1/y$ ($\mu \gg T$ wegen $\mu \sim \text{eV} \sim 10^4 \text{K} \gg 10^2 - 10^3 \text{K} \sim T$) ergibt die Temperaturabhängigkeit von μ ,

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]; \quad (4.39)$$

beachte, dass $\Delta\mu/\mu \sim 10^{-3}$ typischerweise (warum nimmt $\mu(T)$ mit T ab ? Ist auch das Gegenteil möglich ?). Mit der Energiedichte

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (4.40)$$

erhalten wir die spezifische Wärme pro Teilchen,

$$c = \frac{d\langle \varepsilon \rangle}{dT} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{\varepsilon_F}, \quad (4.41)$$

oder pro Volumen, wir die spezifische Wärme pro Teilchen,

$$C_v = \frac{mk_F}{3\hbar^2} T. \quad (4.42)$$

Kapitel 5

Struktur und Antwort

5.1 Struktur des elektronischen Systems

Wir untersuchen das Elektronensystem¹, indem wir die Streuung eines Teilchens betrachten, $\vec{P} \rightarrow \vec{P}' = \vec{P} - \vec{q}$, das schwach via $H' = \sum_i V(\vec{r}_i - \vec{R})$ mit den Elektronen am Ort \vec{r}_i wechselwirkt (vgl. Abb. 5.1; die folgende Herleitung gilt auch für das wechselwirkende System). Beim Streuprozess geht das System vom Grundzustand $|0\rangle$ mit der Energie E_0 in den angeregten Zustand $|n\rangle$ mit der Energie $E_n = E_0 + \omega_{n0}$ und dem Impuls \vec{p}_n über. Energie- und Impulserhaltung implizieren

$$\frac{(\vec{P} - \vec{q})^2}{2M} + E_n = \frac{P^2}{2M} + E_0 \Rightarrow \omega_{n0} = \vec{q} \cdot \vec{V} - \frac{q^2}{2M}, \quad (5.1)$$

$$(\vec{P} - \vec{q}) + \vec{p}_n = \vec{P} + \vec{0} \Rightarrow \vec{p}_n = \vec{q}. \quad (5.2)$$

Das System ist also nach dem Streuprozess durch die Quantenzahlen \vec{q}, ω charakterisiert.

Die Übergangswahrscheinlichkeit $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ folgt aus Fermi's Goldener Regel,

$$W_{0,n}(\vec{q}, \omega) = 2\pi |\langle n | H' | 0 \rangle|^2 \delta[\omega - \omega_{n0}], \quad (5.3)$$

wobei die δ -Funktion die Energieerhaltung beim Energietransfer ω_{n0} auf das Elektronensystem gewährleistet; beachte, dass ω_{n0} und \vec{q} nicht unabhängige

¹Beachte, dass diese Analyse weitgehend Systemunabhängig ist, also nicht nur für elektronische sondern auch für andere Vielteilchensystems anwendbar ist; hier brauchen wir die Sprache im Kontext von elektronischen Systemen, 'pour fixer les idées'.

Variablen sondern via (5.1) verbunden sind. Die Rate $W(\vec{q}, \omega)$ erhalten wir durch Summation über alle möglichen Endzustände $|n\rangle$. Weiter können wir H' schreiben als ($\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ bezeichnet die Elektronendichte)

$$H' = \sum_i V(\vec{r}_i - \vec{R}) = \int d^3r V(\vec{r} - \vec{R})\rho(\vec{r}) = \quad (5.4)$$

$$= \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \rho_{-\vec{q}} \quad (5.5)$$

mit

$$V_{\vec{q}} = \int d^3r V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad (5.6)$$

$$\rho_{\vec{q}} = \sum_i e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} = \sum_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}; \quad (5.7)$$

beachte, dass $\rho_{\vec{q}=0} = N$ gerade die Teilchenzahl ergibt² Damit erhalten wir

$$W(\vec{q}, \omega) = 2\pi |V_{\vec{q}}|^2 \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (5.10)$$

²Eine konsistente Definition der Fouriertransformation für ein endliches kontinuierliches Volumen ν ist

$$\frac{1}{\nu} \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{q},0}, \quad (5.8)$$

$$\frac{1}{\nu} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \delta^3(\vec{r}). \quad (5.9)$$

In unserer Definition von ρ fehlt das Normierungsvolumen ν ; dies entspricht der Wahl $\nu = 1$ für das Quantisierungsvolumen des Impulses. Entsprechend ist überall gemäss der physikalischen Dimension die Teilchenzahl N durch die Teilchendichte $n = N/\nu$ zu ersetzen.

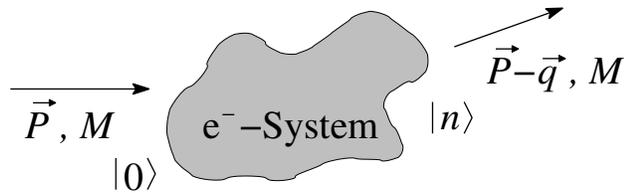


Abb. 5.1: Streuung eines Teilchens mit Impuls \vec{P} und Masse M an einem Elektronensystem im Grundzustand $|0\rangle$ mit Endzuständen $\vec{P}' = \vec{P} - \vec{q}$ und $|n\rangle$.

5.1.1 Dynamischer Strukturfaktor

Indem wir den systemspezifischen Faktor in Gl. (5.10) extrahieren, erhalten wir den *dynamischen Strukturfaktor* $S(\vec{q}, \omega)$,

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (5.11)$$

$$W(\vec{q}, \omega) = 2\pi |V_{\vec{q}}|^2 S(\vec{q}, \omega). \quad (5.12)$$

Mit Hilfe eines Streuexperimentes können wir damit etwas über die Struktur, namentlich die *Dichte-Korrelationen* im elektronischen System erfahren. Denn mit

$$\rho_{\vec{q}}(t) = e^{iHt} \rho_{\vec{q}} e^{-iHt} \quad (5.13)$$

im Heisenberg Bild ist

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt \sum_n \langle 0 | \rho_{\vec{q}} | n \rangle \langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle e^{i(E_0 - E_n + \omega)t} \quad (5.14)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dt \sum_n \underbrace{\langle 0 | e^{iE_0 t} \rho_{\vec{q}} e^{-iE_n t} | n \rangle}_{\langle 0 | \rho_{\vec{q}}(t) | n \rangle} \langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle e^{i\omega t} \quad (5.15)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dt \langle 0 | \rho_{\vec{q}}(t) \rho_{-\vec{q}}(0) | 0 \rangle e^{i\omega t} \quad (5.16)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dt S(\vec{q}, t) e^{i\omega t} \quad (5.17)$$

die Fouriertransformierte der *dynamischen Dichte-Dichte-Korrelation*

$$S(\vec{q}, t) = \langle 0 | \rho_{\vec{q}}(t) \rho_{-\vec{q}}(0) | 0 \rangle. \quad (5.18)$$

Es sind gerade diese Dichte-Korrelationen, die die *Antwort (response)* eines Systems auf viele äussere Störungen bestimmen.

5.2 Antwort des elektronischen Systems

Um etwas über ein System im Gleichgewicht in Erfahrung zu bringen, untersuchen wir dasselbe mit einer feinen Probe (die schwache Störung soll das System nicht weit aus dem Gleichgewicht treiben). Zum Beispiel können wir Informationen über Dichten, Ströme oder Spins im System bekommen,

indem wir ein geeignetes Potential an die jeweilige Grösse des Systems an-koppeln, z.B.

$$H' = \underbrace{\int d^3r \rho(\vec{r}) \phi(\vec{r}, t)}_{\sum_{\vec{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho_{-\vec{q}} \exp(-i\omega t) \phi_{\vec{q}\omega}} + \frac{1}{c} \int d^3r \vec{j}(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \dots \quad (5.19)$$

Üblicherweise treiben wir das System mit einer Mode, z.B., für eine skalare Kopplung zwischen Potential ϕ und Dichte ρ ,

$$H' = \rho_{-\vec{q}} e^{-i\omega t} \phi_{\vec{q}\omega} + \text{c.c.}, \quad (5.20)$$

und suchen eine Antwort, hier in Form einer Dichteschwankung

$$\langle \rho_{-\vec{q}}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \rho_{-\vec{q}} | \Psi(t) \rangle, \quad (5.21)$$

wobei $|\Psi(t)\rangle$ die Wellenfunktion des Systems unter dem Einfluss von H' ist,

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = (H + H') |\Psi(t)\rangle. \quad (5.22)$$

Mit $\phi(t) \propto e^{-i\omega t} e^{\eta t}$ ($\eta \rightarrow 0^+$, adiabatisches Einschalten) ist auch

$$\langle \rho_{-\vec{q}}(t) \rangle = \langle \rho_{-\vec{q}} \rangle e^{-i\omega t} e^{\eta t} \quad (5.23)$$

und wir können die *Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion* definieren,

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho_{\vec{q}\omega} \rangle}{\phi_{\vec{q}\omega}}. \quad (5.24)$$

Die Berechnung von χ folgt dem Standardverfahren der zeitabhängigen Störungstheorie: wir starten mit dem Ansatz $|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t} |n\rangle$, $a_n(-\infty) = \delta_{n0}$, und evolvieren den Zustand mit der Schrödingergleichung $i\partial_t \Psi = (H + H') \Psi$. In erster Ordnung in ϕ erhalten wir nach Integration über die Zeit (für $n \neq 0$)

$$a_n(t) = \int_{-\infty}^t dt' \dot{a}_n(t') = \frac{\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle \phi_{\vec{q}\omega}}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} e^{-i(\omega - \omega_{n0} + i\eta)t} - \frac{\langle n | \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle \phi_{-\vec{q}-\omega}}{\omega + \omega_{n0} - i\eta} e^{-i(\omega + \omega_{n0} - i\eta)t}.$$

Aus

$$\begin{aligned} \langle \rho_{-\vec{q}}(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \rho_{-\vec{q}} | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_n (\langle 0 | \rho_{-\vec{q}} | n \rangle a_n(t) e^{-i\omega_{n0}t} + \langle n | \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle a_n^*(t) e^{i\omega_{n0}t}) \end{aligned}$$

finden wir durch Einsetzen von $a_n(t)$

$$\langle \rho_{\vec{q}}(t) \rangle = \phi_{\vec{q}\omega} e^{-i\omega t} e^{\eta t} \sum_n \left[\frac{|\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{|\langle n | \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle|^2}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right] \quad (5.25)$$

und wir finden³ die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}, \omega) &= \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right] \\ &= \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Der Vergleich mit Gl. (5.11) ergibt sofort⁴

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \int_0^\infty d\omega' S(\vec{q}, \omega') \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right], \quad (5.27)$$

$$\text{Im}\chi(\vec{q}, \omega) = -\pi [S(\vec{q}, \omega) - S(\vec{q}, -\omega)]. \quad (5.28)$$

Bemerkenswerterweise hängt die Antwort $\chi(\vec{q}, \omega)$ eines Systems auf äussere Störungen eng mit der Struktur bzw. den Korrelationen (Fluktuationen) im System im Gleichgewicht zusammen.

5.2.1 Summenregeln

f -Summenregel

Die f -Summenregel⁵ für den Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$ und die Dichte-Korrelation $\chi(\vec{q}, \omega)$ lautet (N bezeichnet die Teilchenzahl)

$$\int_0^\infty d\omega \omega S(\vec{q}, \omega) = \frac{Nq^2}{2m}, \quad (5.29)$$

$$\chi(\vec{q}, \omega \rightarrow \infty) = \frac{Nq^2}{m\omega^2}. \quad (5.30)$$

Beweis: Die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho_{\vec{q}} = -i [\rho_{\vec{q}}, H] = -i \vec{q} \cdot \vec{j}_{\vec{q}}, \quad (5.31)$$

$$\partial_t \rho = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}, \quad (5.32)$$

³Benutze die Zeitumkehrinvarianz: zu $|n\rangle$, E_n, ψ_n und \vec{q} gibt es $|m\rangle$, $E_m = E_n, \psi_m = \psi_n^*$ und $-\vec{q}$.

⁴Beachte, dass $S(\vec{q}, -|\omega|) = 0$, vgl. Gl. (5.11).

⁵Der Buchstabe f steht für die Oszillatorstärke, vgl. Gl. (5.38)

die die Dichte $\rho_{\vec{q}}$ mit der Stromdichte

$$\vec{j}_{\vec{q}} = \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\vec{p}_i}{m} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \frac{\vec{p}_i}{m} \right) \quad (5.33)$$

$$= \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\vec{k} + \vec{q}/2}{m} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} \quad (5.34)$$

verknüpft, ist Ausdruck der Teilchenzahlerhaltung. Weiter ist der Doppelkommutator

$$[[\rho_{\vec{q}}, H], \rho_{-\vec{q}}] = [\vec{q} \cdot \vec{j}_{\vec{q}}, \rho_{-\vec{q}}] = \frac{Nq^2}{m}. \quad (5.35)$$

Seine Evaluation im Grundzustand ergibt

$$\begin{aligned} \langle 0 | [[\rho_{\vec{q}}, H], \rho_{-\vec{q}}] | 0 \rangle &= \sum_n \langle 0 | \vec{q} \cdot \vec{j}_{\vec{q}} | n \rangle \langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle \\ &\quad - \langle 0 | \rho_{-\vec{q}} | n \rangle \underbrace{\langle n | \vec{q} \cdot \vec{j}_{\vec{q}} | 0 \rangle}_{=-\omega_{n0} \langle n | \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle} \\ &= \sum_n \omega_{n0} \{ |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 + |\langle n | \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \} \\ &= \underbrace{2 \sum_n \omega_{n0} |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2}_{2 \int_0^\infty d\omega \omega S(\vec{q}, \omega)} = \frac{Nq^2}{m}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Schliesslich ist mit Gl. (5.27)

$$\chi(\vec{q}, \omega \rightarrow \infty) = \frac{2}{\omega^2} \int_0^\infty d\omega' \omega' S(\vec{q}, \omega') = \frac{Nq^2}{m\omega^2}. \quad (5.37)$$

Man bezeichnet

$$f_{0n} = \frac{2m}{q^2} \omega_{n0} |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \quad (5.38)$$

als *Oszillatorstärke* des Übergangs $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ und mit Gl. (5.36) gilt

$$\sum_n f_{0n} = N. \quad (5.39)$$

Kompressibilitäts-Summenregel

Die Kompressibilitäts-Summenregel (in Abwesenheit von langreichweitiger Wechselwirkung)⁶ lautet (Beweis, siehe später)

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \int_0^\infty d\omega \frac{S(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{N}{2ms^2}, \quad (5.40)$$

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \chi(\vec{q}, 0) = -\frac{N}{ms^2} = -Nn\kappa \quad (5.41)$$

mit der Teilchendichte n , der Schallgeschwindigkeit s ,

$$s^2 = \frac{1}{\kappa mn} = \frac{N}{m} \frac{\partial \mu}{\partial N}, \quad (5.42)$$

und der Kompressibilität

$$\kappa = \frac{1}{Nn} \frac{\partial N}{\partial \mu}. \quad (5.43)$$

5.2.2 Analytizität, Anregungen und Kausalität

Pole und Schnitte

Wir betrachten die Analytizitätsstruktur von $\chi(\vec{q}, \omega)$ in Gl. (5.26) in der komplexen ω -Ebene. $\chi(\vec{q}, \omega)$ besitzt unendlich viele⁷ Pole bei

$$\omega = \pm\omega_{n0} - i\eta, \quad \eta \rightarrow 0^+, \quad (5.44)$$

d.h. in der unteren Hälfte \mathbb{C}^- der komplexen Ebene. Die Energien ω_{n0} sind gerade die Anregungsenergien $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ derjenigen Zustände $|n\rangle$, welche durch die Störung $\phi(\vec{q}, \omega)$ an $|0\rangle$ koppeln (\rightarrow endliche Matrixelemente $\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle$). Die Anregungen können individuelle Teilchen im System betreffen, z.B. die Paaranregungen in Abb. 4.4 mit kontinuierlichem Spektrum (Schnitte von $\chi(\omega)$ bei fixem \vec{q}), oder kollektiver Natur sein, wie z.B. Schallwellen (diskrete Pole von $\chi(\omega)$ bei fixem \vec{q}). Die Antwortfunktion $\chi(\vec{q}, \omega)$ enthält damit in ihrer Analytizitätsstruktur die Information über die Anregungen im System, welche durch $\phi(\vec{q}, \omega)$ aktiviert werden können.

Wir können diesen Sachverhalt folgendermassen verstehen: Sei $\mathcal{L}(\rho)$ die Lagrangedichte des Systems und das skalare Potential ϕ eine externe Störung,

⁶Eine korrespondierende Summenregel gilt für geladene Teilchen.

⁷genauer, so viele, wie es Zustände $|n\rangle$ des Vielteilchenproblems gibt.

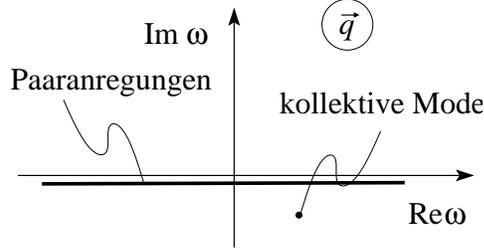


Abb. 5.2: Analytizität von χ in der komplexen ω -Ebene.

welche an die Ladung ρ koppelt. Dann ergibt sich durch Variation nach ρ die Bewegungsgleichung für ρ ,

$$\frac{\delta}{\delta \rho} (\mathcal{L} - \rho \phi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\rho}} = \phi. \quad (5.45)$$

Das System antwortet auf die Störung ϕ mit einer Deformation $\langle \rho \rangle$, welche für kleine ϕ linear in ϕ ist. Damit erhalten wir eine "Polarisierung" des Systems,

$$\langle \rho(\omega) \rangle = \chi(\omega) \phi(\omega), \quad \langle \rho(t) \rangle = \int dt' \chi(t - t') \phi(t'), \quad (5.46)$$

wobei χ die Polarisierbarkeit des Systems beschreibt. Die Deformation $\langle \rho \rangle$ wird aus elementaren Anregungen aufgebaut; entsprechend muss χ die Information über diese Anregungen enthalten.

Betrachte jetzt die Konsequenz eines Poles in $\chi(\vec{q}, \omega)$ bei $\omega_{\vec{q}} - i\Gamma_{\vec{q}}$. Dann ist $\chi = \infty$ und eine beliebig kleine Störung $\phi = \phi_0 \exp(-i\omega_{\vec{q}} t) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})$ erzeugt eine beliebig grosse Antwort $\langle \rho \rangle \exp(-i\omega_{\vec{q}} t) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})$. Die Schwingung mit Energie $\omega_{\vec{q}}$ und Impuls \vec{q} ist eine Eigenschwingung des Systems (kollektive Mode), deren Dämpfung durch den Imaginärteil $\Gamma_{\vec{q}}$ beschrieben ist. Ebenso identifiziert man einen Schnitt in $\chi(\vec{q}, \omega)$ als kontinuierliches Spektrum der Paaranregungen. Die Abbildung 5.2 zeigt die Analytizitätsstruktur von $\chi(\vec{q}, \omega)$ bei festen \vec{q} .

Wie kommen wir von den Polen bei $\omega = \pm\omega_{n0} - i\eta$, $\omega_{n0} \in \mathbb{R}$, $\eta = 0^+$, auf die Analytizitätsstruktur mit Schnitten (\rightarrow Paaranregungen) und Polen (\rightarrow kollektive Moden) in \mathbb{C}^- ? Die Pole $\omega = \pm\omega_{n0} - i\eta$ liegen dicht und definieren im thermodynamischen Limes einen Schnitt unterhalb der reellen Achse (in der mesoskopischen Physik kann genau dieser Limes nicht vollzogen werden). $\chi(\omega)$ ist analytisch auf jeder Seite des Schnittes, χ^I in $\mathbb{C}^+ \cup \mathbb{R}$ und χ^{II} in \mathbb{C}^- , vgl. Abb. 5.3. Mit Gl. (5.26) folgt $\chi^I(\omega) = [\chi^{II}(\omega - 2i\eta)]^*$ und wegen $\text{Im} \chi^I \neq 0$ springt $\chi(\omega)$ auf der reellen Achse um

$$\chi^I - \chi^{II} = 2i \text{Im} \chi^I = -2\pi i [S(\vec{q}, \omega) - S(\vec{q}, -\omega)] \quad (5.47)$$

und der Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$ beschreibt gerade den Sprung in χ bzw. $\text{Im}\chi$ am Schnitt. In der unteren komplexen Halbebene ist $\chi(\omega) = \chi^{\text{II}}(\omega)$ analytisch. Die Pole, welche die kollektiven Moden beschreiben, finden wir indem wir $\chi^{\text{I}}(\omega)$ durch den Schnitt in die untere Halbebene \mathbb{C}^- analytisch zu $\chi_{\text{ac}}^{\text{I}}(\omega)$ fortsetzen.⁸ Beachte, dass dann $\chi_{\text{ac}}^{\text{I}}(\omega) \neq \chi^{\text{II}}(\omega)$. Insbesondere enthält $\chi^{\text{I}}(\omega)$ auf dem Schnitt bereits alle Information um $\chi_{\text{ac}}^{\text{I}}(\omega)$ auf \mathbb{C}^- zu finden. Es sei zum Beispiel $\chi^{\text{I}} \sim a(\omega)e^{-i\delta(\omega)}$ mit

$$a^2 = \frac{\Gamma_{\vec{q}}^2}{(\omega - \omega_{\vec{q}})^2 + \Gamma_{\vec{q}}^2}, \quad \delta = \arctan \frac{\Gamma_{\vec{q}}}{\omega - \omega_{\vec{q}}},$$

dann hat χ^{I} bei analytischer Fortsetzung auf \mathbb{C}^- einen Pol bei $\omega_{\vec{q}} - i\Gamma_{\vec{q}}$, $\chi_{\text{ac}}^{\text{I}} \sim \Gamma_{\vec{q}}/(\omega - \omega_{\vec{q}} + i\Gamma_{\vec{q}})$. Beachte auch den Zusammenhang mit realen/virtuellen Prozessen im System:

Der Imaginärteil $\text{Im}\chi \propto S(\vec{q}, \omega)$ von χ beschreibt reale dissipative Übergänge bei denen die Energie ω und der Impuls \vec{q} von der Probe ins System übertragen wird; der zugehörige Feynmangraph ist in Abb. 5.4 gezeigt. Diesen realen Prozessen gegenüber stehen die virtuellen Prozesse, welche die Eigenschaften des Systems renormieren. Die beiden Prozesse hängen via Sokhotski's Formel $1/(x \pm i\eta) = P(1/x) \mp i\pi\delta(x)$ zusammen; der Term

$$\frac{|\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2}{\omega \mp \omega_{n0} + i\eta} \quad (5.48)$$

ergibt einen Hauptwert P als Realteil und eine Delta-Funktion $i\pi\delta(\omega \mp \omega_{n0})$ als Imaginärteil. Letzterer beschreibt die Energieerhaltung (Fermi's Goldene Regel) im realen Prozess. Das Matrixelement $|\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2$ gibt die Stärke des Überganges. Als Beispiel erinnere man sich an den Zerfall eines

⁸Der Index steht für *analytical continuation*.

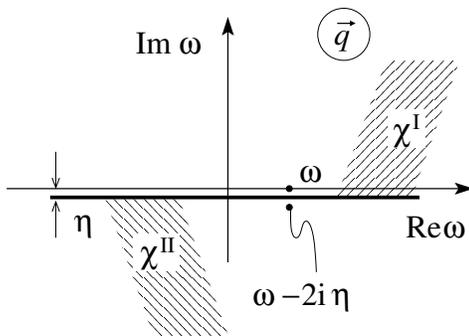


Abb. 5.3: Die Funktionen χ_{I} und χ_{II} sind analytisch in der oberen und unteren komplexen Halbebene. Der Imaginärteil $\text{Im}\chi$ springt über dem Schnitt. Die Pole in χ ergeben sich aus der analytischen Fortsetzung von χ_{I} in die untere Halbebene.

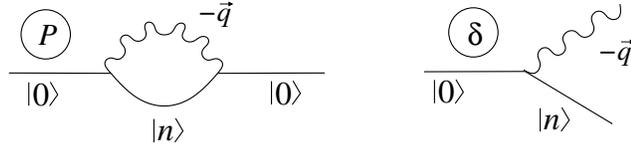


Abb. 5.4: Reale (virtuelle) Anregungen $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ ($\rightarrow |0\rangle$) mit Energie $\omega_{\vec{q}}$ und Impuls \vec{q} dargestellt als Feynmangraphen (links/rechts). Mit den virtuellen/realen Prozessen assoziiert ist der Hauptwert P und die δ -Funktion welche die Energieerhaltung beschreibt.

angeregten Zustandes im Atom (realer Prozess, ergibt die Lebenszeit des Niveaus) und dem assoziierten Lambshift (virtueller Prozess, ergibt einen Shift des Niveaus).

Kausalität

Eine fundamentale Konsequenz der Analytizitätsstruktur ist die *Kausalität*. Berechne dazu das Integral

$$\chi(\vec{q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \chi(\vec{q}, \omega) e^{-i\omega t}; \quad (5.49)$$

durch Schliessen der Contour für $t < 0$ ($t > 0$) in der oberen (unteren) ω -Halbebene, siehe Abb. 5.5, erhält man $\chi = 0$ ($\chi \neq 0$). Die Antwortfunktion

$$\chi(\vec{q}, t) = \Theta(t) \chi(\vec{q}, t) \quad (5.50)$$

ist kausal in dem Sinne, dass ein Stoss $\phi(\vec{q}, t) = \phi_{\vec{q}} \delta(t)$ zur Zeit $t = 0$ eine Systemantwort $\rho(\vec{q}, t) = \phi_{\vec{q}} \chi(\vec{q}, t) \Theta(t)$ für positive Zeiten $t > 0$ erzeugt.

Kramers-Kronig-Relationen

Die Kramers-Kronig-Relationen verbinden die Real- und Imaginärteile einer kausalen Antwortfunktion gemäss

$$\text{Re}[\chi(\vec{q}, \omega)] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \text{Im}[\chi(\vec{q}, \omega')] P\left(\frac{1}{\omega - \omega'}\right), \quad (5.51)$$

$$\text{Im}[\chi(\vec{q}, \omega)] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \text{Re}[\chi(\vec{q}, \omega')] P\left(\frac{1}{\omega - \omega'}\right). \quad (5.52)$$

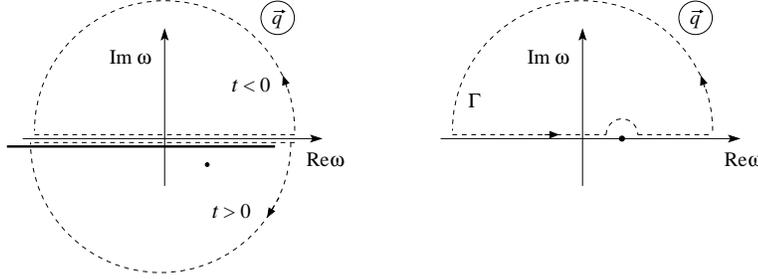


Abb. 5.5: Integrationscontouren zur Berechnung von $\chi(t)$ für negative und positive Zeiten (links) und Contour Γ zur Berechnung der Kramers-Kronig Relation (rechts).

Sie folgen sofort aus der Integration entlang der Contour Γ in Abb. 5.5, die keine Singularitäten einschliesst,

$$0 = \int_{\Gamma} \frac{\chi(\vec{q}, \omega')}{\omega - \omega'} d\omega'. \quad (5.53)$$

Beachte die Allgemeinheit der obigen Analyse: Es kopple die Störung \mathcal{S} an die Observable σ des Systems, $H' = \sigma\mathcal{S}$. Für kleines \mathcal{S} ist die Antwort linear in \mathcal{S} , $\langle \sigma \rangle \propto \mathcal{S}$ und wir können die *Polarisierbarkeit* $\alpha = \langle \sigma \rangle / \mathcal{S}$ definieren. α enthält wie χ die Information über alle Systemanregungen, welche sich durch \mathcal{S} anregen lassen, d.h., welche ein Matrixelement $|\langle n | \sigma_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \neq 0$ besitzen. Zu α gehört dann die Strukturfunktion $\langle \sigma(t) \sigma(0) \rangle$.

5.3 Strukturfaktor $S^0(\vec{q}, \omega)$ im Elektronengas

Zur Berechnung des Strukturfaktors $S^0(\vec{q}, \omega) = \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_n)$ suchen wir für einen gegebenen Impuls \vec{q} die Matrixelemente⁹

$$\langle \rho_{-\vec{q}} \rangle = \langle n | c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} | 0 \rangle \quad (5.54)$$

mit $|\text{vac}\rangle$ leeres Vakuum)

$$|0\rangle = \prod_{p < p_F, \sigma} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad (5.55)$$

$$\rho_{-\vec{q}} = \sum_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma}. \quad (5.56)$$

⁹Der Index '0' erinnert daran, dass diese Grössen für ein freies Elektronengas gelten.

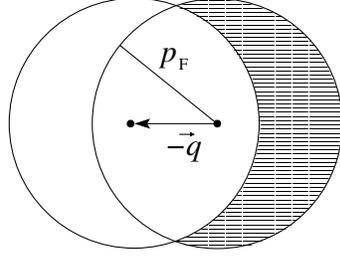


Abb. 5.6: Um \vec{q} verschobene Fermikugeln. Das Gebiet $p < p_F$ und $|\vec{p} + \vec{q}| > p_F$, in dem Teilchen-Loch-Paare mit Impuls \vec{q} angeregt werden können, ist schraffiert gezeichnet. Abb. aus [Pin66].

Falls \vec{p} in $|0\rangle$ besetzt ist und $\vec{p} + \vec{q}$ unbesetzt, dann ist für den angeregten Zustand $|n\rangle = c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} |0\rangle$ mit einem von \vec{p} nach $\vec{p} + \vec{q}$ angeregten Elektron (vgl. Abb. 5.6) das Matrixelement $\langle n | c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} | 0 \rangle = 1$ und die zugehörige Anregungsenergie ist

$$\omega_{n0} = \omega_{\vec{p},\vec{q}}^0 = \frac{(\vec{p} + \vec{q})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} + \frac{q^2}{2m}. \quad (5.57)$$

Der dynamische Strukturfaktor ist dann gegeben als

$$\begin{aligned} S^0(\vec{q}, \omega) &= \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}) \\ &= \sum_{p < p_F, |\vec{p} + \vec{q}| > p_F} 1 \cdot \delta(\omega - \omega_{n0}) \\ &= V \rho(\varepsilon_F^0) \begin{cases} \omega/2qv_F^0, & 0 \leq \omega - qv_F^0 \leq -\frac{q^2}{2m}, \\ \frac{p_F}{2q} \left[1 - \left(\frac{\omega}{qv_F^0} - \frac{q}{2p_F} \right)^2 \right], & -\frac{q^2}{2m} \leq \omega - qv_F^0 \leq \frac{q^2}{2m}, \\ 0, & \frac{q^2}{2m} \leq \omega - qv_F^0; \end{cases} \end{aligned} \quad (5.58)$$

hier bezeichnet V das Systemvolumen und $\rho(\varepsilon_F^0) = 3n/2\varepsilon_F^0$ ist die Zustandsdichte an der Fermikante, $V\rho(\varepsilon_F^0) = 3N/2\varepsilon_F^0$ ist extensiv. Der Strukturfaktor $S^0(\vec{q}, \omega)$ ist in Abb. 5.7 skizziert; gemäss den Überlegungen im Abschnitt 5.2.2 erhalten wir damit auch sofort das Anregungsspektrum.

Das Einsetzen in Gl. (5.28) gibt uns sofort die Antwortfunktion $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ des freien e^- -Gases. Die Suszeptibilität χ^0 wird uns später direkt auf die Dielektrizitätskonstante des e^- -Gases in Hartree-Fock Approximation und in RPA (*Random Phase Approximation*) führen.

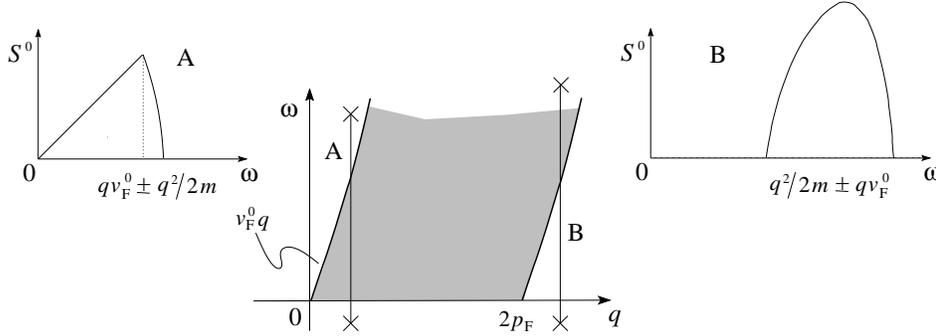


Abb. 5.7: Oben: Dynamischer Strukturfaktor $S^0(q, \omega)$ für das freie Elektronengas: (A) $q < 2p_F$, (B) $q > 2p_F$, und Position im Paaranregungsspektrum. Abb. aus [Pin66].

5.3.1 Paar- und Einteilchen-Anregungen

In der Festkörperphysik unterscheiden wir zwischen Experimenten in denen die Teilchenzahl nicht verändert wird und Experimenten bei denen dem System Teilchen zugeführt oder entnommen werden. Das Anregungsspektrum eines abgeschlossenen Systems mit fixer Teilchenzahl ist durch das *Paaranregungsspektrum*, vgl. die Abbn. 4.4 und 5.7, gegeben.

Experimente, wie z.B. das *Tunnelexperiment* in Abb. 5.8 oder die Photoemission, welche die Teilchenzahl ändern, involvieren das elementare *Teilchenanregungsspektrum*, siehe Abb. 5.8. Indem wir im Tunnelexperiment die Spannung V manipulieren, ändern wir die relative Lage des elektrochemischen Potentials von Probe und Reservoir. Im Gleichgewicht hat das letzte Teilchen in der Probe (mit Energie $E(N) - E(N-1) = \mu$) die gleiche Energie wie das letzte Teilchen im Reservoir. Eine Erhöhung von V drückt Elektronen vom Reservoir in die Probe. Die Teilchen müssen in der Probe einen freien Zustand finden und entsprechend ist das Teilchenanregungsspektrum relevant. Umgekehrt liefert eine Erniedrigung von V einen Teilchentransfer von der Probe ins Reservoir, der analog mit dem Lochanregungsspektrum zusammenhängt. Zusammen ergibt sich das elementare *Quasiteilchenanregungsspektrum* (*single (quasi-)particle excitation spectrum*) in Abb. 5.8.

Beachte die Wichtigkeit des Reservoirs, welches reversibel Teilchen der Energie μ liefern und absorbieren kann. Ganz anders dagegen geschieht der Teilchentransfer im Photoemissionsexperiment, wo die Elektronen aus dem Ma-

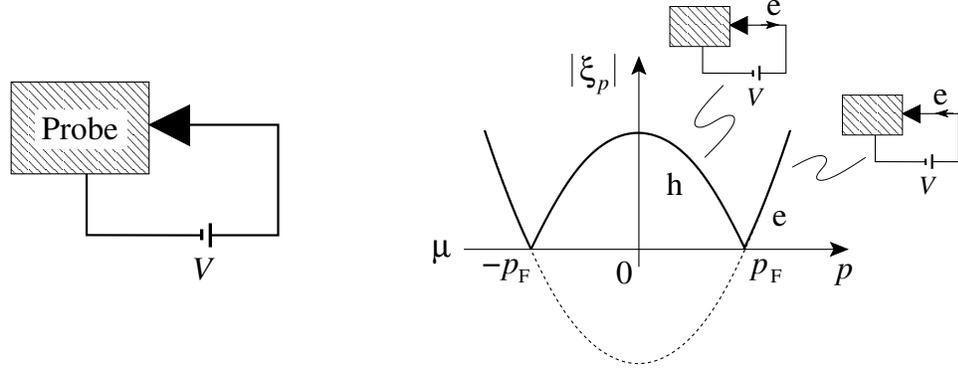


Abb. 5.8: Schematisches Tunneln zwischen Spitze und Probe getrieben durch die Spannung V . Rechts: Einteilchenspektrum (single particle excitation spectrum) welches im Tunnelexperiment getestet wird.

terial in einem schnellen Prozess hinausgeschlagen werden. Der Prozess ist weit weg vom Gleichgewicht, nicht reversibel und die Energiebilanzen sind verschieden.

5.4 Struktur und Antwort bei endlichen Temperaturen

Die Ausdrücke Gl. (5.11) und (5.26) für $S(\vec{q}, \omega)$ und $\chi(\vec{q}, \omega)$ lassen sich leicht auf endliche Temperaturen $T > 0$ verallgemeinern: Bei $T > 0$ ist nicht nur der Grundzustand $|0\rangle$ besetzt, sondern im statistischen Mittel auch die angeregten Zustände $|m\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(-\beta E_m)$. Daraus ergibt sich an Stelle von Gl. (5.26) der Strukturfaktor in der Form

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | m \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (5.59)$$

mit $\omega_{nm} = E_n - E_m$. Zum Beispiel gilt für das freie Elektronengas

$$S^0(\vec{q}, \omega) \Big|_{T=0} = \sum_{\substack{p < p_F, \\ |\vec{p} + \vec{q}| > p_F}} \delta(\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0), \quad (5.60)$$

$$S^0(\vec{q}, \omega) \Big|_{T>0} = \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}^0 [1 - n_{\vec{p}+\vec{q}}^0] \delta(\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0), \quad (5.61)$$

mit der Fermifunktion $n_p^0 = f(\varepsilon_{\vec{p}})$. Ebenso erhalten wir anstelle von Gl. (5.26) für die Suszeptibilität den Ausdruck

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | m \rangle|^2 \frac{2\omega_{nm}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{nm}^2}; \quad (5.62)$$

der Zusammenhang zwischen $\chi(\vec{q}, \omega)$ und $S(\vec{q}, \omega)$ ist weiterhin gültig

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S(\vec{q}, \omega) \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right]. \quad (5.63)$$

Die Suszeptibilität $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ des freien Elektronengases bei endlichen Temperaturen folgt aus der Kombination von (5.61) und (5.63). Die Suszeptibilität $\chi(\vec{q}, \omega)$ ist kausal und es gelten die Kramers-Kronig-Relationen. In Gl. (5.62) geht das Integral jetzt auch über negative Frequenzen: Während $S(\vec{q}, -|\omega|) = 0$ bei $T = 0$, gilt jetzt i.a. $S(\vec{q}, -|\omega|) \neq 0$ für $T > 0$. Dies erklärt sich aus der Tatsache, dass das System bei endlichen Temperaturen auch Energie an die externe Probe (das streuende Teilchen) abgeben kann. Allerdings ist das Gewicht in S für $\omega < 0$ exponentiell klein,

$$S(\vec{q}, -\omega) = \exp(-\beta\omega) S(\vec{q}, \omega). \quad (5.64)$$

Die Richtigkeit dieser Beziehung wird gezeigt, indem man im Ausdruck (5.59) für $S(\vec{q}, \omega)$ die Indizes m und n vertauscht,

$$S(\vec{q}, \omega) = e^{\beta\omega} S(-\vec{q}, -\omega) = e^{\beta\omega} S(\vec{q}, -\omega), \quad (5.65)$$

wobei wir in der letzten Gleichung die Invarianz unter Zeitumkehr $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ benutzt haben.

5.4.1 Fluktuations-Dissipations-Theorem

Mit Gl. (5.64) finden wir einen wichtigen Zusammenhang zwischen den Korrelationen im System (durch S beschrieben) und der dissipativen Antwort des Systems (durch $\text{Im}\chi = \chi''$ beschrieben). Zusammen mit Gl. (5.62) finden wir

$$\chi''(\vec{q}, \omega) = -\pi [S(\vec{q}, \omega) - S(\vec{q}, -\omega)] = -\pi(1 - e^{-\beta\omega})S(\vec{q}, \omega). \quad (5.66)$$

Symmetrisieren ergibt

$$\tilde{S}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2} [S(\vec{q}, \omega) + S(\vec{q}, -\omega)] = \frac{1 + \exp(-\beta\omega)}{2} S(\vec{q}, \omega) \quad (5.67)$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \chi''(\vec{q}, \omega) \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right). \quad (5.68)$$

Damit erhalten wir für den Korrelator

$$\langle \rho_{-\vec{q}} \rho_{\vec{q}} \rangle = S(\vec{q}, t=0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \Big|_{t=0} S(\vec{q}, \omega) \quad (5.69)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{S}(\vec{q}, \omega) = - \int_0^{\infty} \frac{d\hbar\omega}{\pi} \chi''(\vec{q}, \omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right). \quad (5.70)$$

Gleichung (5.70) ist das berühmte *Fluktuations-Dissipations-Theorem (FDT)*: Es verbindet die Polarisierbarkeit $\chi(\vec{q}, \omega) = \langle \rho_{\vec{q}\omega} \rangle / \phi_{\vec{q}\omega}$ eines Systems unter dem Einfluss eines äusseren Feldes $\phi_{\vec{q}\omega}$ mit dem Korrelator $\langle \rho_{-\vec{q}} \rho_{\vec{q}} \rangle$, der die Fluktuationen im Gleichgewicht beschreibt.

Beispiel: Elastisches Medium

Die Lagrangedichte eines elastischen Mediums mit Auslenkung $u(\vec{r}, t)$ in d Dimensionen ist gegeben durch

$$\mathcal{L}_0 = \int d^d r \left\{ \frac{m}{2} [\partial_t u]^2 - \frac{c}{2} [\vec{\nabla} u]^2 \right\}. \quad (5.71)$$

Falls weiter die externe Kraft $f(\vec{r}, t)$ an das System koppelt, $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \int d^d r f u$, erhält man die Euler-Lagrange Gleichungen

$$m \partial_t^2 u - c \nabla^2 u = f. \quad (5.72)$$

Die Green'sche Funktion für das Problem ist durch die Wahl einer Kraftquelle der Form $f = \delta(\vec{r}) \delta(t)$ definiert,

$$[m \partial_t^2 + \eta \partial_t - c \nabla^2] G(\vec{r}, t) = 1, \quad (5.73)$$

$$G(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{c q^2 - m \omega^2 - i \omega \eta}. \quad (5.74)$$

Dabei beschreibt η eine Dämpfung des Mediums durch Dissipation auf Grund der Anwesenheit zusätzlicher (in \mathcal{L}_0 vernachlässigter) Freiheitsgrade. Die thermischen und Quantenfluktuationen des Systems werden dann durch den Korrelator

$$\langle u_{-\vec{q}} u_{\vec{q}} \rangle = \int_0^{\infty} \frac{d\hbar\omega}{\pi} \frac{\eta \omega}{[c q^2 - m \omega^2]^2 + \eta^2 \omega^2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \quad (5.75)$$

$$= \begin{cases} \frac{\hbar}{\eta} \int_0^{\infty} \frac{d(\eta\omega)}{2\pi} \frac{1}{[c q^2 - m \omega^2]^2 + \eta^2 \omega^2}, & T \rightarrow 0, \\ 4T \int_0^{\infty} \frac{d\eta\omega}{2\pi} \frac{1}{[c q^2 - m \omega^2]^2 + \eta^2 \omega^2}, & T \gg \omega \end{cases} \quad (5.76)$$

beschrieben. Mit der Übersetzung $\phi \leftrightarrow f$, $\rho \leftrightarrow u$, $\chi \leftrightarrow G$ erkennen wir sofort den Zusammenhang zwischen der mikroskopischen Analyse im Elektronensystem und der entsprechenden Behandlung des makroskopischen elastischen Systems, zwei physikalisch sehr verschiedene Themata mit der identischen unterliegenden Lösungsstruktur.

5.4.2 Summenregeln bei endlicher Temperatur

Die Summenregeln aus Abschnitt 5.2.1 verallgemeinern sich bei endlichen Temperatur T zu (s_{iso} bezeichnet die isotherme Schallgeschwindigkeit)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega S(\vec{q}, \omega) = \frac{Nq^2}{2m}, \quad (5.77)$$

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{S(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{N}{2m s_{\text{iso}}^2}. \quad (5.78)$$

Kapitel 6

Fermi-Liquid-Theorie

6.1 Grundkonzepte

Die *Fermi-Liquid-Theorie (FLT)* ist eine allgemeine Theorie für entartete Fermisysteme, z.B. das elektronische System im Festkörper oder ^3He . Das elektronische System ist atypisch: die e^-e^- -Wechselwirkung (WW) ist langreichweitig und es ergeben sich spezifische Besonderheiten. ^3He ist dagegen ein ungeladenes Fermisystem und damit typisch. Wir behandeln zuerst den Fall ungeladener Systeme und gehen danach auf die Besonderheiten der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung ein.¹

6.1.1 Quasiteilchen

Der Grundgedanke beim Übergang vom Fermigas (ohne WW) zur Fermiflüssigkeit (mit WW) ist es, den Hauptanteil der WW in die Teilchen zu inkorporieren, so dass wir an Stelle von stark (= voll) wechselwirkenden Teilchen nur noch schwach wechselwirkende *Quasiteilchen* behandeln müssen, vgl., die schematische Darstellung in Abb. 6.1.

Dieser Übergang von Teilchen zu Quasiteilchen kann vollzogen werden, wenn beim Einschalten der Wechselwirkung eine bijektive Beziehung zwischen den Eigenzuständen des nicht wechselwirkenden und des wechselwirkenden Systems etabliert werden kann,

¹Das Kapitel folgt in groben Zügen der Ref.[[Pin66](#)].

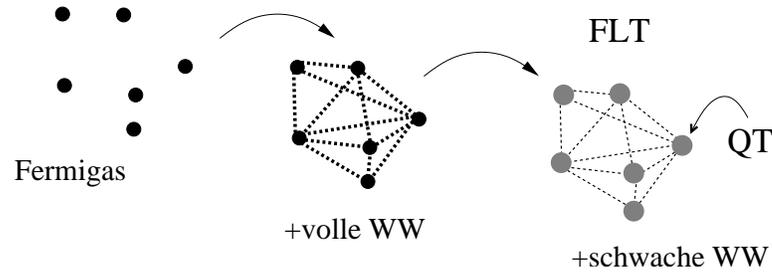


Abb. 6.1: Schematische Darstellung der Grundidee der Fermi-Liquid Theorie (FLT): Währenddem die Fermionen im Fermigas (FG) frei/unabhängig sind (bis auf die statistische ‘Wechselwirkung’) sind die Teilchen in der Fermiflüssigkeit einer starken Wechselwirkung (WW) ausgesetzt. In der FLT werden Quasiteilchen (QT) so eingeführt, dass die effektive WW zwischen ihnen schwach ist.

$$\begin{aligned}
 \text{ideales nicht-ww. System} &\rightarrow \text{reales ww. System,} \\
 |0\rangle_0 &\rightarrow |0\rangle, \\
 |\vec{p}\rangle_0 = |0\rangle + \text{Teilchen } \vec{p} &\rightarrow |\vec{p}\rangle = |0\rangle + \text{Quasiteilchen } \vec{p}, \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

und analog für ein freies Loch bzw., ein wechselwirkendes Quasiloche. Dabei bezeichnen $|0\rangle_0$ und $|0\rangle$ die Grundzustände des wechselwirkungsfreien und des wechselwirkenden Systems. Das Schema bricht zusammen, wenn wir ein “*level crossing*” finden, z.B., wenn der freie Grundzustand $|0\rangle_0$ durch Einschalten der Wechselwirkung in einen Zustand $|0\rangle_{\text{evol}}$ übergeht, der nicht der echte Grundzustand des wechselwirkenden Systems ist, $|0\rangle \neq |0\rangle_{\text{evol}}$. Dies geschieht typischerweise bei Phasenübergängen, zum Beispiel ist dann der Grundzustand des wechselwirkenden Systems:

- $|0\rangle = |\text{SC}\rangle$: Supraleitender Grundzustand,
- $|0\rangle = |(\text{C})\text{DW}\rangle$: Grundzustand mit (Ladungs)Dichtewelle.
- $|0\rangle = |\text{SDW}\rangle$: Grundzustand mit Spindichtewelle,

Die Quasiteilchenzustände $|\vec{p}\rangle$, die aus den freien Teilchenzuständen entstehen, sind allerdings im allgemeinen keine echten Eigenzustände des Systems; Quasiteilchen zerfallen (langsam) auf Grund der schwachen verblei-

benden Wechselwirkung. Dieser Zerfall muss mit der Zeitskala des adiabatischen Einschaltens der Wechselwirkung verglichen werden. Glücklicherweise geht die Lebensdauer der Quasiteilchen wegen der Pauliblockade wie $1/(\varepsilon - \varepsilon_F)^2 \rightarrow \infty$, wenn wir niederenergetische Anregungen in der Nähe der Fermienergie betrachten,

$$\tau_{\text{qp}}(\varepsilon) \sim \frac{\hbar\varepsilon_F}{(\varepsilon - \varepsilon_F)^2}, \quad |\varepsilon - \varepsilon_F| \rightarrow 0. \quad (6.2)$$

Deshalb sind die Quasiteilchen nur in der Nähe der Fermienergie ε_F wohl definiert und die FLT beschreibt die Niederenergiephysik des Fermisystems.

6.1.2 Energiefunktional der Fermi Flüssigkeit

Temperatur $T = 0$

Die $T = 0$ -FLT wird aufgebaut auf die *Verteilungsfunktion* $n_{\vec{p}}$ und das *Energiefunktional*

$$E[n_{\vec{p}}] = E_0 + \sum_{\vec{p}} \varepsilon_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}'}, \quad (6.3)$$

wobei E_0 die Energie des Grundzustandes ist. Hierbei wird die Verteilungsfunktion $n_{\vec{p}}$ durch ihre Differenz zur trivialen *Grundzustandsverteilungsfunktion*

$$n_{\vec{p}}^0 = f(T = 0, \varepsilon_{\vec{p}}) = \Theta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F) \quad (6.4)$$

ausgedrückt,

$$\delta n_{\vec{p}} = n_{\vec{p}} - n_{\vec{p}}^0. \quad (6.5)$$

Der Ansatz (6.3) ist ein phenomenologischer; die Parameter können durch Vergleich mit experimentellen Daten gefunden werden. Alternativ lassen sich die Parameter aus einer mikroskopischen Betrachtung herleiten, wodurch der phenomenologische Ansatz (6.3) mikroskopisch begründet wird. Die Ableitung

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \left. \frac{\partial E}{\partial (\delta n_{\vec{p}})} \right|_{\delta n_{\vec{p}}=0} \quad (6.6)$$

gibt uns die Energie des Quasiteilchens (QT) mit Impuls \vec{p} bei $\delta n_{\vec{p}} = 0$, d.h. $\varepsilon_{\vec{p}}$ ist die Energie eines isolierten QT über dem Grundzustand. Da nur QT mit $\varepsilon_{\vec{p}} \sim \varepsilon_F$ interessieren, schreiben wir (für ein isotropes System)

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon_F + (p - p_F)v_F. \quad (6.7)$$

Dabei ist v_F ein neuer Parameter, währenddem p_F weiterhin durch die Dichte n des elektronischen Systems gegeben ist: im idealen Gas ist $v_F^0 = p_F^0/m$, aber im realen System ist²

$$v_F = p_F/m^*, \quad p_F^3 = 3\pi^2 n = (p_F^0)^3. \quad (6.8)$$

Die *effektive Masse* m^* berücksichtigt die Masse der mit dem Teilchen “mitgeschleppten” Wolke anderer Teilchen.

Eine Verteilung $\delta n_{\vec{p}} \neq 0$ welche vom trivialen Grundzustand abweicht impliziert eine Veränderung der Quasiteilchen Energie,

$$\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} = \varepsilon_F + (p - p_F)v_F + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}. \quad (6.9)$$

Die Parameter $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ beschreiben die Wechselwirkung der Quasi-Teilchen untereinander. Falls $\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ von Ort und Zeit abhängt (Nichtgleichgewicht), wird die QT-Energie $\bar{\varepsilon}_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ ebenfalls orts- und zeitabhängig; das Quasiteilchen bewegt sich dann im *Molekularfeld* der anderen QT.

Endliche Temperatur $T \neq 0$

Beim Übergang zu endlichen Temperaturen und freier Teilchenzahl gehen wir zur freien Energie $F = E - \mu N$ über,

$$F = F_0 + \sum_{\vec{p}} (\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \delta n_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}'}, \quad (6.10)$$

$$N = N_0 + \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}}. \quad (6.11)$$

Die Gleichgewichts-Verteilungsfunktion $n_{\vec{p}}^0$ ist bereits nichttrivial und muss wegen der Abhängigkeit von $\bar{\varepsilon}_{\vec{p}}$ selbstkonsistent durch

$$n_{\vec{p}}^0 = f(T, \bar{\varepsilon}_{\vec{p}}) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} - \mu)}}, \quad (6.12)$$

$$\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}, \quad (6.13)$$

$$\delta n_{\vec{p}} = n_{\vec{p}}^0(T, \mu) - n_{\vec{p}}^0(0, \mu), \quad (6.14)$$

²Die Relation $p_F^3 = 3\pi^2 n$ wird durch das Luttinger Theorem garantiert.

berechnet werden, da sich die angeregten Quasiteilchen im Molekularfeld der anderen angeregten Quasiteilchen befinden. Allerdings ist³

$$\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} - \mu = \underbrace{\varepsilon_{\vec{p}} - \mu}_{\sim T} + \underbrace{\sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}}_{\sum_{\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'} \propto \int dp p^2 \delta n_{\vec{p}} \propto T^2} \approx \varepsilon_{\vec{p}} - \mu \quad (6.15)$$

und damit finden wir für kleine T

$$n_{\vec{p}}^0(T, \mu) \approx \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu)}}. \quad (6.16)$$

Ebenso ist $\varepsilon_{\vec{p}} - \mu \sim O(T^2)$ und wir setzen $\mu = \varepsilon_{\vec{p}}$ in niedrigster Ordnung in T .

6.1.3 Symmetrien

Durch die Ausnutzung von Symmetrien können die Kopplungen $f_{\vec{p}\vec{p}'}^{\sigma\sigma'}$ der Quasiteilchen-Wechselwirkungen auf eine geringere Zahl von unabhängigen Parametern zurückgeführt werden. Da die QT nur in der Nähe der Fermifläche definiert sind, benötigen wir die Wechselwirkungen nur bei $\varepsilon_{\vec{p}}$. Die Zeitumkehrinvarianz (gültig in Abwesenheit eines Magnetfeldes $\vec{H} = 0$) und die Invarianz unter Inversion ergibt die beiden Beziehungen⁴

$$f(\hat{p}, \hat{p}'; \sigma, \sigma') = f(-\hat{p}, -\hat{p}'; -\sigma, -\sigma') = f(\hat{p}, \hat{p}'; -\sigma, -\sigma'). \quad (6.17)$$

Dann genügt die Angabe der (anti-)symmetrischen Kombinationen $f_{\vec{p}\vec{p}'}^{s/a}$ im Spinraum definiert durch

$$f_{\vec{p}\vec{p}'}^{\uparrow\uparrow} = f_{\vec{p}\vec{p}'}^s + f_{\vec{p}\vec{p}'}^a, \quad (6.18)$$

$$f_{\vec{p}\vec{p}'}^{\downarrow\uparrow} = f_{\vec{p}\vec{p}'}^s - f_{\vec{p}\vec{p}'}^a. \quad (6.19)$$

Ist das System zusätzlich isotrop, so können wir $f_{\vec{p}\vec{p}'}^{s/a}$ nach den Winkelfunktionen P_l entwickeln ($P_l(z) =$ Legendre Polynome),

$$f_{\vec{p}\vec{p}'}^{s/a} = \sum_{l=0} f_l^{s/a} P_l(\hat{p} \cdot \hat{p}'), \quad (6.20)$$

³Die Abschätzungen sind eine Übung für den Leser. Beachte, dass $\sum_{\vec{p}'} |\delta n_{\vec{p}'}|/N \sim T/\varepsilon_{\vec{p}}$ aber $\sum_{\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}/N \propto T^2$.

⁴Die Richtung \hat{p} definiert den Ort auf der Fermifläche.

$p[10^5\text{Pa}]$	F_0^s	F_0^a	F_1^s	F_1^a	m^*/m
0	9.15	-0.7	5.27	-0.55	2.76
15	41.33	-0.755	9.71	-0.95	4.24
30	75.60	-0.758	13.20	-0.98	5.40

Tabelle 6.1: Landauparameter $F_l^{s/a}$ und m^*/m für ${}^3\text{He}$ in Abhängigkeit des Drucks p .

und in dimensionsloser Form schreiben ($\rho(\mu)$ bezeichnet die Zustandsdichte am chemischen Potential)

$$F_l^{s/a} = \rho(\mu) f_l^{s/a} = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2} f_l^{s/a}. \quad (6.21)$$

Zum Beispiel gilt für die Renormierung m^*/m der Masse durch den Übergang von freien Teilchen zu Quasiteilchen unter Ausnützung der Galilei-invarianz die Beziehung

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1^s}{3}. \quad (6.22)$$

In der Tabelle 6.1 sind die *Landauparameter* $F_{0/1}^{s/a}$ und m^*/m für ${}^3\text{He}$ angegeben.

6.2 Gleichgewichts Thermodynamik

Wir berechnen einige wichtige thermodynamische Größen im Rahmen der Landautheorie.

6.2.1 Spezifische Wärme

Aus der Ableitung der freien Energie⁵

$$F = F_0 + \underbrace{\sum_{\vec{p}} (\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \delta n_{\vec{p}}}_{\propto T^2} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{\vec{p}\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}'}}_{\sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} \propto T^2 \Rightarrow \propto T^4} \quad (6.23)$$

⁵Es ist $\sum_{\vec{p}} (\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \delta n_{\vec{p}} \sim T \sum_{\vec{p}} |\delta n_{\vec{p}}| \propto T^2$.

folgt die spezifische Wärme

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \left[\sum_{\vec{p}} (\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \delta n_{\vec{p}} \right] \quad (6.24)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{m^* k_F}{3\hbar^2} T \\ &= (m^*/m) C_v^0 = (1 + F_1^s/3) C_v^0; \end{aligned} \quad (6.25)$$

der Ausdruck (6.24) hat die gleiche Form wie das Resultat (4.42) für nicht wechselwirkende Fermionen, aber mit einer renormierten Dispersion $\varepsilon_{\vec{p}} = \mu + v_F(p - p_F)$, d.h., eine via m^*/m renormierte Fermi Fermigeschwindigkeit $v_F = v_F^0 m^*/m$; entsprechend wird auch die spezifische Wärme renormiert. Üblicherweise wird die Masse m^* schwerer (Mitschleppen einer Teilchenwolke) und die spezifische Wärme wird erhöht.

6.2.2 Kompressibilität

In der Thermodynamik ist die (isotherme) Kompressibilität κ allgemein gegeben durch⁶

$$\frac{1}{\kappa} = -V \frac{\partial p}{\partial V} = -V \frac{\partial p}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial V} = n^2 \frac{\partial \mu}{\partial n}. \quad (6.26)$$

Im nicht wechselwirkenden Fermigas ist

$$\mu \approx \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}, \quad (6.27)$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial n} = \frac{\hbar^2}{3m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} n^{-\frac{1}{3}}, \quad (6.28)$$

$$\frac{1}{\kappa_0} = \frac{v_F^0 p_F n}{3} = \frac{2}{3} \varepsilon_F^0 n. \quad (6.29)$$

Die Wechselwirkung in der Fermiflüssigkeit modifiziert den Zusammenhang zwischen μ und n . Dazu berechnen wir die Änderung $\delta\mu$ aufgrund einer Verschiebung δp_F im Radius der Fermikugel,

$$\delta\mu = \left. \frac{\partial \varepsilon_{\vec{p}}}{\partial p} \right|_{p_F} \delta p_F + 2 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} f_{\vec{p}\vec{p}'}^s \delta n_{\vec{p}'}, \quad (6.30)$$

mit

$$\delta n_{\vec{p}'} = \delta(\varepsilon_{\vec{p}'} - \mu) v_F \delta p_F. \quad (6.31)$$

⁶Benutze $Nd\mu = -SdT + Vdp$; für $T = \text{const.}$ ist $Nd\mu = Vdp$ und $nd\mu = dp$.

Damit erhalten wir (mit $2 \int d^3p'/(2\pi)^3 = \int d\varepsilon_{p'}\rho(\varepsilon_{p'})$ für eine isotrope Flüssigkeit; beide Spinwerte sind gleichermassen betroffen, weshalb der Spin-symmetrische Parameter F_0^s auftritt)

$$\delta\mu = v_F \delta p_F + 2 \underbrace{\int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} f_{\vec{p}\vec{p}'}^s \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) v_F \delta p_F}_{\rho(\mu) f_0^s v_F \delta p_F = F_0^s v_F \delta p_F} \quad (6.32)$$

und wir finden die renormierte inverse Kompressibilität (mit $\delta p_F = p_F \delta n/3n$)

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{(1 + F_0^s)}{3} p_F v_F n = \frac{2(1 + F_0^s)}{3} \varepsilon_F n = \frac{1 + F_0^s}{1 + F_1^s/3} \frac{1}{\kappa_0}. \quad (6.33)$$

6.2.3 Spin-Suszeptibilität χ

Das Resultat für die Spin-Suszeptibilität $\chi = \partial_H M$ ($M = -\partial_H F/V$, H Magnetfeld) lautet in einem nicht wechselwirkenden Fermigas⁷

$$\chi^0 = \rho(\mu) \mu_B^2 = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F^0} \mu_B^2. \quad (6.34)$$

In der Fermiflüssigkeit ergibt sich das renormierte Resultat

$$\chi = \frac{\rho(\mu)}{1 + F_0^a} \mu_B^2 = \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^a} \chi^0. \quad (6.35)$$

Beachte, dass typischerweise $F_0^a < 0$, d.h. die Spin-Suszeptibilität ist in der Fermiflüssigkeit im allgemeinen auf Grund der Wechselwirkung erhöht.⁸

6.2.4 Schwere Fermionen

Ein besonders ausgeprägtes Beispiel für eine Fermiflüssigkeit sind die ‘schweren Fermion Systeme’. Diese Materialien enthalten Atome mit f Elektronen (z.B. Uran oder Cer Verbindungen) die stark lokalisiert sind (f -Orbitale sind typischerweise stark lokalisiert). Entsprechend unterliegen diese f Elektronen einer starken Coulombabstossung, so dass es energetisch günstiger ist,

⁷Zur Herleitung: In einem Magnetfeld verschieben sich die Quasi-Teilchen Energien um $g\mu_B H s$ ($g = 2$ Landefaktor, $\mu_B = e\hbar/2mc$, $s = \pm 1/2$), also lauten die neuen Besetzungszahlen $n_{\vec{p}\sigma}(H) = f(\varepsilon_{\vec{p}} - g\mu_B \sigma H/2)$.

⁸Der spin-antisymmetrische Parameter F_0^a tritt auf weil sich die Besetzungszahlen der Elektronen mit verschiedenem Spin umgekehrt ändern, $\delta n_{\vec{p}\uparrow} = -\delta n_{\vec{p}\downarrow}$. Was passiert bei $F_0^a \rightarrow -1$?

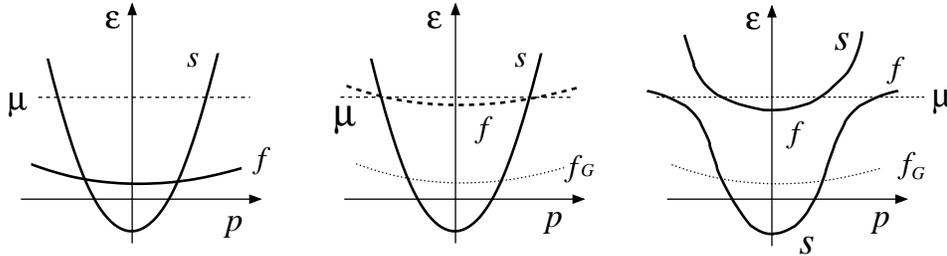


Abb. 6.2: (Links) s - und f -Bänder ohne Coulombwechselwirkung. (Mitte) Durch die starke Coulombabstossung auf dem f -Orbitalen wird das Orbital zum chemischen Potential angehoben. (Rechts) Die Hybridisierung von s - und f -Bändern führt zu flachen f -artigen Bändern mit grosser effektiver Masse. In einem schnellen Prozess wird der f -Geist f_G sichtbar.

diese Orbitale nur einfach zu besetzen (ein Elektron pro Gitterplatz, halb gefülltes Orbital). Will man diese 'halbe' Besetzung des entsprechenden Bandes in einem Einteilchenbild beschreiben, so müssen diese Bänder bis zur Fermienergie angehoben werden (nur dann lässt sich die teilweise Füllung eines Zustandes via der Fermi-Verteilung beschreiben). An der Fermikante können die Elektronen mit f -Charakter mit delokalisierten Elektronen (z.B. s - oder p -Typ) hybridisieren, was zu sehr flachen, sogenannten ('schweren') Bändern mit einer grossen effektiven Masse m^* führt, vgl. Abb. 6.2.⁹

Die wichtigsten phänomenologischen Konsequenzen der grossen Masse m^* sind eine spezifische Wärme C_v und eine Spin-Suszeptibilität χ , die um bis zu einem Faktor $\sim 10^3$ überhöht sind; das Verhältnis $(\chi/\chi^0)/(C_v^0/C_v) = 1/(1 + F_0^a)$ ist typischerweise klein, ~ 1.6 für CeAl_3 .

6.3 Nichtgleichgewicht und kinetische Gleichung

6.3.1 Nichtgleichgewicht

Betrachten wir Phänomene ausserhalb des Gleichgewichts (GG), so müssen wir eine Nicht-Gleichgewichts-Verteilung $n_{\vec{p}}$ berechnen. Es ist vorteilhaft,

⁹Genauer gesagt gilt das Argument nur auf Zeitskalen, die gross gegenüber der typischen Zeitskala τ_{dressing} sind, auf der sich das neue 'hybridisierte' Quasiteilchen ausbildet. In einem Photoemission Experiment gilt stattdessen, dass $\tau_{\text{em}} \ll \tau_{\text{dressing}}$ ist (schneller Prozess), so dass sich ein ' f -Geist' beobachten lässt.

das Problem zu zerlegen in einen Anteil $\delta\bar{n}_{\vec{p}}$ der die Abweichung vom lokalen Gleichgewicht $n_{\vec{p}}^0(T(\vec{r}, t), \mu(\vec{r}, t)) = f(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}})$ beschreibt plus Rest,

$$\delta n_{\vec{p}} = n_{\vec{p}} - n_{\vec{p}}^0(T=0, \mu) = \quad (6.36)$$

$$= \underbrace{n_{\vec{p}} - f(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}})}_{\delta\bar{n}_{\vec{p}}} + \underbrace{f(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}}) - f(\varepsilon_{\vec{p}})}_{\partial_{\varepsilon_{\vec{p}}} f(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}})}. \quad (6.37)$$

Die Abweichung $\delta\bar{n}_{\vec{p}}$ vom lokalen Gleichgewicht lässt sich dann schreiben als¹⁰

$$\delta\bar{n}_{\vec{p}} = \delta n_{\vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}. \quad (6.38)$$

Die Ladungs- und Stromdichten $\rho(\vec{r}, t)$ und $\vec{j}(\vec{r}, t)$ ergeben sich nichttrivial aus den Verteilungsfunktionen $\delta n_{\vec{p}}$ und $\delta\bar{n}_{\vec{p}}$ — um sie zu berechnen, müssen wir erst eine Transportgleichung finden.

6.3.2 Kinetische Gleichung

Während wir in der Gleichgewichts-Thermodynamik die Verteilungsfunktion $n_{\vec{p}}$ aus der Fermifunktion $f(\varepsilon_{\vec{p}})$ erhalten, müssen wir im Nichtgleichgewicht $n_{\vec{p}}$ von Grund auf neu berechnen. Dazu dient die *kinetische Gleichung*, eine *Ratengleichung*, welche uns die Umverteilung der Quasiteilchen in andere Zustände auf Grund externer Störungen beschreibt. Im allgemeinen ist dann $n_{\vec{p}}$ sowohl orts- als auch zeitabhängig,

$$n_{\vec{p}} = n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = n_{\vec{p}}^0 + \delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t), \quad (6.39)$$

wobei $n_{\vec{p}}^0$ wie üblich den Grundzustand beschreibt. Die Störungen $\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ sollen klein sein und können entweder durch äussere Kraftfelder oder spontan (z.B. durch kollektive Moden) entstehen. Üblicherweise zerlegen wir die Störung $\delta n_{\vec{p}}$ in ihre Fourierkomponenten,

$$n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = n_{\vec{p}}^0 + \delta n_{\vec{p}}(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t)}. \quad (6.40)$$

Für genügend kleine Impulse \vec{q} und Energien ω lässt sich eine derartige Störung innerhalb der Landautheorie beschreiben, wobei die Bedingungen

$$\hbar q v_F \ll \mu, \quad \hbar \omega \ll \mu, \quad (6.41)$$

¹⁰Bei $T = 0$ ergibt sich $\partial f / \partial \varepsilon_{\vec{p}} \rightarrow -\delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu)$.

zu berücksichtigen sind. In diesem (hydrodynamischen) Bereich treten auch keine Komplikationen aufgrund des Unschärfepinzips auf.¹¹ Ansonsten müssten wir zu einer echt quantenmechanischen Beschreibung übergehen,

$$n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) \longrightarrow f(\vec{p} + \vec{q}/2, \vec{p} - \vec{q}/2), \quad (6.42)$$

wobei f die Wignerfunktion ist (mit \vec{q} konjugiert zu \vec{r}). In diesem Sinne ist unsere Analyse als Entwicklung der echten Theorie in den Parametern q/k_F und ω/μ zu betrachten, wobei wir nur den führenden Term mitnehmen.

Wir leiten die *Boltzmann-Transport-Gleichung (BTG)* für die Landau FLT her. Wir starten vom WW-freien System und schreiben die Teilchenzahlerhaltung im 6-dimensionalen Phasenraum unter Benützung der Notation $(v_\mu) = (\vec{r}, \vec{p})$ und $(\partial_\mu) = (\vec{\nabla}_{\vec{r}}, \vec{\nabla}_{\vec{p}})$ auf:

$$\partial_t n_{\vec{p}} + \partial_\mu (v_\mu n_{\vec{p}}) = 0, \quad (6.43)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t n_{\vec{p}} + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} n_{\vec{p}} + \dot{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = 0. \quad (6.44)$$

Als nächstes schalten wir die Wechselwirkung zwischen Teilchen ein, berücksichtigen sie vorerst aber nur via den Streuprozessen welche sie erzeugt. Diese Streuprozesse führen zu einer Umverteilung in $n_{\vec{p}}$, welche wir durch ein *Stossintegral* berücksichtigen,

$$\partial_t n_{\vec{p}} + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} n_{\vec{p}} + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}}. \quad (6.45)$$

Der Vollständigkeit halber diskutieren wir verschiedene Stossintegrale $\partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}$, solche erzeugt durch die Teilchen-Teilchen Wechselwirkung, aber auch diejenigen die via Streuung an Defekten oder via Streuung an Gitterschwingungen (Phononen) entstehen, vgl. dazu Abb. 6.4.

6.3.3 Streuprozesse

Der Streuterm $\partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}$ in Gl. (6.45) kann für bestimmte Streumechanismen, vgl. Abb. 6.4, genauer spezifiziert werden.

Teilchen-Defekt-Streuung

Für die *Teilchen-Defekt-Streuung (TD)*, bei der Teilchen an *Störstellen* mit der Amplitude $W_{\vec{p}' \vec{p}} = W_{\vec{p} \vec{p}'}$ von \vec{p} nach \vec{p}' gestreut werden, ergibt sich die

¹¹Beachte, dass in Gl. (6.39) \vec{r} und \vec{p} scharf sind.

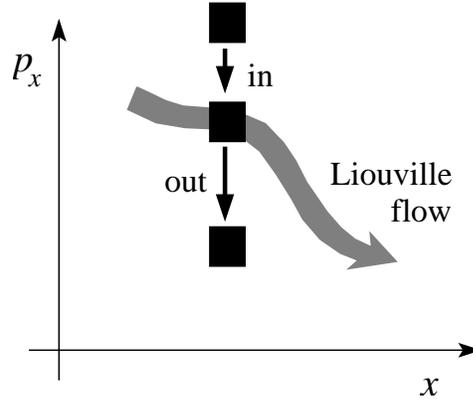


Abb. 6.3: Skizze der Wirkung von Streuprozessen im Phasenraum. Die Streuprozesse entnehmen dem Volumen $\Delta x \Delta p_x$ am Ort x Teilchen mit Impuls p_x und fügen sie dem Volumen $\Delta x \Delta p'_x$ bei (x, p'_x) zu, und umgekehrt.

Form

$$\partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}} = - \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} [W_{\vec{p}' \vec{p}} n_{\vec{p}} - W_{\vec{p} \vec{p}'} n_{\vec{p}'}]. \quad (6.46)$$

Die effektive Änderung der Teilchenzahl ist offenbar gerade die Differenz der aus dem Zustand \vec{p} hinaus- bzw. hineingestreuerten Teilchen und die Wahrscheinlichkeit dieser Prozesse ist proportional zur Besetzung $n_{\vec{p}}$ des jeweiligen Ausgangszustandes, vgl. dazu auch Abb. 6.3.

Teilchen-Teilchen-Streuung

Analog gilt für die *Teilchen-Teilchen-Streuung* (TT) unterscheidbarer Teilchen

$$\partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}} = - \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p'_1}{(2\pi)^3} \{ W_{\vec{p}' \vec{p}_1', \vec{p} \vec{p}_1} n_{\vec{p}} n_{\vec{p}_1} - W_{\vec{p} \vec{p}_1, \vec{p}' \vec{p}_1'} n_{\vec{p}'} n_{\vec{p}_1'} \}. \quad (6.47)$$

Für Fermionen muss darüberhinaus das Pauliprinzip durch Faktoren $1 - n_{\vec{p}}$ im Endzustand berücksichtigt werden, und zwar sowohl für TD- als auch TT-Streuung,

$$[\dots] \rightarrow W_{\vec{p}' \vec{p}} n_{\vec{p}} (1 - n_{\vec{p}'}) - W_{\vec{p} \vec{p}'} n_{\vec{p}'} (1 - n_{\vec{p}}), \quad (6.48)$$

$$\begin{aligned} \{\dots\} &\rightarrow W_{\vec{p}' \vec{p}'_1, \vec{p} \vec{p}_1} n_{\vec{p}} n_{\vec{p}_1} (1 - n_{\vec{p}'}) (1 - n_{\vec{p}'_1}) \\ &\quad - W_{\vec{p} \vec{p}_1, \vec{p}' \vec{p}'_1} n_{\vec{p}'} n_{\vec{p}'_1} (1 - n_{\vec{p}}) (1 - n_{\vec{p}_1}). \end{aligned} \quad (6.49)$$

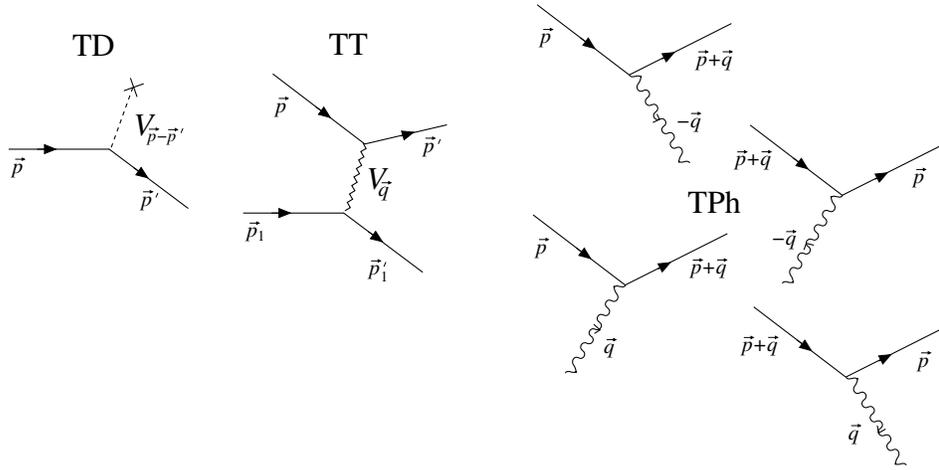


Abb. 6.4: Feynmangraphen für Teilchen-Defekt-, Teilchen-Teilchen-, und Teilchen-Mode Streuprozesse, letztere für Emissions- und Absorptionsprozesse von Quanten (z.B., Elektron-Phonon Prozesse).

Elektron-Phonon-Streuung

Bei der *Elektron-Phonon-Streuung* (*TPh*) wird der Impuls \vec{p} des Teilchens unter Absorption/Emission eines Phonons \vec{q} in den Impulszustand $\vec{p} \pm \vec{q}$ gestreut; die Elektron-Phonon Wechselwirkung die diesen Prozess beschreibt hat die Form

$$h_{\vec{p}\vec{q}}^{e-ph} \propto c_{\vec{p}+\vec{q}}^\dagger c_{\vec{p}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) + c_{\vec{p}}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}} (a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}^\dagger), \quad (6.50)$$

aus der sich die Diagramme in Abb. 6.4 ergeben. Für das Stossintegral erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned} \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}} = & - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \{ W_{\vec{p},-\vec{q}} [n_{\vec{p}}(1-n_{\vec{p}+\vec{q}})(1+N_{-\vec{q}}) - n_{\vec{p}+\vec{q}}(1-n_{\vec{p}})N_{-\vec{q}}] \\ & + W_{\vec{p},\vec{q}} [n_{\vec{p}}(1-n_{\vec{p}+\vec{q}})N_{\vec{q}} - n_{\vec{p}+\vec{q}}(1-n_{\vec{p}})(1+N_{\vec{q}})] \}. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Die Faktoren $N_{\vec{q}}$ und $1 + N_{\vec{q}}$ sind bosonische Besetzungsfaktoren die bei der Absorption und der (spontanen und induzierten) Emission der Phononen auftreten.

Die Stossintegrale hängen damit im wesentlichen von den Amplituden W und statistischen Faktoren, z.B. $n_{\vec{p}}$ oder $N_{\vec{q}}$, ab. Oft sind in den Amplituden

	TD	TT	TPh
Teilchenzahl	+	+	+
Impuls	-	+	-
Energie	+	+	-

Tabelle 6.2: Erhaltung von Teilchenzahl, Impuls und Energie für Teilchen-Defekt-(TD)-, Teilchen-Teilchen-(TT)- und Teilchen-Phonon-(TPh)-Streuung. Beachte, dass bei TT-Streuung weder Impuls noch Energie relaxiert werden kann, bei TD-Streuung kann nur der Impuls relaxiert werden. Erst die inelastischen Streuprozesse mit Phononen erlauben es dem Teilchen-/Elektronensystem Impuls und Energie abzugeben.

W noch verschiedene Erhaltungssätze implementiert, z.B., die Erhaltung von Energie und/oder Impuls im Streuprozess, $W \propto \delta(\varepsilon_{\text{in}} - \varepsilon_{\text{out}}) \delta^3(\vec{p}_{\text{in}} - \vec{p}_{\text{out}})$, vgl. Tabelle 6.2.

Schliesslich inkorporieren wir auch die Wechselwirkung in die Boltzmann Transport Gleichung: Betrachte Gl. (6.45),

$$\partial_t n_{\vec{p}} + \vec{r} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} n_{\vec{p}} + \vec{p} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}} \quad (6.52)$$

mit

$$\vec{r} \rightarrow \vec{v}_{\vec{p}} = \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\vec{p}}}{\partial \vec{p}}, \quad (6.53)$$

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p}_{\vec{p}} = -\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\vec{p}}}{\partial \vec{r}} + \vec{F}. \quad (6.54)$$

Indem wir die lokale Quasiteilchen-Energie $\bar{\varepsilon}_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ als Quasiteilchen-Hamiltonfunktion betrachten, erhalten wir ein molekulares Energiefeld in dem sich die Quasiteilchen bewegen. Wir finden damit die vollständige Boltzmann Transport Gleichung,

$$\partial_t n_{\vec{p}} + \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\vec{p}}}{\partial \vec{p}} \cdot \nabla_{\vec{r}} n_{\vec{p}} + \left[\vec{F} - \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\vec{p}}}{\partial \vec{r}} \right] \cdot \nabla_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}}. \quad (6.55)$$

Für $\vec{F} = 0$ lässt sich die Gleichung (6.55) elegant durch die Verteilungsfunktionen $\delta n_{\vec{p}}$ und $\delta \bar{n}_{\vec{p}}$ ausdrücken: Mit

$$n_{\vec{p}} = n_{\vec{p}}^0 + \delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) \quad \text{und} \quad \bar{\varepsilon}_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'} \quad (6.56)$$

erhalten wir in niedrigster Ordnung $\delta n_{\vec{p}}$ (beachte, dass $\partial_t n_{\vec{p}}^0 = 0 = \vec{\nabla}_{\vec{r}} n_{\vec{p}}^0$)

$$\partial_t \delta n_{\vec{p}} + \frac{\partial \varepsilon_{\vec{p}}}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}} - \vec{\nabla}_{\vec{p}} n_{\vec{p}}^0 \cdot \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}'} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}}, \quad (6.57)$$

$$\Rightarrow \partial_t \delta n_{\vec{p}} + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}} - \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \cdot \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}'} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}},$$

$$\Rightarrow \partial_t \delta n_{\vec{p}} + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}}. \quad (6.58)$$

Die Gl. (6.57) hat eine hübsche Interpretation: Mit $f_{\vec{p}\vec{p}'} = 0$ erhalten wir die übliche Boltzmann Transport Gleichung, $\partial_t \delta n_{\vec{p}} + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}}$, zurück. Der Term mit $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ beschreibt dann das molekulare Kraftfeld, welches treibend auf $\delta n_{\vec{p}}$ zurückwirkt. Dies wird uns auch in Abwesenheit von Stößen eine kollektive Mode geben, den *nullten Schall*.

Mit diesen Transportgleichungen können wir viele (neue) Phänomene beschreiben. Zuerst finden wir die korrekten Ausdrücke für die Ladungs- und Stromdichten $\rho(\vec{r}, t)$ und $\vec{j}(\vec{r}, t)$. Die Fluktuationen in der Ladungsdichte ergeben sich direkt aus der Verteilungsfunktion $\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$,

$$\delta \rho(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t). \quad (6.59)$$

Die zugehörige Stromdichte folgt dann aus der Teilchenzahlerhaltung

$$\partial_t \delta \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (6.60)$$

zusammen mit der Transportgleichung (6.58). Nach Integration über \vec{p} verschwindet der Stossterm und wir erhalten den Ausdruck¹²

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} \vec{v}_{\vec{p}}. \quad (6.62)$$

Analog ist die Impulsstromdichte gegeben durch $\Pi_{\alpha\beta} = \sum_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} p_{\alpha} v_{\vec{p}\beta}$ und die Energiestromdichte hat die Form $Q_{\alpha} = \sum_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} \varepsilon_{\vec{p}} v_{\vec{p}\alpha}$.

Als nächstes konzentrieren wir uns auf die *kollektiven Anregungen* im Fermisystem. Im wesentlichen sind das einfache *Dichte-Fluktuationen*, d.h., *Schallwellen*. Wir unterscheiden 3 Typen:

¹²Für ein homogen bewegtes System ($\vec{q} = 0$) lässt sich der Strom aufgrund der Galilei-invarianz in der Form

$$\vec{j}^{\vec{q}=0} = \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} p_{\vec{p}} / m. \quad (6.61)$$

schreiben. Der Vergleich von (6.62) und (6.61) liefert die Beziehung $m^*/m = 1 + F_1^s/3$.

- gewöhnlicher, hydrodynamischer, *erster Schall*,
- nicht-hydrodynamischer *nullter Schall*,
- *Plasmaoszillationen* im geladenen Fermisystem.

Wir beginnen mit dem *ersten Schall*.

6.4 Kollektive Anregungen

6.4.1 Erster Schall, klassisches Gas

Die Wechselwirkung erscheint in Gl. (6.55) an 2 Stellen, in $\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}$ und in $\delta_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}$. Wir nehmen an, die Streuraten seien genügend gross als dass $\partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}$ in der Lage ist, immer ein lokales Gleichgewicht zu erzeugen (*hydrodynamischer Limes*). Für eine einfache Herleitung betrachten wir erst die Situation im klassischen Gas im hydrodynamischen Limes: Die Multiplikation von Gl. (6.45) (Teilchen-Teilchen Streuung) mit den Faktoren $A = 1, \vec{p}, p^2$ und die nachfolgende Integration über \vec{p} liefert (fünf) Erhaltungsgleichungen für die Teilchenzahl (die Kontinuitätsgleichung), den Impuls und die Energie,

$$\partial_t n + \partial_i j_i = 0, \quad (6.63)$$

$$\partial_t j_k + \partial_i \Pi_{ik}/m = n F_k/m, \quad (6.64)$$

$$\partial_t E + \partial_i e_i = j_i F_i, \quad (6.65)$$

mit

$$n = \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}, \quad \vec{j} = \sum_{\vec{p}} \vec{v}_{\vec{p}} n_{\vec{p}}, \quad (6.66)$$

$$\Pi_{ij} = \sum_{\vec{p}} v_{\vec{p},i} v_{\vec{p},j} n_{\vec{p}}, \quad \vec{e} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} (\vec{p} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \vec{v}_{\vec{p}} n_{\vec{p}}, \quad (6.67)$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} (\vec{p} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) n_{\vec{p}}. \quad (6.68)$$

Dabei haben wir die Erhaltungssätze $\sum_{\vec{p}} A \partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} = 0$ benutzt. In niedrigster Ordnung (keine Viskosität, keine Wärmeleitung) setzen wir für $n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ eine lokale Maxwell-Boltzmann Verteilung mit konvektiver

Strömung $\vec{u}(\vec{r}, t)$ an (fünf Freiheitsgrade),

$$n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) \approx n(\vec{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi T(\vec{r}, t)} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{(\vec{p} - m\vec{u}(\vec{r}, t))^2}{2mT(\vec{r}, t)} \right], \quad (6.69)$$

wobei die (fünf hydrodynamischen) Felder $n(\vec{r}, t)$, $T(\vec{r}, t)$, $\vec{u}(\vec{r}, t)$ langsam in Ort und Zeit variieren. Wir setzen $\vec{F} = 0$ und beschränken uns auf die Gleichungen für die Dichte und den Impuls; zudem betrachten wir den adiabatischen Grenzfall und können somit die Gleichung für den Entropiefluss ignorieren. Wir erhalten das Gleichungssystem

$$\partial_t n + \partial_i(n u_i) = 0, \quad (6.70)$$

$$\partial_t(m n u)_k + \partial_i(n u_i u_k + p \delta_{ik}) = 0, \quad (6.71)$$

$$\partial_t(\frac{1}{2} m n u^2 + \frac{3}{2} n T) + \partial_i[(\frac{1}{2} m n u^2 + \frac{5}{2} n T) u_i] = n F_i u_i, \quad (6.72)$$

mit dem Druck ($\vec{p}/m = \vec{u} + \vec{v}$, \vec{v} = thermische Geschwindigkeiten)

$$p = m \sum_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^2 n_{\vec{p}}. \quad (6.73)$$

Diese Gleichungen beschreiben nichtdissipativen Transport (keine Wärmeleitung, keine Viskosität); Wärme wird nur via Konvektion transportiert und entlang einer Stromlinie herrscht Adiabaticität, $p v^{5/3} = \text{const.}$ entlang einer Stromlinie gemäss (6.72). Zur Lösung der Gleichungen (6.70) und (6.71) setzen wir eine Dichte-Druck-Welle an,

$$\vec{u} = \vec{u}_0 e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \quad (6.74)$$

$$n = n_0 + n' e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \quad (6.75)$$

$$p = p_0 + p' e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \quad (6.76)$$

und erhalten in führender Ordnung in den kleinen Amplituden n' , p' , \vec{u}_0

$$\omega n' - n \vec{q} \cdot \vec{u}_0 = 0, \quad (6.77)$$

$$\omega m n \vec{u}_0 - \vec{q} p' = 0. \quad (6.78)$$

Von den 5 Unbekannten n' , p' , \vec{u}_0 können wir eine eliminieren, indem wir ersetzen (die Gleichung (6.72) erzwingt eine adiabatische Dichte-Druck Modulation)

$$n' = \left. \frac{\partial n}{\partial p} \right|_s p' = n \kappa_s p', \quad (6.79)$$

und wir erhalten das Eigenwertproblem:

$$\omega n \kappa_S p' - n \vec{q} \cdot \hat{u}_0 u_0 = 0, \quad (6.80)$$

$$\vec{q} \cdot \hat{u}_0 p' - \omega m n u_0 = 0. \quad (6.81)$$

Setzen wir eine *transversale Welle* an mit $\vec{q} \cdot \hat{u}_0 = 0$ so finden wir nur eine überdämpfte Mode. Andererseits finden wir eine gute longitudinale Mode: Die Dispersion des *longitudinalen Schalls* ist durch die Säkulargleichung $\det = m\omega^2 n^2 \kappa_S - n q^2 = 0$ bestimmt und man erhält

$$\omega = \sqrt{\frac{1}{mn\kappa_S}} q. \quad (6.82)$$

Der Schall ist ein Wechselspiel zwischen der Massendichte $\rho = mn$ und dem Druck p , wobei die *Schallgeschwindigkeit* s gegeben ist durch

$$s^2 = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s. \quad (6.83)$$

Wir sehen, dass das Resultat nur von der Dichte und der Kompressibilität abhängt und extrapolieren deshalb auf das entartete Fermigas; mit $\kappa_S - \kappa_T \sim (T/\varepsilon_F)^2$ ist $\kappa_S \approx \kappa_T = 3/p_F v_F^0 n$ und wir erhalten

$$s^2 \approx \frac{1}{mn\kappa_T} = \frac{(v_F^0)^2}{3}; \quad (6.84)$$

die Einbeziehung von Fermiflüssigkeits Korrekturen ist nichttrivial — soll m und/oder κ_T renormiert werden? Wir kommen im nächsten Abschnitt darauf zurück.

6.4.2 Erster Schall, Fermi Flüssigkeit

Die folgende Herleitung gibt uns das Resultat für den ersten Schall in der Fermiflüssigkeit inklusive korrekter Fermiflüssigkeits-Renormierungen und dient auch als Vorbereitung zur Behandlung des nullten Schalls. Wir starten von Gl. (6.57), setzen eine Fouriermode an,

$$\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \delta n_{\vec{p}}(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \text{c.c.}, \quad (6.85)$$

und erhalten

$$(-\omega + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \delta n_{\vec{p}} - (\vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \frac{\partial n_{\vec{p}}^0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'} = \left. \partial_t n_{\vec{p}} \right|_{\text{streu}}. \quad (6.86)$$

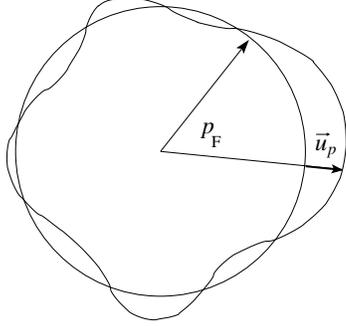


Abb. 6.5: Deformationsfeld $u_{\vec{p}}$ der Fermifläche.

Für tiefe Temperaturen lebt $\delta n_{\vec{p}}$ nur auf der Fermifläche und wir können die gesuchte Mode als Schwingung der Fermikugel auffassen. Wir setzen deshalb die Form

$$\delta n_{\vec{p}} = \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) v_F u_{\vec{p}} \quad (6.87)$$

an, wobei $u_{\vec{p}}$ die Deformation der Fermifläche beschreibt, vgl. Abb. 6.5. Einsetzen in Gl. (6.86) ergibt

$$(-\omega + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) u_{\vec{p}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta(\varepsilon_{\vec{p}'} - \mu) u_{\vec{p}'} = \partial_t n_{\vec{p}} \Big|_{\text{streu}}. \quad (6.88)$$

Um den *ersten Schall* zu erhalten, nehmen wir an, dass wir viele Streuprozesse haben, welche $u_{\vec{p}}$ auf 0 drücken, d.h., die Streuprozesse versuchen zu jedem Zeitpunkt ein Gleichgewicht zu erzeugen. Allerdings können die Streuprozesse weder die Teilchenzahl noch den Impuls relaxieren, weshalb die $l = 0, 1$ Momente von $u_{\vec{p}}$ nicht verschwinden und wir deshalb ansetzen, dass ($\theta =$ Winkel zwischen \vec{q} und \vec{p})

$$u_{\vec{p}} = a + b \cos \theta. \quad (6.89)$$

Mit den Gln. (6.20) und (6.21) finden wir für die $l = 0, 1$ Komponenten von Gl. (6.88),

$$-\omega a + \frac{qv_F}{3} [1 + F_1^s/3] b = 0, \quad (6.90)$$

$$-\omega b + qv_F [1 + F_0^s] a = 0. \quad (6.91)$$

Die Bedingung $\det = 0$ ergibt

$$\omega^2 = \frac{v_F^2}{3} (1 + F_0^s)(1 + F_1^s/3) q^2 \quad (6.92)$$

$$= \frac{(v_F^0)^2}{3} \frac{1 + F_0^s}{1 + F_1^s/3} q^2 \quad (6.93)$$

und damit

$$s^2 = \frac{1}{mn\kappa} \quad (6.94)$$

mit $\kappa = \kappa_T$ gegeben durch (6.33); nur die Kompressibilität wird renormiert. Im Metall wird die Kompressibilität durch das Elektronensystem determiniert (hoher Fermidruck $p \sim n\varepsilon_F$ statt $p \sim nT$), währenddessen die Masendichte durch die Ionen festgelegt wird. Mit $\kappa^{-1} = (1 + F_0^s)v_F p_F n/3$ und $m \rightarrow M/Z$ ergibt sich das Resultat von Bohm & Staver

$$s_M = \sqrt{\frac{mZ}{M}} s \xrightarrow{f_{\vec{p}\vec{p}'} \rightarrow 0} \sqrt{\frac{Zm}{3M}} v_F^0. \quad (6.95)$$

Mit $v_F^0 \sim 10^8$ cm/s erhalten wir typische Schallgeschwindigkeiten in Metallen im Bereich $s_M \sim 10^6$ cm/s. Im gleichen Stil berechnen wir im folgenden Abschnitt den *nullten Schall*.

6.4.3 Nullter Schall

Multipolentwicklung

Wir starten von Gl. (6.57) und betrachten den Limes ohne Streuprozesse, $\partial n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} \rightarrow 0$ bzw. $\omega\tau_{\text{streu}} \gg 1$. Wir definieren die Winkel

$$\cos \theta = \hat{p} \cdot \hat{q}, \quad (6.96)$$

$$\cos \theta' = \hat{p}' \cdot \hat{q}, \quad (6.97)$$

$$\cos \vartheta = \hat{p} \cdot \hat{p}'; \quad (6.98)$$

der Winkel φ bezeichnet das Azimut um die Achse \hat{q} . Mit den Ansätzen

$$\sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \rightarrow \int \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} \sum_l F_l^{s/a} P_l(\hat{p} \cdot \hat{p}'), \quad (6.99)$$

$$u_{\vec{p}'} \rightarrow u^s(\hat{p}') \pm u^a(\hat{p}'), \quad (6.100)$$

erhalten wir aus Gl. (6.88) die Eigenwertgleichungen für den Eigenwert $\lambda = \omega/qv_F$ der im Spin symmetrischen und antisymmetrischen Oszillationsmoden u^s und u^a der Fermifläche,¹³

$$\left(\frac{-\omega}{qv_F \cos \theta} + 1 \right) u^{s/a}(\theta, \phi) + \int \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} \sum_l F_l^{s/a} P_l(\cos \vartheta) u^{s/a}(\theta', \phi') = 0. \quad (6.101)$$

¹³In den spin-(anti)-symmetrischen Moden u^s (u^a) oszillieren die Spins \uparrow und \downarrow miteinander (gegeneinander).

Mit dem Ansatz $u^{s/a}(\theta, \phi) = u_{lm}^{s/a} Y_{lm}(\theta, \phi)$ entkoppeln die Winkel ϕ sowie die symmetrischen und antisymmetrischen Moden, die Drehimpulse l bleiben aber gekoppelt. Wir erhalten damit kollektive Moden mit wohldefinierter Spinsymmetrie (s oder a) und fester Quantenzahl m zur Rotation um den Winkel ϕ , und zwar für

- $m = 0$ eine longitudinale Mode,
- $m = 1$ eine transversale Mode,
- $m = 2$ eine quadrupolare Mode.

Dispersion

Die Eigenwerte $\lambda = \omega/qv_F$ bestimmen die *Dispersion* der individuellen Moden; alle Moden sind linear und haben wohldefinierte Phasen- und Gruppengeschwindigkeiten, unabhängig von q ('Schallmoden'). Die relevanten Moden im System werden durch die Wechselwirkung zwischen den Teilchen via den Parametern $F_l^{s/a}$ festgelegt. Eine allgemeine Diskussion ist nicht angebracht und wir betrachten hier vorab den wichtigen Fall des *nullten Schalls*, welcher charakterisiert ist durch die Spinsymmetrie s und nur Dichtemodulationen (keine Spindichtemodulationen) involviert; zudem suchen wir eine longitudinale $m = 0$ Mode. Mit diesen Vorgaben setzen wir $F_0^s \neq 0$ und $F_l^{s/a} = 0$ sonst. Wir erhalten die Eigenwertgleichung

$$0 = (\cos \theta - \lambda) u + \cos \theta F_0^s \underbrace{\int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \frac{u}{2}}_{\text{const.} \neq 0}, \quad (6.102)$$

$$\rightarrow u = u_{\text{NS}}^s \frac{\cos \theta}{\lambda - \cos \theta}. \quad (6.103)$$

Durch Einsetzen von Gl. (6.103) in Gl. (6.102) erhalten wir die Bestimmungsgleichung für λ ,

$$\frac{\lambda}{2} \ln \frac{\lambda + 1}{\lambda - 1} - 1 = \frac{1}{F_0^s}. \quad (6.104)$$

Wir untersuchen diese Gleichung in verschiedenen Spezialfällen:

- $\lambda > 1$: Es ergibt sich eine reelle Dispersion

$$\omega = q\lambda v_F \quad (6.105)$$

mit Schallwellen, die schneller als v_F propagieren.

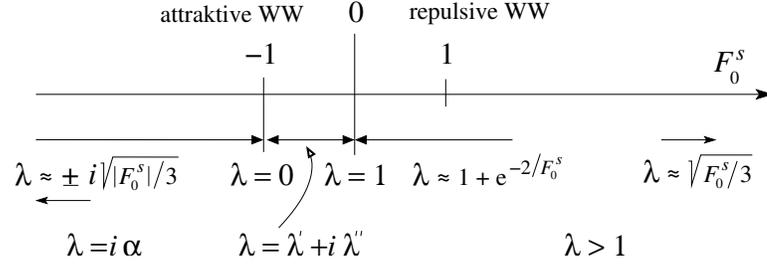


Abb. 6.6: Struktur der Lösungen $\lambda \in \mathbb{C}$ in Abhängigkeit von F_0^s : repulsive Wechselwirkung $F_0^s > 0$ erzeugt Schallwellen mit $\lambda > 1$; eine negative Wechselwirkung erzeugt Instabilitäten, $-1 < F_0^s < 0 \Leftrightarrow \lambda \in \mathbb{C}$, $F_0^s < -1 \Leftrightarrow \lambda \in i\mathbb{R}$.

- $\lambda \gg 1$: Die Entwicklung in $1/\lambda$ ergibt

$$\frac{\lambda}{2} \ln \frac{1 + 1/\lambda}{1 - 1/\lambda} \approx 1 + \frac{1}{3\lambda^2}, \quad (6.106)$$

$$\Rightarrow \lambda = \sqrt{F_0^s/3} \gg 1; \quad (6.107)$$

das Resultat zeigt, dass $\lambda \gg 1$ konsistent ist mit einer starken Repulsion $F_0^s > 3$.

- Für $\lambda \sim 1$ ergibt sich eine exponentielle Korrektur in $1/F_0^s$,

$$-\frac{1}{2} \ln(\lambda - 1) \approx \frac{1}{F_0^s} \Rightarrow \lambda = 1 + e^{-2/F_0^s}; \quad (6.108)$$

das Resultat ist mit schwacher Repulsion, $F_0^s \gtrsim 0$, verträglich. Bei verschwindender Wechselwirkung $F_1^s = 0$ ist $v_F = v_F^0$.

- $\lambda = i\alpha$: Der Ansatz einer rein imaginären Lösung wandelt Gl. (6.104) um in die Relation

$$\alpha \arctan(1/\alpha) - 1 = \frac{1}{F_0^s}; \quad (6.109)$$

für $\alpha = 0$ ergibt sich der Wert $F_0^s = -1$ und für eine starke attraktive Wechselwirkung $F_0^s \ll -1$ ergibt sich eine Instabilität mit $\alpha = \pm(|F_0^s|/3)^{1/2}$ und λ rein imaginär.

Insgesamt ergibt sich also für eine repulsive Wechselwirkung, $F_0^s > 0$, eine reelle Dispersion, $\lambda > 1$, wohingegen für eine attraktive WW, $F_0^s < 0$, die Mode stark gedämpft ist ($\lambda \in i\mathbb{R}$ für $F_0^s < -1$ und $\lambda \in \mathbb{C}$ für $-1 < F_0^s < 0$), vgl. Abb. 6.6. Für ein Landau-Fermi-Liquid mit repulsiver Wechselwirkung findet sich eine nullte Schall Mode.

Ein stark wechselwirkendes (im $l = 1$ Kanal) Fermi Liquid entwickelt auch eine $m = 1$ spin-symmetrische transversale Mode. Hierzu ist wiederum die Transportgleichung (6.101) zu lösen mit dem Ansatz $F_0^s + F_1^s \cos \vartheta$. Ein grosser Parameter $F_1^s > 6$ erzeugt genügend grosse ‘Scherkräfte’ um eine transversale Mode zu stabilisieren (vgl. mit der Diskussion des hydrodynamischen Schalles im klassischen Gas wo der Ansatz einer transversalen Mode mit $\vec{q} \cdot \hat{u}_0 = 0$ trivial fehlgeschlagen ist). Für $F_1^s < 6$ taucht die Mode ins Paarkontinuum und wird überdämpft (Landau Dämpfung). Weiter erwartet man für $F_0^a > 0$ eine longitudinale Spinwelle.

Vergleich nullter/erster Schall

Ein Vergleich mit dem ersten Schall drängt sich auf: Der *nullte Schall* entsteht durch das von der Wechselwirkung erzeugte Molekularfeld unter der Bedingung schwacher Streuung, d.h., $\omega\tau \gg 1$, so dass die Komponenten $u_{l \geq 2}^s$ nicht durch Stösse zum Verschwinden gebracht werden. Die Oszillation der Fermifläche ist nichttrivial (vgl. Abb. 6.7),

$$u = u_{00}^s \frac{\cos \theta}{\lambda - \cos \theta}. \quad (6.110)$$

Der *erste Schall* entsteht dagegen (bis auf Renormierung) durch die von der Wechselwirkung zwischen den Teilchen induzierten Stössen im hydrodynamischen Limes, $\omega\tau \ll 1$. Die Komponenten $u_{l < 2}^s \neq 0$ sind alle unterdrückt und nur die Komponenten $l = 0, 1$ überleben. Die Oszillation der Fermifläche ist eine einfache Monopol/Dipol-Oszillation (vgl. Abb. 6.7),

$$u = u_{00}^s + u_{10}^s \cos \theta, \quad (6.111)$$

$$\lambda = \sqrt{(1 + F_0^s)/3}, \quad (6.112)$$

$$s_1 = \sqrt{(1 + F_0^s)/3} v_F < s_0. \quad (6.113)$$

Beachte, dass der nullte Schall mit Geschwindigkeit s_0 schneller ist als der erste (Geschwindigkeit s_1), vgl. Abb. 6.8.

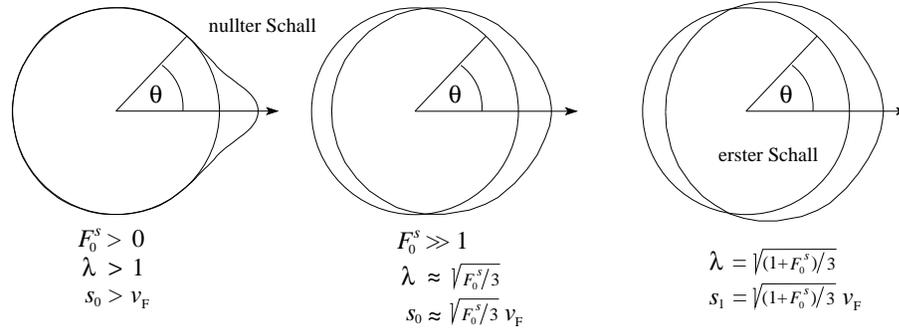


Abb. 6.7: Oszillationen der Fermifläche bei nulltem/erstem Schall (links/rechts). Abb. aus [Pin66].

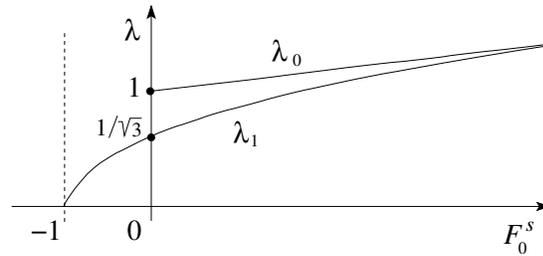


Abb. 6.8: Schallgeschwindigkeiten $s_0 = \lambda_0 v_F$ und $s_1 = \lambda_1 v_F$ des nullten und ersten Schalls in Abhängigkeit von F_0^s . Abb. aus [Pin66].

Dämpfung des nullten und ersten Schalls

Schliesslich untersuchen wir die Rolle der Dämpfung $\alpha = \text{Im}q$ für den nullten und den ersten Schall¹⁴, wobei wir zur Herleitung von α einfache Skalierungsargumente betrachten.¹⁵ Der nullte Schall wird durch Streuprozesse zerstört,

¹⁴Wir setzen eine gedämpfte Mode mit der Dispersion $q = (\omega/s) + i\alpha$ an.

¹⁵Die Berechnung der Dämpfung für den ersten Schall ist ein klassisches Problem in der Hydrodynamik; die Herleitung der hydrodynamischen Gleichungen für das klassische Gas geht über die niedrigste Ordnung hinaus, der Stossterm wird in einer Relaxationszeitapproximation $\partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} \approx -(n_{\vec{p}} - n_{\text{MB}})/\tau$ berücksichtigt und der Ansatz für die Verteilungsfunktion berücksichtigt den Stossterm via der Erweiterung $n_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = (1 - \tau \mathcal{D})n_{\text{MB}}$ mit n_{MB} der lokalen Maxwell Boltzmann Verteilung (6.69), τ der Streuzzeit, und $\mathcal{D} = \partial_t + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} + (\vec{F}/m) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}}$ ist der Liouville Operator; damit werden dissipative Prozesse wie Viskosität ($\eta = nT\tau$) und Wärmeleitung ($\kappa = (5n/2m)T\tau$) im Transport berücksichtigt. Die Resultate für das Fermiliquid findet man in Ref. [Smi89]. Um die Dämpfung des nullten und ersten Schalls zu berechnen wird der Stossterm wiederum in einer Relaxationszeitapproximation berücksichtigt. Für das entartete Fermigas ist die Viskosität $\eta = (1/5)n\varepsilon_F\tau$ dominant und die Dämpfung des ersten Schalls ergibt sich zu $\alpha = 2\omega^2\eta/3mn s_1^3 = 2\omega^2\tau/5s_1(1 + F_0^s)$. Für

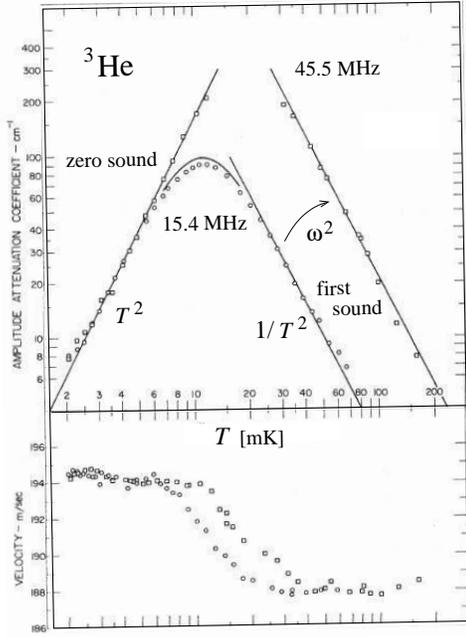


Abb. 6.9: Experimentell gemessener Dämpfungskoeffizient $\alpha(T)$ (in cm^{-1}) und Schallgeschwindigkeit $s(T)$ (in m/sec) des nullten und ersten Schalls in ${}^3\text{He}$ aus Ref. [Abe66].

währenddem der erste Schall durch deren Abwesenheit zerstört wird; entsprechend erwarten wir ein Maximum in der Dämpfung bei $\omega \sim 1/\tau$, mit der Streurrate $\tau^{-1} \sim T^2/\hbar\varepsilon_F$ für wechselwirkende Quasiteilchen, abhängig von der Temperatur. Für die Dämpfung des nullten Schalls erwarten wir eine Zunahme, für den ersten Schall eine Abnahme mit der Streurrate τ^{-1} . Schliesslich ist die Dämpfung des ersten Schalls frequenzabhängig, wobei hohe Frequenzen stärker dissipieren (weniger Stösse pro Zyklus). Mit diesen Argumenten und $[\alpha] = \text{m}^{-1}$ erwarten wir, dass $\alpha_0 \sim 1/\tau s$ und $\alpha_1 \sim \omega^2\tau/s$ und die Interpolation der beiden Formeln ergibt¹⁶

$$\alpha \sim \frac{\omega^2\tau/s}{1 + \omega^2\tau^2}, \quad (6.114)$$

$$\tau^{-1} \sim T^2/\varepsilon_F. \quad (6.115)$$

Die Abb. 6.9 zeigt die experimentellen Resultate der Messungen an ${}^3\text{He}$.

den 0-ten Schall ist $\alpha = (2/5s_1\tau)(1 + F_2^s/5)^2/(1 + F_0^s)$.

¹⁶Wenn der nullte Schall in das Paar Anregungsspektrum eintritt wird die Mode überdämpft, siehe Abb. 6.10; dies ist das Phänomen der Landaudämpfung

6.5 Anregungen im Landau-Fermi-Liquid

Wir haben im Fermigas Paaranregungen gefunden und die Wechselwirkung in der Fermiflüssigkeit hat uns zusätzlich eine (nullte) Schallmode erzeugt. Im folgenden diskutieren wir die Gesamtheit der Anregungen im Landau-Fermi-Liquid, vgl. Abb. 6.10, sowie deren Beitrag zum Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$:

1. **Paaranregungen** Wie im freien Fermigas existieren auch in der Fermi-Flüssigkeit Paaranregungen mit ähnlichen Eigenschaften (vgl. Abschnitt 5.3), insbesondere einem kontinuierlichen Spektrum begrenzt durch $0 < q < 2p_F$ bei kleinen Energien ω und einer renormierten Fermigeschwindigkeit v_F . Die Anregungen (Quasiteilchen-Paare) haben eine endliche Lebensdauer und sind wohl- (schlecht) definiert bei kleinen (grossen) Energien ω . Die Matrixelemente $\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle$, welche eine Paaranregung $|n\rangle$ an den Grundzustand koppeln, erreichen nicht mehr das volle Gewicht 1 wie im Fermigas, da Oszillatorstärke an die Multi-Paaranregungen und an die kollektive Mode abgegeben wird.
2. **Multi-Paaranregungen:** erscheinen im Fermigas als unabhängige Anregungen und geben keinen Beitrag zum (freien) Strukturfaktor S^0 , da die Matrixelemente $\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle$ verschwinden (die Dichte involviert nur zwei Operatoren und koppelt damit nur die Paaranregungen an den Grundzustand). Im Fermiliquid nimmt das Matrixelement $\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle \neq 0$ für Multi-Paaranregungen endliche Werte an. Die Erhaltungssätze für die Energie und den Impuls sind nicht restriktiv und wir erhalten ein breites Kontinuum. Für kleine ω erzwingt die Pauli-Blockade ein verschwindendes Gewicht für die n -Paaranregungen, so dass ihr Beitrag zum Strukturfaktor klein bleibt, $S^{(n)}(\vec{q}, \omega) \propto \omega^{2n-1}$, aber mindestens $\propto \omega^3$. Entsprechend sind für kleine Energien $\omega \rightarrow 0$ die Paaranregungen $S^{(1)}(\vec{q}, \omega) \propto \omega$ dominant.
3. **Kollektive Anregungen:** Im wechselwirkenden Fermiliquid treten kollektive Anregungen auf, z.B., der nullte Schall; die Mode hat eine wohl definierte Dispersion und erscheint als Linie (scharfer Peak) im Spektrum (Strukturfaktor). Ungedämpfter Schall erzeugt eine $\delta(\omega - \lambda v_F q)$ -Funktion im Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$; die Dämpfung drückt den Pol von der reellen Achse in die untere Halbebene. Tritt die Schallmode in das Paarkontinuum ein, so zerfällt sie in Paaranregungen und wird überdämpft. Der Dichteoperator $\rho_{-\vec{q}}$ vermag $|0\rangle$ an $|n_{\text{Schall}}\rangle$ zu koppeln.

Beachte, dass $|n_{\text{Schall}}\rangle$ ein einzelner Zustand ist, der die kollektive Anregung aller Teilchen beschreibt und der seine Oszillatorstärke aus allen N Teilchen bezieht. Umgekehrt ziehen die Paaranregungen jeweils Gewicht aus individuellen Paaren und es gibt $\sim N$ solche Anregungen. Die Gesamtheit der Paaranregungen und die kollektive Mode tragen dann vergleichbare Oszillatorstärken bei, das heisst, die Gewichte des Paar-kontinuums und des zur Schallmode assoziierten Peaks im Strukturfaktor sind vergleichbar gross.

4. **Einteilchenanregungen:** Wie im Fermigas, vgl. Abschnitt 5.3, treten wiederum Einteilchenanregungen auf, jedoch mit renormierter Geschwindigkeit $v_F \neq v_F^0$ und endlicher Lebensdauer.

6.6 Stabilität

Wir haben gesehen, dass eine attraktive Wechselwirkung im $l = 0$ -Kanal (bei $F_0^s < -1$) ein rein imaginäres $\lambda = \pm i(|F_0^s|/3)^{1/2}$ erzeugt, vgl. die Rechnung in Abschnitt 6.4.3 und Gl. (6.104). Als Folge baut sich eine Fluktuation $\propto \exp(i\omega t) \sim \exp(|\omega|t)$ exponentiell auf; erst die vernachlässigten *nichtlinearen Effekte* können das System in einem neuen Grundzustand stabilisieren. In unserem Fall wird dieser Grundzustand eine permanente Dichtewelle oder ‘density wave’ (DW).¹⁷

Instabilitäten von diesem Typ können in jedem Kanal l, a, s auftreten. Das Kriterium für die Dichtewellen-Instabilität erhalten wir aus der Tatsache, dass für $F_0^s = -1$ der Eigenwert λ gerade verschwindet, $\lambda = 0$. Wir verallgemeinern wir dieses Kriterium und setzen $\omega = 0$ in Gl. (6.101), woraus wir die Beziehung

$$u_{\vec{p}} + \int \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} F_l P_l(\hat{p} \cdot \hat{p}') u_{\vec{p}'} = 0 \quad (6.116)$$

erhalten. Wir finden Lösungen $u_l^{a/s} \neq 0$, falls

$$F_l^s = -(2l + 1), \quad F_l^a = -(2l + 1); \quad (6.117)$$

die Fermiflüssigkeit ist demnach stabil, falls $F_l^{a/s} > -2l - 1$. Insbesondere ist

$$m^* = m(1 + F_1^s/3) > 0 \Leftrightarrow F_1^s > -3, \quad (6.118)$$

¹⁷Beachte, dass eine kommensurable DW mit $q \sim 2p_F$ nicht durch unsere langwellen Analyse (gültig im Limes $q \ll q_F$) beschrieben werden kann.

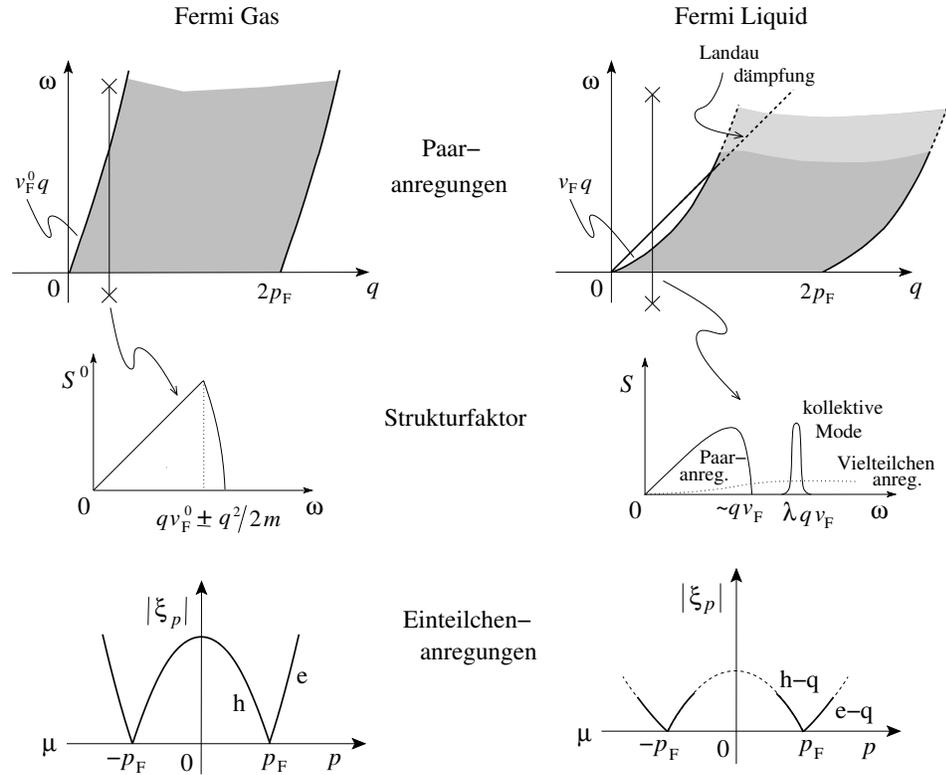


Abb. 6.10: Vergleich Fermigas (links) und Fermiliquid (rechts): (oben) Paar-anregungsspektrum, (Mitte) $S(\vec{q}, \omega)$ (vgl. Abb. 4.4 und 5.7), (unten) Dispersion $|\xi_{\vec{p}}|$. Im FL ist die Fermigeschwindigkeit v_F reduziert und die Quasiteilchen im Paar- und Einteilchen Anregungsspektrum sind nur um die Fermikante herum (kleine Energien) wohldefiniert. Im Fermiliquid tritt eine kollektive Mode auf (nullter Schall) die beim Eintritt in das Paar-anregungsspektrum überdämpft wird. Die Schallmode manifestiert sich im Strukturfaktor.

$$\kappa = \kappa^0 \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^s} > 0 \Leftrightarrow F_0^s > -1, \quad (6.119)$$

$$\chi = \chi^0 \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^a} > 0 \Leftrightarrow F_0^a > -1. \quad (6.120)$$

Ist $F_0^a < -1$ ergibt sich eine ferromagnetische Instabilität.

6.7 Quasiteilchen-Lebenszeiten

Auf Grund der residualen Wechselwirkung $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ zwischen den Quasiteilchen haben selbige nur eine endliche Lebensdauer. Wir haben mehrmals erwähnt, dass das Quasiteilchen-Konzept nur deshalb funktioniert, weil die Streuraten $1/\tau$ für Teilchen nahe der Fermifläche rasch gegen 0 gehen und deshalb wohldefinierte Quasiteilchen-Zustände bei niedrigen Energien $\sim |\xi_{\vec{p}}| \sim 0$ existieren. Wir wollen die *single particle relaxation time* (*Einteilchenlebensdauer*) $\tau_{\vec{p}}$ berechnen, die definiert ist durch

$$\frac{\partial n_{\vec{p}}}{\partial t} = -\frac{n_{\vec{p}}}{\tau_{\vec{p}}}. \quad (6.121)$$

$\tau_{\vec{p}}$ lässt sich aus dem Streuintegral in Gl. (6.47) berechnen via

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\vec{p}_1}} &= \sum_{\substack{\vec{p}_2, \vec{p}_1', \vec{p}_2' \\ \sigma_2, \sigma_1', \sigma_2'}} W(\vec{p}_1, \sigma_1, \vec{p}_2, \sigma_2; \vec{p}_1', \sigma_1', \vec{p}_2', \sigma_2') \delta^3(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_1' - \vec{p}_2') \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1' - \varepsilon_2') \delta_{\sigma_1 + \sigma_2, \sigma_1' + \sigma_2'} n_2 [1 - n_1'] [1 - n_2']. \end{aligned} \quad (6.122)$$

In Gl. (6.122) haben wir die Erhaltung von Impuls, Energie und Spin explizit berücksichtigt. Die folgenden Manipulationen sind aufwändig und das Endresultat lautet (θ ist der Kollisionswinkel im Eingangskanal, $\cos \theta = \hat{p}_1 \cdot \hat{p}_2$)

$$\frac{1}{\tau_{\vec{p}}} = \frac{(m^*)^3}{16\pi^4 \hbar^2} \left\langle \frac{W}{\cos(\theta/2)} \right\rangle_{\theta} \frac{(\pi T)^2 + \xi_{\vec{p}}^2}{1 + e^{-\xi_{\vec{p}}/T}}. \quad (6.123)$$

Die Streuraten W lassen sich via Fermi's goldener Regel bestimmen, $W \sim (2\pi/\hbar)|A|^2$ und die Streuamplituden A folgen aus den Wechselwirkungsparametern $F_l^{s/a}$. Das Auffinden des exakten Zusammenhangs $W \leftrightarrow F_l^{s/a}$ ist schwierig und nutzlos, da die $F_l^{s/a}$ nicht alle bekannt sind. Deshalb folgen wir zwei Strategien:

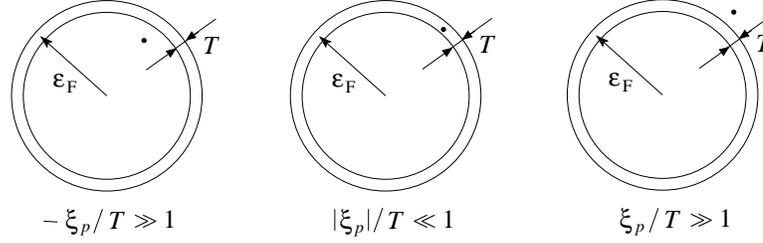


Abb. 6.11: Kategorien von Quasiteilchen mit verschiedenen Lebenszeiten: ein Quasi-Loch tief im Fermisee (links); ein thermisch angeregtes Quasiteilchen mit Energie $\sim T$ (mitte); ein ‘weit’ oberhalb des Fermisees angeregtes Quasiteilchen mit Energie $\xi_{\vec{p}}$.

- Für die allgemeine Fermi-Liquid-Beschreibung beschränken wir uns auf dimensionale Abschätzungen, und
- für ein geladenes Fermi-Liquid (z.B., e^- im Metall) wird W durch die Coulombwechselwirkung dominiert. Wir werden das Schlussresultat im Kap. 7 in Bornscher Näherung bestimmen.

Durch die dimensionale Abschätzung erhält man

$$W \sim \frac{2\pi}{\hbar} |A|^2 \sim \frac{2\pi}{\hbar} |f|^2 \sim \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{g^2} F^2 \sim \frac{\varepsilon_F^2}{\hbar n^2} F^2 \quad (6.124)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar/\tau_{\vec{p}}}{\varepsilon_F} \sim \langle F^2 \rangle \frac{(\pi T)^2 + \xi_{\vec{p}}^2}{\varepsilon_F^2} \frac{1}{1 + e^{-\xi_{\vec{p}}/T}}. \quad (6.125)$$

Wir diskutieren das Resultat für die wichtigsten Fälle, vgl. Abb. 6.11,

- $-\xi_{\vec{p}}/T \gg 1$ bzw. $\varepsilon_{\vec{p}} \ll \mu - T$, d.h., für Teilchen tief im Fermisee sind die Quasiteilchen stabil und $\tau_{\vec{p}} \rightarrow \infty$ exponentiell in $\xi_{\vec{p}}/T$.
- $|\xi_{\vec{p}}| \ll T$, d.h., QT sind nur innerhalb einer Energieschale der Breite $\sim T$ um die Fermifläche angeregt. Dann ist die Breite der Quasiteilchen-Resonanzen klein,

$$\frac{\Delta\xi}{\xi} \sim \frac{\hbar/\tau_{\vec{p}}}{T} \sim \frac{T}{\varepsilon_F} \ll 1. \quad (6.126)$$

- $\xi_{\vec{p}} \gg T$, d.h., die Quasiteilchen sind ‘weit’ oberhalb der Fermikante angeregt. Dann ist

$$\frac{\Delta\xi}{\xi} \sim \frac{\hbar/\tau_{\vec{p}}}{\xi_{\vec{p}}} \sim \frac{\xi_{\vec{p}}}{\varepsilon_F} \ll 1 \quad (6.127)$$

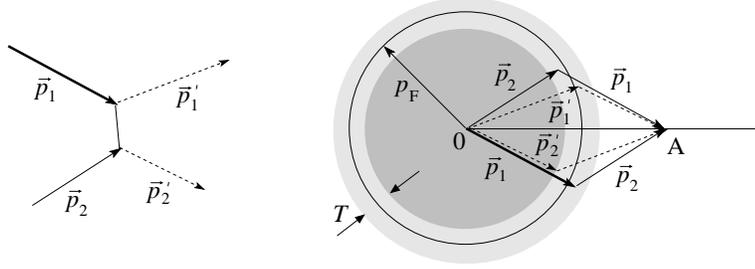


Abb. 6.12: Schematische Streuung von \vec{p}_1 und \vec{p}_2 nach \vec{p}_1' und \vec{p}_2' . Beachte, dass wegen der Impulserhaltung, $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{0A} = \vec{p}_1' + \vec{p}_2'$, der Phasenraum stark eingeschränkt ist. Abb. aus [Pin66].

solange $\xi_{\vec{p}} \ll \varepsilon_F$, d.h., in diesem Fall gibt es wohldefinierte niederenergetische QT-Anregungen.

Der tiefere Grund für diese Stabilität der Quasiteilchen ist die *Pauli-Blockade (PB)*, welche den *Phasenraum* stark einschränkt. Zusammen mit der Energie- und Impulserhaltung erlaubt die Pauliblockade nur Streuprozesse entlang der Fermioberfläche ($|\vec{p}_i| \sim |\vec{p}'_i| \sim \varepsilon_F$), vgl. Abb. 6.12.

6.7.1 Herleitung der QT Lebenszeit – Eine Tour de Force

Hier eine Skizze der Herleitung von Gl. (6.123), für Details siehe [Pin66]:

Mit $|\vec{p}_1| \sim |\vec{p}_2| \sim |\vec{p}'_1| \sim |\vec{p}'_2| \sim \varepsilon_F$ hängt $W(\vec{p}_1, \sigma_1, \vec{p}_2, \sigma_2; \vec{p}'_1, \sigma'_1, \vec{p}'_2, \sigma'_2)$ nur noch von den Winkeln und Spins ab. Die Winkel definieren wir im Schwerpunktsystem nach Abb. 6.13 (benutze $|\vec{p}| \sim p_F$ und $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2$)

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \vec{p} = (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)/2, \quad (6.128)$$

$$p \approx \frac{1}{2} 2 p_1 \sin(\theta/2) \approx p_F \sin(\theta/2), \quad (6.129)$$

$$P \approx 2 p_F \cos(\theta/2), \quad \theta \in [0, \pi[, \quad (6.130)$$

$$q = |\vec{p}_1 - \vec{p}'_1| \approx p_F \sin(\theta/2) 2 \sin(\phi/2) = 2p \sin(\phi/2). \quad (6.131)$$

Für W schreiben wir dann (zähle alle möglichen Spinkonfigurationen zu $\sigma_1 = \uparrow$ ab und nutze, dass $W_{\uparrow\downarrow} = W_{\downarrow\uparrow}$; der Faktor 2 ist eine praktische

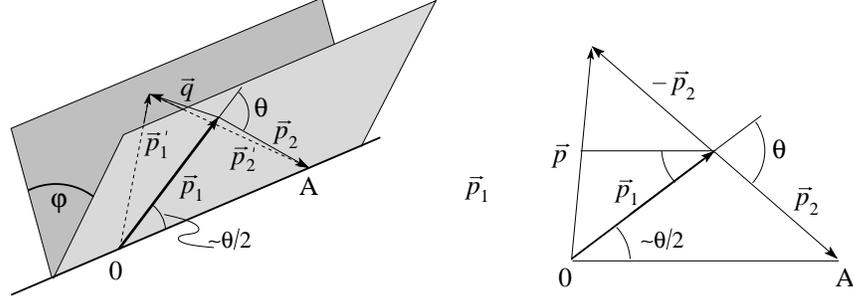


Abb. 6.13: Streuung $\vec{p}_1, \vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_1', \vec{p}_2'$ im Schwerpunktsystem. Abb. aus [Pin66].

Konvention; der Faktor $1/2$ steht für die Mittelung über σ_2)

$$2W(\theta, \varphi) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\sigma_2, \sigma_1', \sigma_2'} W(\dots) = W_{\uparrow\downarrow}(\theta, \varphi) + \frac{1}{2} W_{\uparrow\uparrow}(\theta, \varphi). \quad (6.132)$$

Die Summen $\sum_{\vec{p}_1}, \sum_{\vec{p}_2} \sum_{\vec{p}_2'}, \delta^3(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_1' - \vec{p}_2') \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1' - \varepsilon_2')$ ersetzen wir durch Integrale $\prod_i \int [d^3 p_i / (2\pi\hbar)^3]$; ein Integral (\vec{p}_2') fällt mit der δ^3 -Funktion weg, bleiben noch 6 Integrale. Ein weiteres fällt mit der δ -Funktion für die Energie weg, bleiben noch 5.

Um die Integrationen zu vereinfachen, schreiben wir $d^3 p_1' d^3 p_2$ auf Energie- und Winkelintegrale um. Wir messen \vec{p}_2 bezüglich des Polarwinkels θ zu \vec{p}_1 (siehe Abb. 6.14),

$$d^3 p_2 = p_2 \underbrace{d(p_2^2/2)}_{m^* p_F d\varepsilon_2} d\varphi_2 \sin \theta d\theta. \quad (6.133)$$

und schreiben (mit $\theta_1' \approx \theta/2$ und φ dem (Streu-)winkel zwischen \vec{p}_1 und \vec{p}_1')

$$d^3 p_1' = m^* p_F d\varepsilon_1' \sin \underbrace{\theta_1'}_{\theta/2} d\theta_1' d\varphi. \quad (6.134)$$

Das Winkelintegral $\int d\theta_1'$ schreiben wir auf ein Energieintegral $\int d\varepsilon_2'$ um: mit

$$dp_2' = p_F d\theta_1' \sin \theta = (1/p_2') d(p_2'^2/2) = (m^*/p_F) d\varepsilon_2' \quad (6.135)$$

erhalten wir $d\theta_1' = (m^*/p_F^2 \sin \theta) d\varepsilon_2'$. Damit finden wir ($\sin(\theta/2) = 1/2 \cos(\theta/2)$)

$$d^3 p_1' d^3 p_2 = (m^*)^3 d\varepsilon_1' d\varepsilon_2 d\varepsilon_2' \frac{\sin \theta}{2 \cos(\theta/2)} d\theta d\varphi_2 d\varphi \quad (6.136)$$

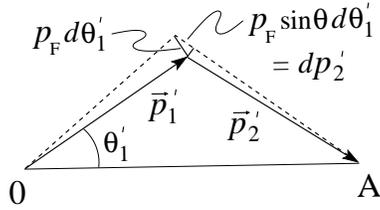


Abb. 6.14: Geometrie zur Berechnung der Integrale $\int d^3 p_1' \int d^3 p_2$.

und (wir schreiben $x_i = \xi_i/T$ und approximieren $n(x_i) \approx f(x_i) = 1/[1 + \exp(x_i)]$)

$$\frac{1}{\tau_{\vec{p}}} = \frac{(m^*)^3}{(2\pi\hbar)^6} \int W(\theta, \varphi) \frac{\sin \theta}{\cos(\theta/2)} d\theta d\varphi \int d\varphi_2 \quad (6.137)$$

$$\times T^2 \int dx_1' dx_2 dx_2' \delta(x_1 + x_2 - x_1' - x_2') [1 - f(x_1)] f(x_2) [1 - f(x_2')].$$

Das Integral $\int dx_1' dx_2 dx_2'$ ergibt $(1/2)[1 - f(x_1)](\pi^2 + x_1^2)$ und mit $\langle W/\cos(\theta/2) \rangle = \int (d\Omega/4\pi) W(\theta, \varphi)/\cos(\theta/2)$ finden wir Gl. (6.123).

Kapitel 7

Geladene Fermi-Flüssigkeiten

Die beweglichen Elektronen in Metallen bilden eine geladene Quantenflüssigkeit beschrieben durch den Hamiltonian¹

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V & (7.1) \\ H_0 &= \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma}, \quad \varepsilon_{\vec{p}}^0 = p^2/2m, \\ V &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}\vec{p}'\vec{q}\sigma\sigma'} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'-\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}\sigma}, \quad V_{\vec{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2} (1 - \delta_{\vec{q},0}); \end{aligned}$$

die δ -Funktion in $V_{\vec{q}}$ subtrahiert den positiven homogenen Hintergrund. Der zentrale Parameter der wechselwirkenden Elektronenflüssigkeit ist der Seitzradius $r_s = (3/4\pi a_B^3 n)^{1/3}$; ersetzen wir darin den Bohrradius $a_B = \hbar^2/me^2$ so erhalten wir r_s als Verhältnis von kinetischer Energie ε_F und Coulomb Energie $\varepsilon_C = e^2 k_F/\pi$,

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{1}{a_B^3 n} \right)^{1/3} = \left(\frac{2\pi}{3} \right)^{1/3} \frac{3\pi}{4} \frac{\varepsilon_C}{\varepsilon_F} \quad (7.2)$$

Für kleine $r_s \propto n^{-1/3}$ (i.e., bei hohen Dichten n) ist die kinetische Energie dominant und die Beschreibung als Fermiflüssigkeit ist korrekt; wir diskutieren vorab dieses Gebiet hoher Dichten. Bei grossen Werten von r_s (kleine

¹Wir erinnern, dass wir auf ein Volumen $\nu = 1$ normieren; die Energie $V_{\vec{q}}$ ergibt sich mit korrekter Dimension aus $V_{\vec{q}} = 4\pi e^2/q^2$.

Dichten n) ist die Coulombwechselwirkung dominant und das Elektronensystem zeigt vielfältige Instabilitäten, zum Beispiel eine (Wigner-) Kristallphase bei $r_s > 55 - 75$ (aus Monte Carlo Simulationen) oder eine ferromagnetische Instabilität in der Gegend von $r_s \sim 18$ (siehe dazu Ref. [Sarma05]).

Die langreichweitige Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung $V(r) \propto 1/r$, bzw. im Fourierraum $\propto 1/q^2$, führt auf zahlreiche Divergenzen in der Analyse des wechselwirkenden Systems. Als Beispiel können wir die störungstheoretische Berechnung der Grundzustandsenergie erwähnen,

$$E = \underbrace{\langle 0|H_0|0\rangle + \langle 0|V|0\rangle}_{=E^{(1)}=E_{\text{HF}}} + \underbrace{\sum_i \frac{\langle 0|V|i\rangle\langle i|V|0\rangle}{E_i - E_0}}_{=E^{(2)}} + \dots \quad (7.3)$$

In Hartree-Fock Approximation erhalten wir (mit Ryd = 13.6eV die Rydbergenergie)

$$E_{\text{HF}} = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^{\text{HF}} = N \left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right] \text{Ryd}, \quad (7.4)$$

$$\varepsilon_{\vec{p}}^{\text{HF}} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 + \Sigma_x(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{\pi} \left[1 + \frac{p_F^2 - p^2}{2pp_F} \ln \left| \frac{p_F + p}{p_F - p} \right| \right]. \quad (7.5)$$

$$(7.6)$$

Berechnen wir daraus die Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_{\vec{p}} = \partial \varepsilon_{\vec{p}}^{\text{HF}} / \partial \vec{p}$ bei p_F , finden wir eine logarithmische Singularität. Die Fermiliquid-Parameter $f_{\vec{p}\sigma\vec{p}'\sigma'}$ erhalten wir aus

$$\varepsilon_{\vec{p}\sigma}^{\text{HF}} = \frac{\partial E^{\text{HF}}}{\partial n_{\vec{p}\sigma}} = \varepsilon_{\vec{p}\sigma}^0 - \sum_{\vec{p}'\sigma'} n_{\vec{p}'\sigma'}^0 \delta_{\sigma\sigma'} V_{\vec{p}'-\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 + \Sigma_x(\vec{p}), \quad (7.7)$$

$$f_{\vec{p}\sigma\vec{p}'\sigma'} = \frac{\partial E^{\text{HF}}}{\partial n_{\vec{p}\sigma} \partial n_{\vec{p}'\sigma'}} = -V_{\vec{p}'-\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma'} = \frac{-2\pi e^2}{p_F^2 - \vec{p} \cdot \vec{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}; \quad (7.8)$$

sie zeigen eine Divergenz $\propto (1 - \cos \vartheta)$ im Vorwärtskanal (vgl. mit der Rutherfordstreuung). Die Berechnung der Gleichgewichts Koeffizienten κ , χ_p und c_V produziert reguläre Ausdrücke für κ und χ_p

$$\frac{\kappa}{\kappa^0} = \frac{\chi_p}{\chi_p^0} = \frac{1}{1 - (\alpha r_s / \pi)}, \quad \alpha = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \approx 0.521, \quad (7.9)$$

währenddem die (inverse) spezifische Wärme $1/c_V$ logarithmisch divergent

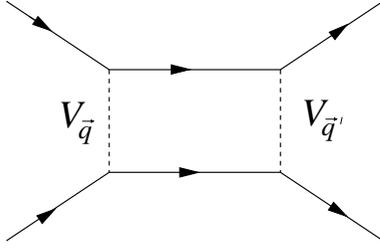


Abb. 7.1: Diagramm für $E^{(2)}$ in zweiter Ordnung in $V_{\vec{q}}$.

ist.² Das Resultat (7.9) signalisiert eine ferromagnetische Instabilität bei $r_s = \pi/\alpha = 6.03$ (ein magnetischer Phasenübergang zweiter Ordnung bei dem χ divergiert, eine Stoner-Instabilität; allerdings findet man schon bei der Dichte $r_s = 5.45$ einen erste-Ordnung Phasenübergang zum Bloch-Ferromagnetismus wo alle Elektronen sprunghaft den Spin parallel ausrichten ($\rightarrow p_F$ vergrößert sich um $2^{1/3}$) und die Elektronen reduzieren via Pauliprinzip (Austauschloch) ihre Coulombwechselwirkung³

In 2-ter Ordnung, vgl. Abb. 7.1, stösst man in der Berechnung von $E^{(2)}$ auf logarithmische Divergenzen, ebenso in höheren Ordnungen. Die störungstheoretische Behandlung des geladenen Systems führt demnach auf Divergenzen welche eine direkte Konsequenz der langreichweitigen Wechselwirkung $V(r) \propto 1/r$, $V_q \propto 1/q^2$ sind. Summiert man all diese Divergenzen auf, so erhält man allerdings wieder ein wohldefiniertes Resultat; dies ist eine Konsequenz der *Abschirmung*, die schliesslich auf das (metallisch) abgeschirmte Coulombpotential $V_q^{\text{scr}} = V_q/(1 + \lambda^2/q^2)$ führt.

Die Konsequenzen der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung sind vielseitig und wir werden einige davon aufzeigen. Wir beginnen, mit der Diskussion der makroskopischen Aspekte und wenden uns dann der Mikroskopie zu.

²Die Parameter F_0^a und F_0^s sind ebenfalls logarithmisch divergent (die Winkelintegration von $f_{\vec{p}\vec{p}'} = f(\cos\vartheta) \propto 1/(1 - \cos\vartheta)$ über den Winkel ϑ ist in Vorwärtsrichtung logarithmisch divergent), allerdings wird diese Divergenz nicht explizit in der Berechnung von κ und χ_p welche sich aus der wohldefinierten Hartree-Fock Grundzustandsenergie berechnen lassen; die spezifische Wärme c_V involviert Anregungen bei $T > 0$. Technisch kompensieren sich die log-Divergenzen in der Renormierung $(1 + F_0^{s/a})/(1 + F_1^s/3)$ von κ und χ , währenddem die Divergenz in $c_v \propto 1 + F_1^s/3$ erhalten bleibt.

³Die Hartree-Fock Werte für die kritischen Radien r_s sind ungenau; in RPA (siehe später) findet man $r_s|_{\text{Stoner}} \approx 18.7$ und $r_s|_{\text{Bloch}} \approx 17.8$, vgl. Ref. [Sarma05]).

7.1 Dielektrizitätskonstante und Leitfähigkeit

Eine externe Ladungsdichte $z\rho_{\text{ex}}(\vec{r}, t)$ erzeugt eine dielektrische Verschiebung $\vec{D}(\vec{r}, t)$,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = 4\pi z \rho_{\text{ex}}(\vec{r}, t). \quad (7.10)$$

Das externe Feld \vec{D} polarisiert das Medium und erzeugt eine *Polarisationsladung* $e\langle\rho(\vec{r}, t)\rangle$, welche ihrerseits einem Feld \vec{E}_P entspricht via

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_P = 4\pi e\langle\rho(\vec{r}, t)\rangle. \quad (7.11)$$

Das verbleibende elektrische Feld im Medium ergibt sich dann aus

$$\vec{E} = \vec{D} + \vec{E}_P, \quad (7.12)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi[z\rho_{\text{ex}}(\vec{r}, t) + e\langle\rho(\vec{r}, t)\rangle]. \quad (7.13)$$

Die entsprechenden Ausdrücke in Fourierdarstellung sind

$$i\vec{q} \cdot \vec{D}(\vec{q}, \omega) = 4\pi z \rho_{\text{ex}}(\vec{q}, \omega), \quad (7.14)$$

$$i\vec{q} \cdot \vec{E}(\vec{q}, \omega) = 4\pi[z\rho_{\text{ex}}(\vec{q}, \omega) + e\langle\rho(\vec{q}, \omega)\rangle]. \quad (7.15)$$

Die Antwort ist *longitudinal* und wir nehmen weiter an, dass sie linear ist. Wir können dann die *Dielektrizitätskonstante* $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ via

$$\vec{E}(\vec{q}, \omega) = \frac{\vec{D}(\vec{q}, \omega)}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (7.16)$$

definieren. Mit Gl. (7.14) und (7.15) erhalten wir daraus

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i e \langle\rho(\vec{q}, \omega)\rangle}{\vec{q} \cdot \vec{E}(\vec{q}, \omega)}, \quad (7.17)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} = 1 - \frac{4\pi i e \langle\rho(\vec{q}, \omega)\rangle}{\vec{q} \cdot \vec{D}(\vec{q}, \omega)}. \quad (7.18)$$

Die Gln. (7.17) und (7.18) scheinen einerseits äquivalent, sind es andererseits aber nicht! In einem Experiment treiben wir das System mit \vec{D} , nicht mit \vec{E} , da das *interne Feld* \vec{E} keine experimentell zugängliche Grösse ist. Die Gl. (7.18) liefert demnach die Systemantwort und wir sollen $\varepsilon^{-1}(\vec{q}, \omega)$ als Antwortfunktion auffassen.⁴

⁴Tatsächlich ist $1/\varepsilon = 1 + (4\pi e^2/q^2)\chi$ und für Plasmonen ist $\varepsilon = 0$, was einem Pol in der Antwortfunktion entspricht.

Oft beschreiben wir die Systemantwort lieber durch Ströme als durch Ladungen,

$$e\langle \vec{J}(\vec{q}, \omega) \rangle = \sigma(\vec{q}, \omega) \vec{E}(\vec{q}, \omega). \quad (7.19)$$

Beachte, dass diese Definition der *Leitfähigkeit* σ den Strom als Antwort auf das interne Feld \vec{E} (nicht \vec{D}) charakterisiert. Mit der Teilchenzahlerhaltung,

$$\vec{q} \cdot \langle \vec{J}(\vec{q}, \omega) \rangle = \omega \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle, \quad (7.20)$$

können wir die beiden longitudinalen Antwortfunktionen ε und σ verbinden,

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i \sigma(\vec{q}, \omega)}{\omega}. \quad (7.21)$$

Die einfachsten und wichtigsten Antworten des geladenen Elektronensystems sind die *statische Abschirmung*, beschrieben durch $\varepsilon(\vec{q}, 0)$, und die (dynamischen) Plasmaschwingungen, $\varepsilon(0, \omega)$, und wir wollen diese Phänomene kurz anschauen.

7.1.1 Statische Abschirmung

Wir definieren das zu \vec{E} gehörige skalare Potential ϕ ,

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi. \quad (7.22)$$

Die Variation des effektiven chemischen Potentials $\mu - e\phi(\vec{r})$ induziert eine Polarisation der Elektronen ($g = 3n/2\varepsilon_F$ Zustandsdichte),

$$\langle \rho(\vec{r}) \rangle \approx -\partial_\mu n e\phi(\vec{r}) = g e\phi(\vec{r}). \quad (7.23)$$

Mit Gl. (7.13) erhalten wir

$$q^2 \phi(\vec{q}) = 4\pi [z\rho_{\text{ex}}(\vec{q}) - ge^2 \phi(\vec{q})] \quad (7.24)$$

und nach einem Rearrangement von Termen die ‘massive’ Gleichung

$$[q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2}] \phi(\vec{q}) = 4\pi z\rho_{\text{ex}}(\vec{q}), \quad (7.25)$$

mit der ‘Masse’/Abschirmlänge

$$\frac{1}{\lambda_{\text{TF}}^2} = 4\pi ge^2 = \frac{6\pi ne^2}{\varepsilon_F}. \quad (7.26)$$

Aus der Lösung

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4\pi z\rho_{\text{ex}}(\vec{q})}{q^2 + 1/\lambda_{\text{TF}}^2} \quad (7.27)$$

erhalten wir sofort die statische Dielektrizitätskonstante

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, 0)} = \frac{\vec{q} \cdot \vec{E}}{\vec{q} \cdot \vec{D}} = \frac{q^2 \phi}{4\pi z \rho_{\text{ex}}} = \frac{q^2 4\pi z \rho_{\text{ex}}}{4\pi z \rho_{\text{ex}} (q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2})}, \quad (7.28)$$

$$\varepsilon(\vec{q}, 0) = 1 + \frac{1}{\lambda_{\text{TF}}^2 q^2}. \quad (7.29)$$

Typischerweise ist $\lambda_{\text{TF}}^2 k_{\text{F}}^2 = \pi \varepsilon_{\text{F}} / 2e^2 k_{\text{F}} \sim E_{\text{kin}} / E_{\text{pot}} \sim 1$ also $\lambda_{\text{TF}} \sim 1/k_{\text{F}} \sim 1 \text{ \AA}$. Die frei beweglichen Elektronen im Metall ‘machen die longitudinale Elektrostatik massiv’

$$\text{Vakuum} \rightarrow \text{Metall} \quad (7.30)$$

$$\nabla^2 \phi = -4\pi z \rho_{\text{ex}} \rightarrow [\nabla^2 - \lambda_{\text{TF}}^{-2}] \phi = -4\pi z \rho_{\text{ex}}. \quad (7.31)$$

Die Testladung $z \rho_{\text{ex}} = z \delta(\vec{r})$ umgibt sich dabei mit einer Abschirmladung, so dass nur noch ein Feld

$$\phi(\vec{r}) = \frac{z}{r} e^{-r/\lambda_{\text{TF}}} \quad (7.32)$$

übrigbleibt. Das langreichweitige Potential wird kurzreichweitig und fällt auf der Skala λ_{TF} ab; diese Abschirmskala wird durch den Wettbewerb zwischen E_{kin} (Druck) und E_{pot} (Verdrängung) bestimmt.

7.1.2 Plasmaschwingungen

Plasmaschwingungen sind ein dynamisches Phänomen, das komplementär zur Abschirmung (ein thermodynamisches Phänomen) ist. Bringen wir bei $t = 0$ eine Ladung ins System, bewegen sich die Elektronen, um diese Ladung abzuschirmen. Dabei schießen sie über das Ziel hinaus; unter der Voraussetzung, dass dieser Prozess nicht (bzw. nur schwach) durch Streuprozesse gedämpft wird, wiederholt er sich periodisch und wir erhalten eine Schwingung. In einer einfachen Analyse können wir das Elektronensystem aus der Ruhelage auslenken und die resultierende Dynamik untersuchen.

Wir betrachten im folgenden den langwelligen ($q \rightarrow 0$) Grenzfall: Das Auslenken des homogenen Elektronengases um δx erzeugt eine Kondensatorartige Situation (vgl. Abb. 7.2) mit elektrischem Feld

$$E = -4\pi e n \delta x. \quad (7.33)$$

Die Bewegungsgleichung der Elektronen ergibt sich aus einer Kombination ihrer Trägheit und den äusseren elektrischen Kräften,

$$m \delta \ddot{x} = eE = -4\pi n e^2 \delta x, \quad (7.34)$$

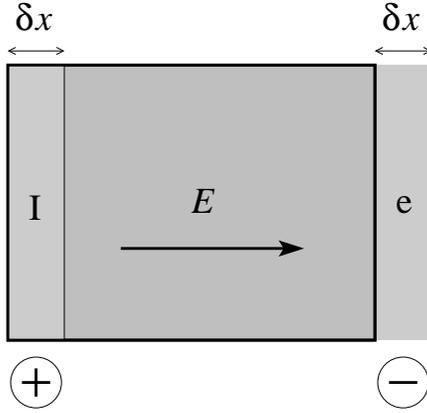


Abb. 7.2: Die Auslenkung des Elektronengases um δx erzeugt ein rücktreibendes elektrisches Feld E .

mit der Lösung

$$\delta x = \delta x_0 e^{-i\omega_p t} \quad (7.35)$$

und ω_p der *Plasmafrequenz*

$$\begin{aligned} \omega_p &= \left[\frac{4\pi n e^2}{m} \right]^{\frac{1}{2}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{v_F}{\lambda_{TF}} = \left[\frac{8}{3} \frac{p_F^2}{2m} \frac{e^2 p_F}{\pi} \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{8}{3} \varepsilon_F \varepsilon_C \right]^{\frac{1}{2}} \sim 10 \text{ eV} \sim 10^{15} \text{ s}^{-1}. \end{aligned} \quad (7.36)$$

Die Plasmaschwingungen sind hochfrequent ($1 \text{ eV} = 2.42 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$); Streuprozesse (Elektron–Elektron, Elektron–Defekte, Elektron–Phononen) haben Raten $1/\tau \sim 10^{12} \text{ s}^{-1}$ und sind damit typischerweise um einen Faktor 10^3 langsamer.⁵

Die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(0, \omega)$ für ein homogenes dynamisches System erhalten wir aus einer einfachen Transportanalyse: Die Schwingung $\delta x \exp(-i\omega t)$ erzeugt einen Strom $j = \sigma(\omega)E = en\delta\dot{x} = i(e^2 n/m\omega)E$ und resultiert in der Leitfähigkeit⁶

$$\sigma(\omega) = \frac{ie^2 n}{m\omega}; \quad (7.37)$$

⁵Im Halbleiter ist die Dichte $\rho_{HL} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3} \ll \rho_M \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und entsprechend ist die Plasmafrequenz $\omega_p \sim 10 - 100 \text{ meV}$ mit typischen Phononfrequenzen vergleichbar.

⁶Alternativ nutze man die Drudeformel (τ bezeichnet die Stosszeit/Transportzeit) $\sigma(\omega) = \sigma_0/(1 - i\omega\tau)$, $\sigma_0 = e^2 n\tau/m$; für $\omega\tau \gg 1$ erhält man $\sigma(\omega > 1/\tau) \approx ie^2 n/m\omega$.

mit Hilfe von (7.21) erhalten wir daraus unmittelbar das Resultat

$$\varepsilon(0, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 n}{m\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (7.38)$$

Die Plasmamode erhalten wir dann gerade als Nullstelle der Dielektrizitätskonstanten, $\varepsilon(\omega = \omega_p) = 0$. In nächsten Abschnitt zeigen wir mit Hilfe der Landau-Silin Transporttheorie, dass die Plasmamode bei ω_p nichts anderes als eine durch die langreichweitige Coulombwechselwirkung geliftete nullte-Schall Mode ist.

7.2 Landau-Silin-Theorie

Was geschieht mit der Landautheorie bzw. dem nullten Schall, wenn wir die Fermiflüssigkeit laden? Wie reagieren die *kollektiven Anregungen* auf die langreichweitige Coulomb-WW? Dass der naive Zugang nicht funktioniert, sieht man bereits in den Wechselwirkungsparametern mit ihren Divergenzen in Vorwärtsrichtung, $F_l^{s/a} \propto 1/(1 - \cos\theta)$ (vgl. Rutherfordsche Streuformel).⁷ Die Idee der *Landau-Silin-(LS)-Theorie* ist es, den regulären Fermiflüssigkeitsanteil in die Landauparameter $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ zu packen und den langreichweitigen Anteil gesondert zu behandeln; $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ enthält dann nur noch die abgeschirmte Wechselwirkung zwischen den Quasiteilchen. Diese Idee wird im folgenden verwirklicht.

7.2.1 Transportgleichung

Betrachte einen angeregten Zustand, der durch die Verteilungsfunktion $\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ beschrieben wird. Der Zustand produziert eine mittlere Ladungsverteilung

$$e\langle\rho(\vec{r}, t)\rangle = \sum_{\vec{p}} e \delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t), \quad (7.40)$$

welche ihrerseits ein Polarisationsfeld $\vec{E}_P(\vec{r}, t)$ via

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_P(\vec{r}, t) = 4\pi e\langle\rho(\vec{r}, t)\rangle \quad (7.41)$$

⁷Es ist

$$f_{\vec{p}\vec{p}'} = \int d^3r V(\vec{r}) e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} = -\frac{2\pi e^2}{p_F^2(1-\hat{p}\cdot\hat{p}')} \propto \frac{1}{1-\cos\theta}. \quad (7.39)$$

erzeugt. In der Transportgleichung für $\delta n_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ können wir dieses Polarisationsfeld als zusätzliches (externes) Kraftfeld betrachten. Übrig bleibt die Wechselwirkung zwischen (abgeschirmten) Quasiteilchen, welche keine langreichweitige Wechselwirkungskomponente mehr enthält, da letztere gerade durch das gemittelte \vec{E}_P -Feld beschrieben wird. Die verbleibende kurzreichweitige Wechselwirkung beschreibt den fluktuierenden Anteil der Wechselwirkung assoziiert mit den individuellen Quasiteilchen; wir beschreiben diese kurzreichweitige, reguläre Wechselwirkung zwischen den abgeschirmten Quasiteilchen durch die Landauparameter $f_{\vec{p}\vec{p}'}$. Für die lokale Energie eines Quasiteilchens schreiben wir wieder

$$\bar{\varepsilon}_{\vec{p}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}, \quad (7.42)$$

beachten aber, dass die Teilchen zusätzlich dem Feld \vec{E}_P unterworfen sind. Für die Transportgleichung erhalten wir anstelle von Gl. (6.58),

$$\begin{aligned} \partial_t \delta n_{\vec{p}} + \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta n_{\vec{p}} \\ + \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \vec{v}_{\vec{p}} \cdot \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \vec{\nabla}_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}'} - \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \vec{v}_{\vec{p}} \cdot e \vec{E}_P = \partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Mit $\delta n_{\vec{p}} \propto \exp[i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)]$ und der Lösung von Gl. (7.11), $e \vec{E}_P = -i\vec{q}(4\pi e^2, q^2) \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}}$, erhalten wir die Gleichung, vgl. Gl. (6.86),

$$(-\omega + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \delta n_{\vec{p}} - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \sum_{\vec{p}'} \left[f_{\vec{p}\vec{p}'} + \frac{4\pi e^2}{q^2} \right] \delta n_{\vec{p}'} = \partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}. \quad (7.44)$$

Die totale Wechselwirkung zwischen den Teilchen wird dann durch die Summe

$$f_{\text{total}} = f_{\vec{p}\vec{p}'} + \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (7.45)$$

von kurz- und langreichweitigen Komponenten $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ und $V_{\vec{q}}$ beschrieben.⁸ Eine langreichweitige Mode $\vec{q} \rightarrow 0$ hat damit eine singuläre Komponente in der Wechselwirkung.

⁸Beachte, dass $V_{\vec{q}}$ den makroskopischen Wellenvektor \vec{q} der Anregung und nicht die mikroskopischen Impulse \vec{p} der Teilchen enthält.

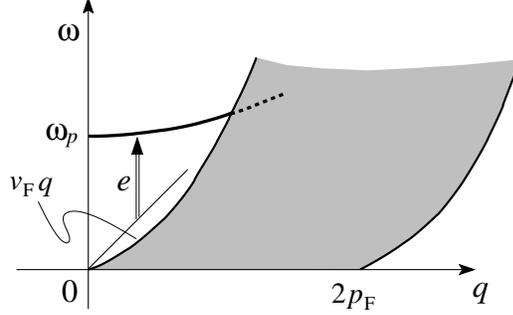


Abb. 7.3: Shift des nullten Schalls zur Plasmaschwingung durch die langreichweitige Coulombwechselwirkung. Paaranregungen im grauen Bereich; tritt die Plasmaschwingung in das Paarkontinuum ein so wird sie überdämpft (Landau Dämpfung). Abb. aus [Pin66].

7.2.2 Kollektive Moden

Longitudinal

Mit Gl. (7.44) können wir leicht untersuchen, was mit dem nullten Schall passiert: Wir setzen $\partial_t \delta n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} = 0$ und führen wieder das Verschiebungsfeld $u_{\vec{p}}$ der Fermifläche ein, $\delta n_{\vec{p}'} = \delta(\varepsilon_{\vec{p}'} - \mu) v_F u_{\vec{p}'}$. Mit $f_{\vec{p}\vec{p}'} \ll V_{\vec{q}}$ erhalten wir (vgl. Gl. (6.102), $\lambda = \omega/qv_F$, $F_0^s \Leftrightarrow 4\pi e^2 g/q^2$)

$$(\cos \theta - \lambda)u + \cos \theta \frac{4\pi e^2 g}{q^2} \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \frac{u}{2} = 0. \quad (7.46)$$

Die implizite Gleichung

$$\frac{\lambda}{2} \ln \frac{\lambda+1}{\lambda-1} = \frac{1}{F_0^s} \Leftrightarrow \frac{q^2}{4\pi e^2 g} \quad (7.47)$$

lösen wir im Limes $q \rightarrow 0$ ($\Leftrightarrow F_0^s \rightarrow \infty$, vgl. Abschnitt 6.4.3) und finden

$$\lambda^2 = \frac{F_0^s}{3} \Leftrightarrow \omega^2 = \frac{4\pi}{3} e^2 \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F} v_F^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} = \omega_p^2. \quad (7.48)$$

Der nullte Schall transformiert sich unter der langreichweitigen Coulombwechselwirkung in die Plasmaschwingung, vgl. Abb. 7.3.

Wir analysieren noch den Zusammenhang mit der Kompressibilität κ . Nehmen wir an, wir möchten $\kappa = [n^2 \partial_n \mu]^{-1}$ für das geladene Fermisystem bestimmen. Im geladenen System ist eine Dichteerhöhung δn mit einer unendlichen Energieerhöhung $\delta \mu$ verbunden, solange der positive Hintergrund

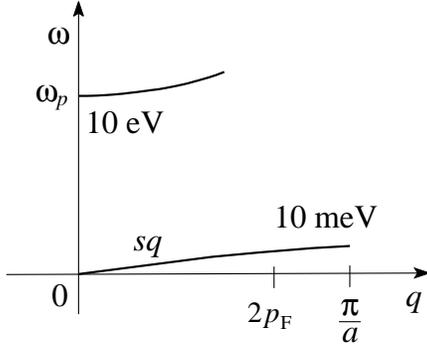


Abb. 7.4: Kollektive Moden einer geladenen Fermiflüssigkeit: bei der hochfrequenten Plasmamode vermag der ionogene Hintergrund nicht zu folgen und wir erhalten ein Gap; bei der langsamen Schallmode folgen die Ionen der Schwingung der Elektronen.

nicht mit deformiert wird; bei einem steifen Hintergrund ist $\kappa = 0$ und das Elektronensystem ist *inkompressibel*. Eine Schallmode hätte somit eine Schallgeschwindigkeit $s^2 \propto 1/\kappa \rightarrow \infty$. Da für die hochfrequente Plasmaschwingung der Hintergrund (ausgeschmierte Ionen) als statisch betrachtet werden kann ($m_{\text{Ion}} \gg m_e$), setzt die Plasmaschwingung bei endlichen hohen Frequenzen ein.

Andererseits ist der Hintergrund in Wirklichkeit kompressibel. Eine Dichteschwankung $\rho(\vec{r})$ erzeugt dann eine Dichteschwankung $\rho_H(\vec{r})$ im Hintergrund, deren Ladung $-e\rho_H(\vec{r})$ ein Polarisationsfeld \vec{E}_H erzeugt. Im Limes $\kappa_H \gg \kappa_e$ kann der Hintergrund (fast) perfekt folgen und die beiden Polarisationsfelder kompensieren einander, $\vec{E}_H + \vec{E}_P \approx 0$. Die Kompressibilität des Elektronensystems ist dann allein durch die Landau Parameter $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ der abgeschirmten Quasiteilchen bestimmt ($\partial_n \mu = mp_F/\pi^2 \hbar^2$),

$$\kappa = \frac{1}{n^2} \frac{mp_F}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^s} = \kappa_0 \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^s}. \quad (7.49)$$

Nehmen wir also eine niederfrequente kollektive Mode an, bei der sich der Hintergrund mit dem geladenen Fermisystem deformiert, so erhalten wir einen konventionellen Schall mit Schallgeschwindigkeit $s \sim 1/\sqrt{\kappa}$. Berücksichtigen wir noch die Masse des Hintergrundes in der Kinematik der Schwingung, so erhalten wir das Bohm-Staver-Resultat

$$s^2 = \frac{1}{(M/Z)n\kappa} = \frac{Zm}{M} \frac{1}{mn\kappa}. \quad (7.50)$$

Zusammenfassung: Verbinden wir die geladene Elektronenflüssigkeit und die

geladene Ionenflüssigkeit, so mischen sich deren kollektive Moden in eine (vgl. Abb. 7.4)

- hochfrequente Plasmamode (Hintergrund/Ionen können nicht folgen, $\kappa = 0$, $s = 0$, endliches Gap $\omega_p > 0$), und eine
- niederfrequente Schallmode (Hintergrund/Ionen können folgen, die endliche Kompressibilität $\kappa = \kappa_0(1 + F_1^s/3)/(1 + F_0^s)$ der Elektronenflüssigkeit ist dominant da $T_e \sim \varepsilon_F \gg T_H$, andererseits ist die Masse M der Ionen ist dominant, $M \gg m$, und es ergibt sich eine endliche Schallgeschwindigkeit $s < \infty$, kein Gap).

$\vec{q} \neq 0$ -Plasmaschwingungen

Bei grossen q können wir $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ nicht gegen $4\pi e^2/q^2$ vernachlässigen und die Plasmamode geht in den nullten Schall über. Die Abschätzung $\omega_p \sim v_F q$ ergibt, dass dies erst bei grossen $q \sim 1/\lambda_{TF} \sim p_F$ der Fall ist, wo unsere hydrodynamische Theorie nicht mehr brauchbar ist. Darüberhinaus dringt der Plasmaast bereits früher in das Paar Anregungsspektrum ein und wir erhalten Landaudämpfung, vgl. Abb. 7.3. Die genaue Dispersion der Plasmaschwingungen erhalten wir später aus den Nullstellen der Dielektrizitätskonstanten⁹ $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ [\Leftrightarrow Pole von $\varepsilon^{-1}(\vec{q}, \omega) = 1 + (4\pi e^2/q^2)\chi(\vec{q}, \omega)$ bzw. Pole von $\chi(\vec{q}, \omega)$].

Transversal

Wir können uns fragen, wie andere (vom nullten Schall verschiedene) kollektive Moden auf die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung reagieren:

⁹Dass die Nullstellen von ε gerade Dichteschwingungen des Systems ergeben, findet man leicht aus folgender makroskopischen Betrachtung: Mit

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{q} \cdot \vec{J} = \omega \rho, \quad (7.51)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi \rho \quad \Rightarrow \quad i\vec{q} \cdot \vec{E} = 4\pi \rho, \quad (7.52)$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad \Rightarrow \quad \vec{q} \cdot \vec{J} = \sigma \vec{q} \cdot \vec{E}, \quad (7.53)$$

finden wir die Modengleichung

$$(\vec{q} \cdot \vec{J}) \underbrace{(1 + 4\pi i \sigma / \omega)}_{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} = 0, \quad (7.54)$$

und wir erhalten longitudinale Plasmaschwingungen mit $\vec{q} \cdot \vec{J} \neq 0$, falls $\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 0$.

Moden mit $m \geq 1$ (transversale Moden mit $m = 1$; quadrupolare Moden mit $m = 2$, etc.) zeigen keine Dichteoszillationen und das Polarisationsfeld verschwindet, $\vec{E}_p = 0$. Die Moden mit $m \geq 2$ bleiben gänzlich unverändert. Für $m = 1$ treten bei den transversalen symmetrischen Moden ($m = 1, s$) zwar keine Ladungsfluktuationen, aber transversale Ströme auf, d.h., die elektromagnetischen Felder wirken auf die Mode zurück und die Transportgleichung muss selbstkonsistent mit den Maxwellgleichungen gelöst werden. Erstere liefert die transversale Dielektrizitätskonstante $\varepsilon_\perp(\vec{q}, \omega)$ (bzw. $\sigma_\perp(\vec{q}, \omega)$) und die (transversalen) Maxwellgleichungen ergeben die Wellengleichung für die elektromagnetische Strahlung im Medium, $[(\varepsilon_\perp(\vec{q}, \omega)/c^2) \partial_t^2 - \nabla^2] \vec{A}(\vec{q}, \omega) = 0$. Die Berechnung der Nullstellen der Wellengleichung $\omega^2 \varepsilon_\perp(\vec{q}, \omega) - c^2 q^2$ ergibt dann die transversalen Moden der geladenen Fermiflüssigkeit; für $\omega \gg v_F q$ ist $\varepsilon_\perp(\vec{q} \sim 0, \omega) \approx 1 - \omega_p^2/\omega^2 (= \varepsilon_\parallel)$ und wir erhalten eine Lichtmode (Photon) $\omega(q) = \sqrt{\omega_p^2 + c^2 q^2}$ mit einem Gap ω_p , vgl., Abb. 7.5. Bei kleinen Wellenlängen $cq \gg \omega_p$ koppelt die Lichtmode nur schwach an die Elektronen und die Dispersion ist lichtartig, $\omega \sim cq$, bei kleinen Frequenzen $cq \ll \omega_p$ ist die Kopplung zu den Elektronen stark und die Dispersion wird dramatisch korrigiert, $\omega \sim \omega_p$. Für $\omega < \omega_p$ kann das Licht nicht im Medium propagieren und wird demnach reflektiert (dies ist der Ursprung des metallischen Glanzes; der Wert von ω_p (und Eigenschaften der Bandlücken) ergeben die Farbe des Metalles.

Wie bereits im Abschnitt 6.4.3 erwähnt existiert in einem neutralen System für genügend starke Wechselwirkung $F_1^s > 6$ eine $m = 1$ spin-symmetrische transversale Mode. Für schwache Kopplung zum Elektromagnetismus ($qc \gg \omega_p$) ergibt sich keine grosse Modifikation dieser Mode; im Limes $qc \ll \omega_p$ starker Kopplung wird die tiefliegende Mode von der Photonmode abgestossen und ins Paarkontinuum gedrückt, vgl. Abb. 7.5; für $q < \omega/c$ wird die tiefliegenden transversale Mode via Landaudämpfung zerstört.

7.3 Transportanalyse

In einer zweiten Runde berechnen wir die Antwortfunktionen $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ und $\sigma(\vec{q}, \omega)$ via der Transportgleichung (vgl. (6.58))

$$-\omega \delta n_{\vec{p}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} + i\delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) e\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} = 0, \quad (7.55)$$

wobei wir den Stossterm ignoriert haben, eine Approximation gültig im Bereich $\omega > 1/\tau$, $q > 1/l$ mit τ der typischen Stosszeit und $l = v_F \tau$ der

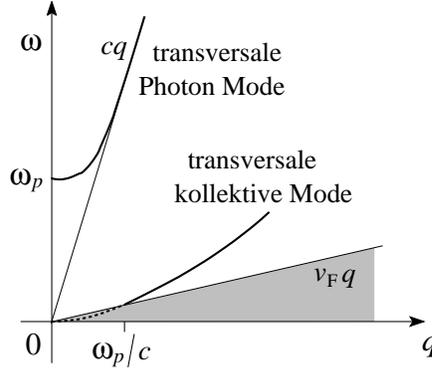


Abb. 7.5: Transversale kollektive Moden einer geladenen Fermiflüssigkeit: für $\omega \gg v_F q$ ergibt sich eine lichtartige Mode mit einem Gap gegeben durch die Plasmafrequenz ω_p . Die tiefliegende transversale Mode erzeugt durch den Landauparameter $F_1^s > 6$ wird im Bereich starker elektromagnetischer Kopplung (d.h., für $qc \ll \omega_p$) ins Paarkontinuum gedrängt und verschwindet via Landaudämpfung.

mittleren freien Weglänge. Das elektrische Feld \vec{E} ist ein selbst-konsistentes inneres \vec{E} -Feld, longitudinal oder transversal, und wir berechnen die durch dieses Feld induzierten Ladungen oder Ströme¹⁰ (vgl. (6.59), (6.62) und (6.61))

$$e\rho = 2e \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} \quad (7.56)$$

$$e\vec{J} = 2e \sum_{\vec{p}} \delta \tilde{n}_{\vec{p}} \vec{v}_{\vec{p}} \stackrel{\vec{q}=0}{=} 2e \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} p_{\vec{p}}/m. \quad (7.57)$$

Der Quotient zwischen induzierten Ladungen (Ströme) und dem treibenden longitudinalen (transversalen) Feld gibt uns dann die Antwortfunktion ε (σ). Schliesslich bemerken wir noch, dass die Beziehung zwischen der Dielektrizitätskonstanten ε und der Leitfähigkeit σ sowohl für longitudinale als auch für transversale Felder gilt: in einem isotropen Medium ist (mit \vec{q} in 1-Richtung)

$$\begin{aligned} [\varepsilon(\vec{q}, \omega)]_{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} \varepsilon_{\parallel}(\vec{q}, \omega) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega) \end{pmatrix} \\ &= 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \begin{pmatrix} \sigma_{\parallel}(\vec{q}, \omega) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\perp}(\vec{q}, \omega) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\perp}(\vec{q}, \omega) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.58)$$

¹⁰Der zweite Ausdruck für den Strom gilt (wegen der Galileiinvarianz) für das homogen bewegte System wo keine internen Ströme fließen.

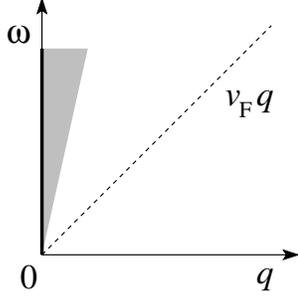


Abb. 7.6: Bereich $q = 0$, $qv_F \ll \omega$, $\omega \neq 0$ im $\omega - q$ Diagramm.

7.3.1 Limes $qv_F \ll \omega$

Betrachte zuerst den Limes $q = 0$, $qv_F \ll \omega$, $\omega \neq 0$, vgl. Abb. 7.6.

Die Lösung der Transportgleichung (7.55)

$$\delta n_{\vec{p}}(0, \omega) = \frac{ie\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}}{\omega} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \quad (7.59)$$

hängt nicht von \vec{q} ab. Dabei geben longitudinale ($\vec{E} \parallel \vec{q}$) und transversale ($\vec{E} \perp \vec{q}$) Felder die gleiche 'optische' ($\omega = cq \gg v_F q$ im optischen Bereich) Antwort. Im Ausdruck Gl. (7.57) für den Strom $e\vec{J}$ gibt nur der Anteil $l = 1$ einen Beitrag und mit $\delta \bar{n}_1 = \delta n_1(m^*/m)$ finden wir ($m^*v_F = p_F$, $3\pi^2 n = p_F^3$; alternativ nutze man den Stromausdruck für ein Galilei-Invariantes System.)

$$\begin{aligned} e\vec{J} &= 2e \sum_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} \vec{v}_{\vec{p}} \\ &= 2ie^2 \frac{m^*}{m} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{(\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \vec{v}_{\vec{p}}}{\omega} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \end{aligned} \quad (7.60)$$

$$= \frac{ie^2 m^*}{\pi^2 m \omega v_F} \int p^2 dp \int \frac{d\Omega_{\hat{p}}}{4\pi} (\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \vec{v}_{\vec{p}} \delta(p - p_F) \quad (7.61)$$

$$= \frac{ie^2 m^*}{3\pi^2 m \omega v_F} p_F^2 v_F^2 \vec{E} = \frac{iNe^2}{m\omega} \vec{E}; \quad (7.62)$$

damit ergeben sich die Leitfähigkeiten ($\sigma = J/E$) und Dielektrizitätskonstanten

$$\sigma_{\parallel, \perp}(q \sim 0, \omega \gg v_F q) = \frac{ine^2}{m\omega}, \quad (7.63)$$

$$\varepsilon_{\parallel, \perp}(q \sim 0, \omega \gg v_F q) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (7.64)$$

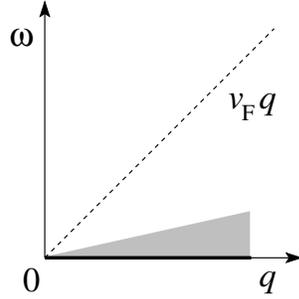


Abb. 7.7: Bereich $q \neq 0$, $qv_F \ll \omega$, $\omega \neq 0$ im $\omega - q$ Diagramm.

Damit haben wir die optische Leitfähigkeit bei hohen Frequenzen und die Signatur der Plasmaschwingungen in der Dielektrizitätskonstanten gefunden. Beachte, dass hier die nackte Masse m und nicht die effektive Masse m^* eingeht.

7.3.2 Limes $\omega \ll qv_F$

Als nächstes studieren wir den Limes $q \neq 0$, $\omega = 0$, $\omega \ll qv_F$, vgl. Abb. 7.7.

Die Lösung der Transportgleichung (7.55)

$$\delta \bar{n}_{\vec{p}}(\vec{q}, 0) = \frac{-ie\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}}{\vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \quad (7.65)$$

hängt jetzt von \vec{q} ab und wir müssen die longitudinale und die transversale Antwort unterscheiden.

Longitudinale Antwort

Mit $\vec{E} = \vec{q}E/q$ können wir (7.65) schreiben als

$$\delta \bar{n}_{\vec{p}} = -\frac{ie}{q} E \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \quad (7.66)$$

und finden für die Dichte ρ unter Berücksichtigung der Beziehung

$$\delta n_{\vec{p}}(l=0) = \frac{\delta \bar{n}_{\vec{p}}(l=0)}{1 + F_0^s} \quad (7.67)$$

das Resultat

$$e\rho = 2e \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}} = \frac{-2ie^2}{1 + F_0^s} \frac{1}{\pi^2 q} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \int dp p^2 \frac{1}{v_F} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \quad (7.68)$$

$$= -\frac{ie^2N}{ms^2q}E \quad (7.69)$$

mit der Schallgeschwindigkeit

$$s^2 = \frac{m^*}{3m}v_F^2(1 + F_0^s). \quad (7.70)$$

Damit erhalten wir die Signatur der *Abschirmung* in der Dielektrizitätskonstanten,

$$\varepsilon(\vec{q}, 0) = 1 + \frac{4\pi ne^2}{ms^2q^2} = 1 + \frac{\omega_p^2}{s^2q^2}. \quad (7.71)$$

Die Leitfähigkeit $\sigma_{\parallel}(\vec{q}, 0)$ ist reaktiv, $\propto \omega$ und

$$\sigma_{\parallel}(\vec{q}, \omega \rightarrow 0) = -\frac{ine^2}{m\omega} \frac{\omega^2}{q^2 s^2}. \quad (7.72)$$

Transversale Antwort

Das Einsetzen von Gl. (7.59) in den Ausdruck für \vec{J} ergibt (mit $1/(x - i\eta) = P(1/x) + i\pi\delta(x)$ für $\eta \rightarrow 0^+$; nur die δ -Funktion gibt einen endlichen Beitrag)

$$\begin{aligned} e\vec{J} &= 2e \sum_{\vec{p}} \delta\bar{n}_{\vec{p}} \vec{v}_{\vec{p}} \\ &= -ie^2 g^0(\mu) \int d\varepsilon_{\vec{p}}^0 \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{4\pi} (\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \frac{\vec{v}_{\vec{p}}}{\vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} - i\eta} \\ &= e^2 \pi \frac{3N}{2\varepsilon_F} \int d\phi \vec{E} v_F^2 \sin^2 \phi \frac{1}{qv_F} = \frac{3\pi N e^2}{4 p_F q} \vec{E}, \end{aligned} \quad (7.73)$$

und wir finden die transversale, dissipative Leitfähigkeit

$$\sigma_{\perp}(\vec{q}_{\perp}, 0) = \frac{4\pi e^2 n}{3 p_F q}. \quad (7.74)$$

Das Resultat ist unabhängig von m^* und $F_l^{s/a}$, eine Messung von $\sigma_{\perp}(\vec{q}, 0)$ ergibt damit Rückschlüsse auf die wirkliche Fermifläche. Experimentell wird σ_{\perp} durch den Skineffekt gemessen. Allerdings führt die $1/q$ -Dispersion in Gl. (7.74) auf einen *anomalen Skineffekt*, bei dem $J_y(x) \sim \int^x E_y(x') dx'$ nichtlokal vom Feld \vec{E} abhängt. Dieser Limes wird erreicht, wenn $1/q \ll l, v_F/\omega$ erfüllt ist (v_F/ω ist gerade die Flugdistanz über eine Periode). Beachte, dass das Resultat in Gl. (7.74) keine transversale Abschirmung ergibt, vgl. die Diskussion im Abschnitt 10.

Die Formeln Gl. (7.71) und (7.74) divergieren im Limes $\omega \rightarrow 0$ und $\vec{q} \rightarrow 0$. In diesen Grenzfällen gilt immer $\omega\tau < 1$ und $ql < 1$ für jedes endliche $\tau < \infty$ und wir können den Stossterm in Gl. (9.31) nicht vernachlässigen. Wir werden im Kapitel 9 nochmals auf diesen Punkt eingehen.

7.4 Mikroskopische Analyse

In dieser dritten Runde ziehen wir auf einen mikroskopisch fundierten Ausdruck für die longitudinale Antwortfunktion $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ ab.

7.4.1 Dielektrizitätskonstante aus Dichte-Korrelationen

Wir haben gesehen, dass jegliche Störung des geladenen Fermisystems durch ein skalares Potential ϕ eine Dichteänderung als Antwort hat. Dies führt zu einer Abschirmung, falls ϕ statisch ist, bzw. zu Plasmaschwingungen, falls ϕ dynamisch ist. Wir können deshalb erwarten, dass die longitudinale (skalare) Antwort des geladenen Systems durch die Dichte-Dichte-Korrelation $\chi(\vec{q}, \omega)$ determiniert wird. Dies ist tatsächlich der Fall: Mit Gl. (5.19) und Gl. (5.24) definieren wir $\chi(\vec{q}, \omega)$ via

$$H' = \sum_{\vec{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{\rho_{-\vec{q}}} e^{-i\omega t} \phi_{\vec{q}\omega}, \quad (7.75)$$

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho_{\vec{q}\omega} \rangle}{e\phi_{\vec{q}\omega}}. \quad (7.76)$$

Ein externes Potential $\phi_{\vec{q}\omega}$ erzeugt ein \vec{D} -Feld $\vec{D} = -i\vec{q}\phi_{\vec{q}\omega}$; mit $\vec{q} \cdot \vec{D} = -iq^2\phi_{\vec{q}\omega}$ erhalten wir aus der Definition (7.18) der Dielektrizitätskonstanten den Ausdruck

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} = 1 - \frac{4\pi ie \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{\vec{q} \cdot \vec{D}} = 1 + \frac{4\pi e^2 \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{q^2 e\phi_{\vec{q}\omega}} \quad (7.77)$$

$$= 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega) = 1 + V_{\vec{q}} \chi(\vec{q}, \omega) \quad (7.78)$$

mit

$$V_{\vec{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2}. \quad (7.79)$$

Mit Gl. (5.26) erhalten wir sofort einen exakten Ausdruck für die longitudinale Dielektrizitätskonstante,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} &= 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right] \\ &= 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int_0^\infty d\omega' S(\vec{q}, \omega') \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right]. \end{aligned} \quad (7.80)$$

Der dynamische Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$ spielt also die Rolle der spektralen Dichte der inversen Dielektrizitätskonstanten $1/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$. Dissipative Prozesse werden durch $\text{Im}1/\varepsilon = \varepsilon''/|\varepsilon|^2$ beschrieben ($\varepsilon \equiv \varepsilon' + i\varepsilon''$),

$$\frac{\varepsilon''(\vec{q}, \omega)}{|\varepsilon|^2} = \frac{4\pi^2 e^2}{q^2} [S(\vec{q}, \omega) - S(\vec{q}, -\omega)], \quad (7.81)$$

und es gilt die Summenregel, vgl. Gl. (5.30),

$$\int_0^\infty d\omega \omega \frac{\varepsilon''(\vec{q}, \omega)}{|\varepsilon|^2} = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 = \frac{2\pi^2 n e^2}{m}. \quad (7.82)$$

Man kann zeigen, dass $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ und $1/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ dieselben Analytizitätseigenschaften haben. Weiter ist $\varepsilon(\vec{q}, \omega \rightarrow \infty) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$, vgl. (7.80) und Abschnitt 5.2.1. Mit $\varepsilon(\omega) \in \mathcal{A}(\mathbb{C}^+)$ ergeben sich die Summenregeln

$$\int_{-\infty}^\infty d\omega \omega \varepsilon(\vec{q}, \omega) = -i \int_0^\pi d\varphi r^2 e^{i2\varphi} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{r^2 e^{i2\varphi}} \right) = i\pi \omega_p^2, \quad (7.83)$$

$$\int_0^\infty d\omega \omega \varepsilon''(\vec{q}, \omega) = \frac{\pi}{2} \omega_p^2, \quad \int_0^\infty d\omega \sigma'(\vec{q}, \omega) = \frac{\omega_p^2}{8}. \quad (7.84)$$

Die Kompressibilitätssummenregel in Gl. (5.40) und (5.41) ist problematischer, da die Kompressibilität κ bezüglich des abgeschirmten Feldes definiert ist, siehe die Diskussion in Abschnitt 5.2.1.

In Analogie zu Gl. (7.17) und (7.18) können wir die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ durch die Antwort auf das abgeschirmte Feld $\vec{E}(\vec{q}, \omega)$ ausdrücken: Mit Gl. (7.17),

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i e \rho}{\vec{q} \cdot \vec{E}}, \quad (7.85)$$

und $E = D/\varepsilon$ erhalten wir

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i e \rho \varepsilon}{\vec{q} \cdot \vec{D}} = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \varepsilon \chi(\vec{q}, \omega), \quad (7.86)$$

$$\Rightarrow \varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_{\text{scr}}(\vec{q}, \omega), \quad (7.87)$$

mit $\chi_{\text{scr}} = \varepsilon \chi = \langle \rho \rangle / \phi_{\text{scr}}$ der Dichteantwort auf ein *abgeschirmtes* Potential $\phi_{\text{scr}} = \phi / \varepsilon$. Ebenso finden wir via dem Zusammenhang $\varepsilon = 1 + 4\pi i \sigma / \omega$, Gl. (7.21), die Leitfähigkeit

$$\sigma(\vec{q}, \omega) = \frac{i\omega e^2}{q^2} \chi_{\text{scr}}(\vec{q}, \omega). \quad (7.88)$$

Beachte, dass σ die Antwort auf ein abgeschirmtes internes \vec{E} -Feld gibt, $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ (nicht $\vec{j} = \sigma \vec{D}$). Auf Grund der Diskussion in Abschnitt 7.1.2 sieht man leicht ein, dass die Kompressibilitätssummenregeln Gl. (5.40) und (5.41) für χ_{scr} , nicht aber für χ gelten.¹¹ Es gilt deshalb

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{\text{scr}}(\vec{q}, 0) = -\frac{N}{ms^2} \quad (7.89)$$

und mit Gl. (7.87) erhalten wir die statische Dielektrizitätskonstante

$$\varepsilon(\vec{q} \rightarrow 0, 0) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \left(-\frac{n}{ms^2} \right) = 1 + \frac{\omega_p^2}{q^2 s^2}; \quad (7.90)$$

für freie Elektronen reproduzieren wir mit $s^2 = v_F^0{}^2/3$ das Thomas-Fermi-Resultat

$$\varepsilon(\vec{q} \rightarrow 0, 0) = 1 + \left(\frac{\omega_p \sqrt{3}}{v_F^0 q} \right)^2 = 1 + \frac{1}{\lambda_{\text{TF}}^2 q^2}. \quad (7.91)$$

Mit der Kramers-Kronig-(KK)-Relation (\mathcal{P} Hauptwert),

$$\varepsilon'(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \varepsilon''(\vec{q}, \omega') \mathcal{P} \left(\frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \right), \quad (7.92)$$

erhalten wir im Limes $\omega = 0$ und $q \rightarrow 0$ die Summenregel (benutze $\varepsilon'(\vec{q} \rightarrow 0, 0) = 1 + \omega_p^2 / q^2 s^2$)

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\varepsilon''(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{\pi}{2} \frac{\omega_p^2}{q^2 s^2}. \quad (7.93)$$

Ebenso finden wir unter Anwendung der Kramers-Kronig Relation für $1/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ im Limes $\omega = 0$ mit $q \rightarrow 0$ die Summenregel

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\varepsilon''(\vec{q}, \omega)}{\omega |\varepsilon(\vec{q}, \omega)|^2} = \frac{\pi}{2}. \quad (7.94)$$

¹¹ κ bleibt nur für eine abgeschirmte Kompression endlich.

Zur besseren Übersicht sammeln wir die vier Summenregeln in folgender Liste (wir benutzen dabei die Relation (7.81) zwischen $\varepsilon''(\vec{q}, \omega)$ und $S(\vec{q}, \omega)$):

$$(7.82) : \int_0^\infty d\omega \omega S(\vec{q}, \omega) = \frac{Nq^2}{2m}, \quad f\text{-sumrule} \quad (7.95)$$

$$(7.93) : \lim_{q \rightarrow 0} \int_0^\infty d\omega \frac{S(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{q^2 \nu}{8\pi e^2}, \quad \kappa\text{-sumrule} \quad (7.96)$$

$$(7.84) : \int_0^\infty d\omega \omega S(\vec{q}, \omega) |\varepsilon(\vec{q}, \omega)|^2 = \frac{Nq^2}{2m}, \quad f\text{-sumrule} \quad (7.97)$$

$$(7.94) : \lim_{q \rightarrow 0} \int_0^\infty d\omega \frac{S(\vec{q}, \omega)}{\omega} |\varepsilon(\vec{q}, \omega)|^2 = \frac{N}{2ms^2}, \quad \kappa\text{-sumrule}. \quad (7.98)$$

Es ist interessant, diese Summenregeln etwas zu diskutieren. Wir bemerken zuerst, dass wir Gl. (7.97) und (7.98) mit $\varepsilon = 1 - 4\pi e^2 \chi_{\text{scr}}/q^2$ umschreiben können zu

$$-\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \omega \chi_{\text{scr}}''(\vec{q}, \omega) = \frac{Nq^2}{m}, \quad (7.99)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\chi_{\text{scr}}''(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{N}{ms^2}. \quad (7.100)$$

Der Vergleich mit Gl. (5.29), (5.30), (5.40) und (5.41) zeigt, dass die abgeschirmte Suszeptibilität χ_{scr} gerade der Suszeptibilität χ eines neutralen Systems entspricht. Tatsächlich können wir mit¹² $\chi'' = \chi_{\text{scr}}''/|\varepsilon|^2$ die beiden Antwortfunktionen schreiben als

$$\begin{aligned} \chi''(\vec{q}, \omega) &= -\pi \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}), \\ \chi_{\text{scr}}''(\vec{q}, \omega) &= -\pi \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} \varepsilon(\vec{q}, \omega) | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \end{aligned} \quad (7.101)$$

Das Resultat in Gl. (7.101) interpretieren wir wie folgt: Mit Hilfe der Beziehung

$$\underbrace{\rho_{\text{bare}}}_{\varepsilon \rho_{-\vec{q}} \text{ in } \chi_{\text{scr}}''} = \varepsilon \underbrace{(\rho_{\text{bare}} + \rho_{\text{pol}})}_{\rho_{-\vec{q}} \text{ in } \chi''} \quad (7.102)$$

und der Definition (7.87) sehen wir, dass χ_{scr} (χ) die Antwort auf das abgeschirmte (externe) Feld \vec{E} (\vec{D}) ist und das abgeschirmte (volle) Potential

¹²Benutze $\chi_{\text{scr}}'' = \varepsilon'' \chi' + \varepsilon' \chi''$ und $1/\varepsilon = 1 + i(4\pi e^2/q^2)\chi$.

$V_{\text{scr}}(V)$ zwischen ‘neutralen’ (abgeschirmten) Teilchen involviert.¹³

Somit finden wir, dass χ_{scr} tatsächlich die Antwort eines korrespondierenden neutralen Systems gibt. Entsprechend beschreibt χ_{scr} sowohl die spektrale Dichte der Paar- und Multipaaranregungen als auch eine kollektive Mode vom Typ des nullten Schalls (falls F_0^s gross ist). Das Plasmon enthält kein Gewicht in χ_{scr} bei $\omega \approx \omega_p$ und $\vec{q} \rightarrow 0$, wo $\varepsilon(\vec{q}, \omega_p) = 0$ ist. Nur χ enthält die spektrale Dichte des Plasmons, denn $\chi \sim 1/\varepsilon$ hat bei $(\vec{q}, \omega_p(\vec{q}))$ einen Pol. Es ergibt sich, dass die Paar- und Multipaaranregungen via Gl. (7.99) und (7.100) die Summenregeln Gl. (7.97) und (7.98) ausschöpfen, wogegen die Plasmonen die Summenregeln (7.95) und (7.96) übernehmen (für $\vec{q} \rightarrow 0$). Splitten wir entsprechend die spektrale Dichte $S(\vec{q}, \omega)$ in einen Plasmon- und einen Quasiteilchen-Anteil (Paar- und Multipaaranregungen), $S = S_{\text{pl}} + S_{\text{QT}}$, so schöpft der Plasmon-Anteil $S_{\text{pl}}(\vec{q}, \omega) = A\delta(\omega - \omega_{\vec{q}})$ die Summenregeln von Gl. (7.95) und (7.96) aus und wir erhalten

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} S_{\text{pl}}(\vec{q}, \omega) = \frac{Nq^2}{2m\omega_p} \delta(\omega - \omega_p), \quad (7.103)$$

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{m}. \quad (7.104)$$

Mit Gl. (7.80) erhalten wir daraus sofort

$$\varepsilon(\vec{q} \rightarrow 0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (7.105)$$

Damit haben wir die beiden wichtigen Limites der *statischen Abschirmung*,

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{\omega_p^2}{s^2 q^2}, \quad (7.106)$$

und der *dynamischen Plasmaschwingung*,

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (7.107)$$

aus Summenregeln von völlig allgemeiner Natur hergeleitet. Für eine ausführlichere Diskussion dieser subtilen Zusammenhänge verweisen wir auf das Buch von Pines und Nozieres [Pin66], Kap. 4.2.¹⁴

¹³Zur Vermeidung von Doppelzählungen in der Abschirmung berücksichtige man dieselbe *entweder* im Feld (\vec{E}, V_{scr} versus \vec{D}, V) *oder* in den Dichten (ρ_{bare} versus $\rho_{\text{bare}} + \rho_{\text{pol}}$), aber nicht in beiden.

¹⁴Studiere die Implikationen des Resultates Gl. (7.106) für $\text{Re}\sigma(0, \omega)$. Beachte, dass wir keine Streueffekte mitgenommen haben, d.h. die Pole sind infinitesimal nahe der reellen Achse.

Schliesslich erwahnen wir noch das wichtige Resultat fur den statischen Strukturfaktor $S(\vec{q})$,

$$S(\vec{q} \rightarrow 0) = \frac{q^2}{2m\omega_p} \approx \frac{q}{2ms} q\lambda_{\text{TF}}, \quad (7.108)$$

welches sofort aus Gl. (7.103) und der Definition von $S(\vec{q}) = (1/n) \int_0^\infty d\omega S(\vec{q}, \omega)$ folgt. Im Vergleich dazu ist der statische Strukturfaktor fur das neutrale System linear in q ,¹⁵

$$S(\vec{q} \rightarrow 0) = \frac{q}{2ms}, \quad (\text{Hydrodynamik}) \quad (7.109)$$

$$= \frac{3}{4} \frac{q}{p_F}, \quad (\text{nicht-WW Fermionen}) \quad (7.110)$$

$$s^2 = \frac{1}{\kappa mn}. \quad (7.111)$$

Wir haben jetzt die Ausdrucke fur $\varepsilon(\vec{q})$ und $\varepsilon(\omega)$ via Summenregeln fest etabliert. Im folgenden benutzen wir approximative Methoden, um einen Ausdruck fur $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ fur alle \vec{q} und ω zu erhalten. Dabei werden uns obige Betrachtungen im Auffinden der besten und einfachsten Approximation sehr hilfreich sein.

7.4.2 Hartree-Fock, Random-Phase, Lindhard

Aus Abschnitt 7.4 kennen wir zwei mikroskopische Ausdrucke fur $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$,

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega), \quad (7.112)$$

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_{\text{scr}}(\vec{q}, \omega). \quad (7.113)$$

Dabei entspricht χ_{scr} einem analogen neutralen Fermisystem mit kurzreichweitiger Wechselwirkung. Approximieren wir χ_{scr} durch den Ausdruck χ_0 fur ein nicht-wechselwirkendes Fermigas, so sollte dies eine gute Approximation ergeben; diese Approximation ist unter dem Namen *Random-Phase-Approximation* bekannt,

$$\varepsilon_{\text{RPA}} = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(\vec{q}, \omega), \quad (7.114)$$

¹⁵Beachte: $S(\vec{q})$ ist manchmal verschieden definiert, mit oder ohne $\delta(\vec{q})$ -Term.

wobei χ_0 bei $T = 0$ bzw. $T \neq 0$ durch die Gln. (5.27) und (5.58) bzw. (5.61) gegeben ist,¹⁶

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_0(\vec{q}, \omega') \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right] \quad (7.116)$$

$$= \sum_{\vec{p}\sigma} \frac{n_{\vec{p}\sigma}^0 (1 - n_{\vec{p}\sigma}^0) 2\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0}{(\omega + i\eta)^2 - (\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0)^2} \quad (7.117)$$

$$= \sum_{\vec{p}\sigma} \frac{n_{\vec{p}\sigma}^0 - n_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^0}{\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0 + i\eta}, \quad (7.118)$$

mit $\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0 = \varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}}^0 - \varepsilon_{\vec{p}}^0$.

In diagrammatischer Technik lässt sich χ^0 via (freier) Greenscher Funktionen

$$\mathcal{G}_0(\vec{p}, ip_n) = \frac{1}{ip_n - (\varepsilon_{\vec{p}}^0 - \mu)} = \frac{1}{ip_n - \xi_{\vec{p}}^0} \quad (7.119)$$

schreiben als

$$\chi_0(\vec{q}, i\omega_n) = \sum_{\vec{p}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_0(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}_0(\vec{p} + \vec{q}, i\omega_n + ip_n) \quad (7.120)$$

$$= \sum_{\vec{p}\sigma} \frac{n_{\vec{p}}^0 - n_{\vec{p}+\vec{q}}^0}{i\omega_n + \varepsilon_{\vec{p}}^0 - \varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}}^0}, \quad (7.121)$$

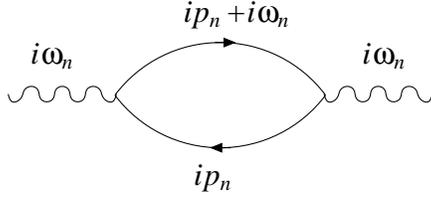
die einfachste fermionische Polarisationsblase, siehe Abb. 7.8 Dabei sind $\omega_n = 2\pi nT$ bosonische Matsubara-Frequenzen, $p_n = 2\pi(n + 1/2)T$ fermionische Matsubara-Frequenzen, und $\beta = 1/T$ bezeichnet die inverse Temperatur. Die Gl. (7.118) folgt dann aus Gl. (7.121) durch analytische Fortsetzung, $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$, auf die reelle Achse.

Bevor wir den Ausdruck (7.118) für χ^0 auswerten, gehen wir nochmals zur Definition (7.78) der inversen Dielektrizitätskonstanten zurück. Setzen wir dort für χ den Ausdruck χ^0 für die freien Elektronen ein, so erhalten wir das störungstheoretische Resultat für die Dielektrizitätskonstante in erster

¹⁶Im letzten Schritt benutze man

$$\frac{2\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0}{(\omega + i\eta)^2 - (\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0)^2} = \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0 + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0 + i\eta} \quad (7.115)$$

und ersetze $\vec{p} \rightarrow -\vec{p} - \vec{q}$, $\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0 \rightarrow -\omega_{\vec{p}\vec{q}}^0$

Abb. 7.8: Feynman Diagram für χ^0 (Polarisationsblase).

Ordnung in $V_{\vec{q}} = 4\pi e^2/q^2$, d.h., das Hartree-Fock–Resultat,

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{HF}}} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(\vec{q}, \omega) = 1 + V_{\vec{q}} \chi_0(\vec{q}, \omega). \quad (7.122)$$

Nehmen wir an, dass die Kopplung $V_{\vec{q}}$ klein sei ($e^2 \rightarrow 0$), so sehen wir leicht ein, dass das RPA-Resultat gerade die Dysonreihe zum Hartree-Fock–Resultat darstellt,

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{RPA}}} = \frac{1}{1 - V_{\vec{q}} \chi_0(\vec{q}, \omega)} = \underbrace{1 + V_{\vec{q}} \chi_0(\vec{q}, \omega)}_{= 1/\varepsilon_{\text{HF}}} + [V_{\vec{q}} \chi_0(\vec{q}, \omega)]^2 + \dots \quad (7.123)$$

Als (triviale) Anwendung betrachten wir die störungstheoretische Aufsummierung der Polarisationsdiagramme die uns aus dem Potential $V_{\vec{q}}$ (4-er Vertex) das abgeschirmte Potential $V_{\vec{q}}/\varepsilon$ erzeugt, vgl. dazu mit Abb. 7.9,

$$\begin{aligned} \frac{V_{\vec{q}}}{\varepsilon} &= V_{\vec{q}} + V_{\vec{q}} \chi^0 V_{\vec{q}} + V_{\vec{q}} \chi^0 V_{\vec{q}} \chi^0 V_{\vec{q}} + \dots \\ &= V_{\vec{q}} [1 + \chi^0 V_{\vec{q}} + (\chi^0 V_{\vec{q}})^2 + \dots] = V_{\vec{q}} \left[1 + \chi^0 \frac{V_{\vec{q}}}{\varepsilon} \right] \quad (7.124) \\ &= \frac{V_{\vec{q}}}{1 - \chi^0 V_{\vec{q}}}; \end{aligned}$$

das abgeschirmte Potential $V_{\vec{q}}/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ tritt in Gl. (7.87), das nackte Potential $V_{\vec{q}}$ in Gl. (7.78) auf.

Beachte, dass ε_{RPA} nicht exakt ist, die RP Approximation ist aber viel besser als der Hartree-Fock Ausdruck ε_{HF} : in Gl. (7.123) haben wir immer noch χ_0 für χ geschrieben. χ müssten wir aber für ein Fermionsystem mit abgeschirmter WW berechnen, nicht für ein freies FS. Allerdings summiert die Gl. (7.123) die "divergentesten" Diagramme in jeder Ordnung.

Schliesslich zitieren wir das Lindhard-Resultat, welches wir aus Gl. (7.123) durch Ausführen der Summe über \vec{p} erhalten (vgl. dazu mit Abb. 7.10),

$$\varepsilon'_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) \quad (7.125)$$

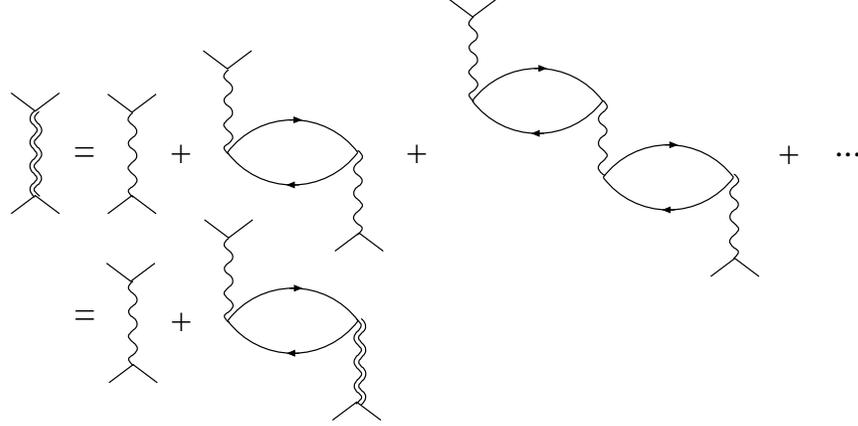


Abb. 7.9: Summation der Polarisationsblasen (RPA) für das abgeschirmte Potential $V_{\vec{q}}/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$, Abb. aus [Pin66].

$$\begin{aligned}
 &= 1 + \frac{1}{\lambda_{\text{TF}}^2 q^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{p_{\text{F}}}{4q} \left[\left(\frac{(\omega + q^2/2m)^2}{(qv_{\text{F}}^0)^2} - 1 \right) \ln \left| \frac{\omega - qv_{\text{F}}^0 + q^2/2m}{\omega + qv_{\text{F}}^0 + q^2/2m} \right| \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \left(\frac{(\omega - q^2/2m)^2}{(qv_{\text{F}}^0)^2} - 1 \right) \ln \left| \frac{\omega - qv_{\text{F}}^0 - q^2/2m}{\omega + qv_{\text{F}}^0 - q^2/2m} \right| \right] \right\}, \\
 \varepsilon''_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) &= \frac{\pi/2}{\lambda_{\text{TF}}^2 q^2} \begin{cases} \omega/qv_{\text{F}}^0, & 0 < \omega < qv_{\text{F}}^0 - q^2/2m, \\ \frac{p_{\text{F}}}{q} \left[1 - \frac{(\omega - q^2/2m)^2}{(qv_{\text{F}}^0)^2} \right], & |\omega - qv_{\text{F}}^0| < q^2/2m, \\ 0, & qv_{\text{F}}^0 + q^2/2m \leq \omega. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Diese Ausdrücke ergeben die korrekten Limites $\varepsilon(0, \omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ und $\varepsilon(\vec{q} \rightarrow 0, 0) = 1 + 1/q^2 \lambda_{\text{TF}}^2$ (das Thomas-Fermi-Resultat,¹⁷ nicht das Summenregel-Resultat $1 + \omega_p^2/q^2 s^2$). Weiter erhalten wir aus den Nullstellen von $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ die Plasmadispersion,

$$\omega_q = \omega_p \left[1 + \frac{3}{10} \left(\frac{qv_{\text{F}}^0}{\omega_p} \right)^2 \right]. \quad (7.127)$$

Der kritische Impuls $q_c \sim \omega_p/v_{\text{F}}^0$, oberhalb dessen Landaudämpfung eintritt,

¹⁷Eine genaueres Resultat ist gegeben durch

$$\varepsilon_{\text{RPA}}(q = 2xp_{\text{F}}, 0) = 1 + \frac{1}{\lambda_{\text{TF}}^2 q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right]. \quad (7.126)$$

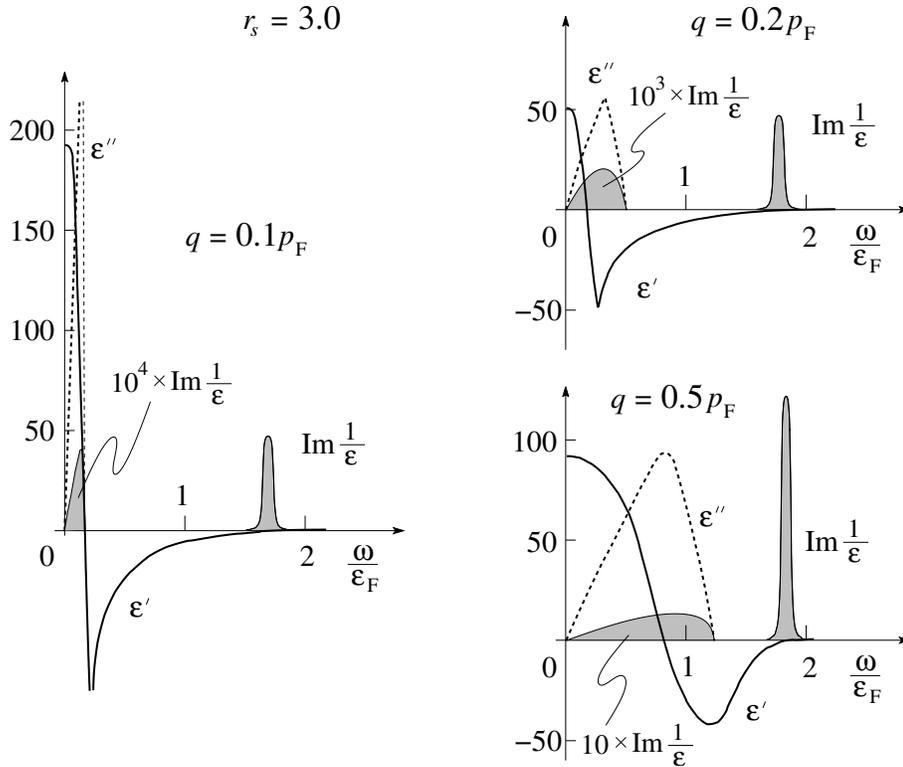


Abb. 7.10: Real- und Imaginärteile ϵ' und ϵ'' der Lindhardfunktion (Skizze). Der schraffierte Bereich markiert die Stärke der Dissipation gegeben durch den Strukturfaktor $S = \text{Im}(1/\epsilon)/\pi v_q$. Der Vorzeichenwechsel in ϵ' definiert die Position des Plasmonpeaks.

ist bestimmt durch die Beziehung¹⁸

$$\epsilon(q_c, \omega_{q_c} = q_c v_F^0 + q_c^2/2m) = 0. \quad (7.128)$$

Das Verhalten der Dielektrizitätskonstanten bestimmt die optischen Eigenschaften eines Materials: Ein negativer Realteil $\epsilon' < 0$ signalisiert hohe Reflexion, ein positiver Realteil $\epsilon' > 0$ steht für Transmission, und ein endlicher Imaginärteil $\epsilon'' > 0$ signalisiert ein dissipatives Verhalten mit Absorption. Die drei Regimes folgen der Regel TART (Transmission-Absorption-Reflexion-Transmission), vgl. Abb. 7.11

¹⁸Übung: Berechne einen genaueren Ausdruck für q_c .

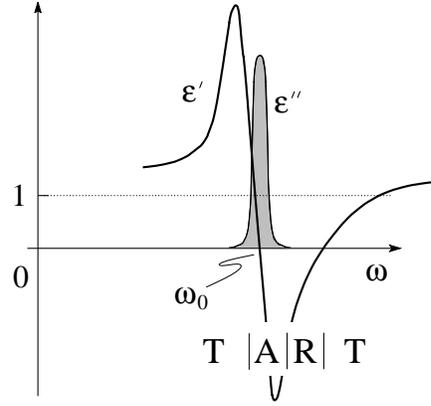


Abb. 7.11: Die optischen Eigenschaften eines Materiales sind durch die Dielektrizitätskonstante bestimmt: Transmission ($\varepsilon' > 0$), Absorption ($\varepsilon'' > 0$), Reflexion ($\varepsilon' < 0$). In der Nähe einer Resonanz ω_0 ergibt sich die Abfolge TART.

7.5 Elektron-Plasmon-Hamiltonoperator

Wir diskutieren den Zusammenhang zwischen dem Hamiltonoperator der Elektronen mit Coulombwechselwirkung und dem entsprechenden Hamiltonian mit abgeschirmter Wechselwirkung. Wir zeigen, dass sich der Hamiltonoperator (7.1),

$$H = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}\sigma}^0 c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'-\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}\sigma} \quad (7.129)$$

mit

$$\varepsilon_{\vec{p}\sigma}^0 = p^2/2m, \quad (7.130)$$

$$V_{\vec{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2} (1 - \delta_{\vec{q},0}), \quad (7.131)$$

als Elektron-Plasmon-Hamiltonoperator der Form schreiben lässt

$$H = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}\sigma}^0 c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma', q > q_c}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'-\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}\sigma} \quad (7.132)$$

$$+ \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_p(\vec{q}) a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + \sum_{\substack{\vec{p}\sigma \\ q < q_c}} \sqrt{\frac{\pi e^2 \hbar^3}{V \omega_p m^2 q^2}} (2\vec{q} \cdot \vec{p} + q^2) c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger)$$

schreiben lässt. Dabei dient $q_c = 1/\lambda_{\text{TF}}$ im Wechselwirkungsterm als Impulscutoff bei der Thomas-Fermi Abschirmlänge. Dieser Term lässt sich auch

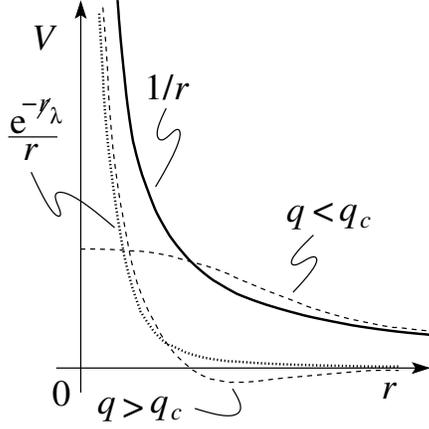


Abb. 7.12: Die Coulombwechselwirkung $\propto 1/r$ (ausgezogene Linie) lässt sich zerlegen in Komponenten $q < q_c$ und $q > q_c$ (gestrichelt; Skizze). Die Komponente zu $q > q_c$ lässt sich gut durch ein Yukawa-Potential $\propto \exp(-r/\lambda)/r$ approximieren (gepunktet).

schreiben als abgeschirmte Wechselwirkung (vgl. Abb. 7.12)

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}', \vec{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\vec{q}}^{\text{scr}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'-\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}\sigma} \quad (7.133)$$

mit

$$V_{\vec{q}}^{\text{scr}} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2}} (1 - \delta_{\vec{q},0}). \quad (7.134)$$

Der dritte und vierte Term beschreibt die Energie der Plasmonen mit Dispersion $\omega_p(\vec{q})$ und ihre Wechselwirkung mit den Elektronen. Diese Terme resultieren aus den langwelligen Beiträgen ($q < q_c$) in der Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Zusätzlich tauchen auch 2-Plasmonen Terme auf die wir hier ignorieren.

Wir starten mit dem klassischen Hamiltonoperator

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2}. \quad (7.135)$$

Nach einer Fouriertransformation teilen wir die Summe über \vec{q} in die kurz- und langwelligen Beiträge $q > q_c$ und $q < q_c$ auf,

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\sum_{\substack{q < q_c \\ q \neq 0}} + \sum_{q > q_c} \right) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \frac{4\pi e^2}{q^2}. \quad (7.136)$$

Die Eichfreiheit der Elektrodynamik erlaubt uns die Coulombwechselwirkung im Hamiltonoperator via Umeichung durch ein Eichpotential \vec{A} auszudrücken,

$$H = \sum_i \frac{1}{2m} \left(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i) \right)^2 + \frac{1}{8\pi} \int d^3r E^2, \quad (7.137)$$

mit $\vec{E} = -c^{-1} \partial_t \vec{A}$ und \vec{A} durch Elektronen erzeugte longitudinale Felder,¹⁹

$$\vec{A}(\vec{r}_i) = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{\nu}} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{\vec{q}}{q} Q_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}. \quad (7.138)$$

Das \vec{E} -Feld ist durch die konjugierten Variablen $P_{\vec{q}}$ gegeben,

$$\vec{E} = -\sqrt{\frac{4\pi}{\nu}} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{\vec{q}}{q} P_{\vec{q}}^* e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}, \quad (7.139)$$

mit $\dot{Q}_{\vec{q}} = P_{\vec{q}}^* = -P_{-\vec{q}}$. Wir drücken dann die Terme $q < q_c$ in Gl. (7.136) durch die \vec{A} - und \vec{E} -Felder aus und belassen die Moden $q > q_c$ in der alten Form,

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{1}{2m} \left[\vec{p}_i + e \sqrt{\frac{4\pi}{\nu}} \sum_{\substack{q < q_c \\ \vec{q} \neq 0}} \frac{\vec{q}}{q} Q_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \right]^2 & (7.140) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{q > q_c} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \frac{4\pi e^2}{q^2} - \frac{1}{2} 4\pi n e^2 \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{1}{q^2} \\ &+ \frac{1}{2\nu} \sum_{q, q' < q_c} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q q'} P_{\vec{q}} P_{\vec{q}'} \underbrace{\int d^3r e^{i(\vec{q} + \vec{q}') \cdot \vec{r}}}_{\delta_{\vec{q}, -\vec{q}'}}. \end{aligned}$$

Die Quantisierung via $[r_{i\nu}, p_{j\mu}] = -i\hbar \delta_{ij} \delta_{\nu\mu}$ und $[P_{\vec{k}}, Q_{\vec{k}'}] = -i\hbar \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$, ergibt dann den Ausdruck

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{q > q_c} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \frac{4\pi e^2}{q^2} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{q < q_c} \left[P_{\vec{q}}^\dagger P_{\vec{q}} + \omega_p^2 \left(Q_{\vec{q}}^\dagger Q_{\vec{q}} - \frac{m}{q^2} \right) \right] \end{aligned}$$

¹⁹Mit $Q_{-\vec{q}} = -Q_{\vec{q}}^*$ ist $\vec{A}(\vec{r})$ ein reelles Feld.

$$\begin{aligned}
& + \sqrt{\frac{4\pi e^2}{\nu m^2}} \sum_{q < q_c} Q_{\vec{q}} \frac{\vec{q}}{q} \cdot \sum_i \left[\vec{p}_i - \frac{\hbar \vec{q}}{2} \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \\
& + \frac{4\pi e^2}{2\nu m} \sum_{\substack{q, q' < q_c \\ -\vec{q} \neq \vec{q}'}} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q q'} Q_{\vec{q}} Q_{\vec{q}'} \sum_i e^{i(\vec{q} + \vec{q}') \cdot \vec{r}_i}. \quad (7.141)
\end{aligned}$$

Die beiden ersten Terme beschreiben Elektronen mit abgeschirmter Wechselwirkung, gefolgt von der Energie der Plasmonen (der Term $\propto m/q^2$ ergibt einen konstanten Shift). Die beiden letzten Terme beschreiben die Elektron-Plasmon Wechselwirkung sowie 2-Plasmonen Prozesse. In einer ‘Random Phase Approximation’ (RPA) argumentiert man, dass sich die Phasen in $\sum_i \exp[i(\vec{q} + \vec{q}') \cdot \vec{r}_i]$ fast zufällig addieren (random phase) und man diesen Term deshalb vernachlässigen kann.²⁰ Gehen wir zur 2-ten Quantisierung über, so erhalten wir sofort die Gl. (7.132).

Beachte, dass wir mit den Operatoren $P_{\vec{q}}$ und $Q_{\vec{q}}$ neue Freiheitsgrade eingeführt haben; dies scheint aber nur so! Denn die $P_{\vec{q}}$ sind via dem Gauss’schen Gesetz $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho$ an die Elektronen-Positionen \vec{r}_i gekoppelt,

$$P_{\vec{q}} - i \sqrt{\frac{4\pi e^2}{q^2}} \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} = 0. \quad (7.142)$$

Schliesslich bestimmt man den cutoff q_c so, dass die Plasmonen nicht in das Paar Anregungsspektrum hineinreichen, $q_c \approx \omega_p/v_F \approx 1/\lambda_{TF}$; damit wird vermieden, dass die Plasmonen aufgrund der Landaudämpfung ihren Quasiteilchen Charakter verlieren.

7.6 Elektronen in Metallen

In den Kapiteln 1 bis 3 haben wir uns um die ”Festkörper“-Aspekte der Elektronen, wie z.B. das periodische Potential, gekümmert; in den Kapiteln 4 bis 7 hingegen, haben wir hauptsächlich den Vielteilchenaspekt der Elektronenflüssigkeit berücksichtigt. Dabei haben wir in Kap. 4 bis 7 immer isotrope, homogene Fermisysteme behandelt. Die Kapitel 1 bis 3 haben uns aber klar gezeigt, dass Elektronen in Metallen durch das Ionenpotential stark beeinflusst werden; letzteres erzeugt einen inhomogenen und anisotropen Hintergrund und dadurch eine eventuell komplizierte anisotrope

²⁰Geht man über die RPA hinaus so beschreibt der letzte Term 2-Plasmonen-Prozesse und die Summe \sum_i berücksichtigt die Erhaltung des Impulses.

Fermifläche. In diesem Abschnitt wollen wir kurz die Kombination dieser Festkörper- und Vielteilchenaspekte diskutieren.

Die Anisotropie des Kristallgitters erzeugt eine QT-Dispersion $\varepsilon_{\vec{p}}$, welche von der Richtung \vec{p} abhängig ist. Ebenso werden die Landauparameter abhängig von \vec{p} und \vec{p}' , $\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'}$. Die Situation vereinfacht sich etwas in näherungsweise isotropen Materialien, z.B., in den Alkalimetallen; die Zahl der Parameter reduziert sich dort drastisch. Bezeichnen wir die Kristallmasse mit m_c und die effektive Masse der Quasiteilchen an der Fermikante mit m^* , so liefert uns ein Vergleich der Ströme $\vec{j}_{\vec{p}} = \vec{p}/m_c$ und der Geschwindigkeiten $\vec{v}_{\vec{p}} = \vec{p}/m^*$ unter Berücksichtigung von (siehe 6.62)

$$\vec{j}_{\vec{p}} = \vec{v}_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta(\varepsilon_{\vec{p}'} - \mu) \underbrace{\vec{v}_{\vec{p}'}}_{\text{isotrop}} \equiv \vec{v}_{\vec{p}} (1 + F_1^s/3), \quad (7.143)$$

die wichtige Beziehung

$$m^* = m_c (1 + F_1^s/3); \quad (7.144)$$

statt m erscheint nun die Bandmasse m_c als neue ‘nackte’ Masse. Dabei sollte eigentlich m_c die Kristalleffekte und F_1^s die WW-Effekte mitnehmen, aber, wie wir gesehen haben, enthält m_c via V_{xc} und V_{pseudo} auch Effekte der Coulombwechselwirkung: Das Splitting von m^* in Bandeffekte (m_c) und Wechselwirkungs-Effekte (F_1^s) ist nichttrivial, allerdings oft auch unnötig. Z.B. ergeben sich für κ und χ_p die Ausdrücke

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1 + F_0^s} = \frac{m_c}{m} \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^s}, \quad (7.145)$$

$$\frac{\chi_p}{\chi_p^0} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1 + F_0^a} = \frac{m_c}{m} \frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^a}. \quad (7.146)$$

Die Gl. (7.144) definiert damit eine Pseudo-Nackte-Masse, welche m substituiert. Ebenso können wir eine Pseudoschallgeschwindigkeit s^2 via

$$n\kappa = ms^2 \quad (7.147)$$

definieren. Die physikalischen Größen hängen dann nur von der Kombination ms^2 , d.h. der Kompressibilität κ , ab.

Beachte, dass das e^- -System im Festkörper keinen eigenen Schall hat; die Dichtewelle mischt mit derjenigen der Ionen, vgl. Abschnitt 7.2, oder wird zur Plasmamode geliftet (statische Ionen, $\omega_p(q) \approx \omega_p$, kein Schall).

Weiter erwähnen wir, dass auch die spezifische Wärme c_v und die Zyklotronfrequenz ω_c die effektive Masse m^* enthalten,²¹

$$C_v = \frac{m^*}{m} C_v^0, \quad \omega_c = \frac{eB}{m^* c} = \frac{m}{m^*} \omega_{c0}, \quad (7.148)$$

während die Leitfähigkeit im streufreien, langwelligen Limes von der nackten *Bandmasse* m_c abhängt,

$$\sigma(0, \omega) = \frac{ine^2}{m_c \omega}, \quad (7.149)$$

$$\varepsilon(0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (7.150)$$

mit $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / m_c$. Die Frage ob m durch m_c oder m^* zu ersetzen sei bleibt eine trickige Angelegenheit.

²¹Beachte: ω_c involviert m^* , aber sonst keine WW $f_{\vec{p}\vec{p}'}$ zwischen den Quasiteilchen.

Kapitel 8

Gitterdynamik

Wir starten mit dem fundamentalen Hamiltonoperator für die Materie

$$H = T_e + T_K + V_{ee} + V_{eK} + V_{KK}. \quad (8.1)$$

In Kapitel 1 bis 3 haben wir vor allem die Terme $T_e + V_{eK}$ betrachtet, wobei V_{ee} als mittleres Feld berücksichtigt wurde. In den Kapiteln 4 bis 7 haben wir dann $T_e + V_{ee}$ studiert. In diesem Kapitel wollen wir uns vor allem auf die Terme $T_K + V_{KK} + V_{eK}$ konzentrieren, wobei die elektronische Wechselwirkung in V_{ee} wiederum als mittleres Feld die Potentiale V_{KK} und V_{eK} mitbestimmt. Die Terme $T_K + V_{KK}$ geben uns die Phononen und der Term V_{eK} führt uns auf die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen. Im Unterschied zu den Kapiteln 1 bis 3 nehmen wir jetzt die Dynamik T_K der Ionen mit.

8.1 Phononen

Die kinetische Energie der Kerne ist gegeben durch

$$T_K = \sum_{n\alpha\mu} \frac{1}{2} M_\alpha \dot{s}_{n\alpha\mu}^2, \quad (8.2)$$

wobei $n = 1, \dots, N$ die Zahl der Einheitszellen, $\alpha = 1, \dots, r$ die Atome/Ionen der Basis mit Masse M_α , $\mu = x, y, z$ die kartesischen Komponenten und $\vec{s}_{n\alpha}$ die Auslenkungen aus den Ruhelagen $\vec{R}_{n\alpha}^0 = \vec{R}_n^0 + \vec{R}_\alpha$ der Kerne bezeichnet. Die potentielle Energie in harmonischer Näherung

$$V_{KK}^h = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\alpha\mu \\ n'\alpha'\mu'}} s_{n\alpha\mu} D_{n\alpha\mu}^{n'\alpha'\mu'} s_{n'\alpha'\mu'} \quad (8.3)$$

lässt sich aus den zweiten Ableitungen, der *dynamischen Matrix* D , der Kern-Kern-Potentiale $V_{\alpha\alpha'}(\vec{R}_{n\alpha} - \vec{R}_{n'\alpha'})$ finden – die ersten Ableitungen von $V_{\alpha\alpha'}$ verschwinden per definitionem in der Ruhelage des Kristalls.¹ Damit erhalten wir die Lagrangefunktion

$$L = \frac{1}{2} \sum_{n\alpha\mu} M_\alpha \dot{s}_{n\alpha\mu}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\alpha\mu \\ n'\alpha'\mu'}} s_{n\alpha\mu} D_{n\alpha\mu}^{n'\alpha'\mu'} s_{n'\alpha'\mu'}. \quad (8.4)$$

Mit dem Ansatz

$$\vec{s}_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{NM_\alpha}} \sum_{j\vec{q}} Q_{j\vec{q}}(t) \vec{\varepsilon}_\alpha^j(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n^0}, \quad (8.5)$$

$$Q_{j\vec{q}}(t) = Q_{j\vec{q}} e^{-i\omega_j(\vec{q})t}, \quad (8.6)$$

zur Zerlegung in Normalmoden ($j = 1, \dots, 3r$ die Modenzahl, \vec{q} der von der Mode getragene Impuls) reduziert sich die Bewegungsgleichung

$$M_\alpha \ddot{s}_{n\alpha\mu} = - \sum_{n'\alpha'\mu'} D_{n\alpha\mu}^{n'\alpha'\mu'} s_{n'\alpha'\mu'} \quad (8.7)$$

für eine Mode $j\vec{q}$ auf das $3r \times 3r$ -dimensionale Eigenwertproblem

$$\sum_{\alpha'\mu'} \left[\frac{D_{\alpha\mu}^{\alpha'\mu'}(\vec{q})}{\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} - \omega_j^2(\vec{q}) \delta_{\alpha\mu}^{\alpha'\mu'} \right] \varepsilon_{\alpha'\mu'}^j(\vec{q}) = 0 \quad (8.8)$$

mit $D_{\alpha\mu}^{\alpha'\mu'}(\vec{q})$ der \vec{q} -Fouriertransformation der dynamischen Matrix,²

$$D_{\alpha\mu}^{\alpha'\mu'}(\vec{q}) = \sum_{n'} D_{n\alpha\mu}^{n'\alpha'\mu'} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0)}. \quad (8.10)$$

Der Eigenwert $\omega_j(\vec{q})$ und Eigenvektor $\varepsilon_{\alpha'\mu'}^j(\vec{q})$ definiert die Energie und Polarisation der $j\vec{q}$ -ten Mode. Einsetzen der Gln. (8.4)-(8.8) in (8.10) ergibt den Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j\vec{q}} [P_{j\vec{q}}^*(t) P_{j\vec{q}}(t) + \omega_j^2(\vec{q}) Q_{j\vec{q}}^*(t) Q_{j\vec{q}}(t)], \quad (8.11)$$

¹Übung: Sei die Basis einatomig, $r = 1$; finde die dynamische Matrix $D_\mu^{\mu'}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0) = D_{n\mu}^{n'\mu'}$ aus dem Kern-Kern Potential $V(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})$.

²Wir nutzen die Translationsinvarianz, $D_{n\alpha\mu}^{n'\alpha'\mu'} = D_{\alpha\mu}^{\alpha'\mu'}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0)$; die Symmetrien

$$Q_{j\vec{q}}^* = Q_{j-\vec{q}}, \quad [\varepsilon_\alpha^j(\vec{q})]^* = \varepsilon_\alpha^j(-\vec{q}). \quad (8.9)$$

garantieren, dass die Auslenkung $\vec{s}_{n\alpha}$ reell ist.

mit der zu $Q_{j\vec{q}}$ konjugierten Variablen

$$P_{j\vec{q}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_{j\vec{q}}^*} = \dot{Q}_{j\vec{q}}(t). \quad (8.12)$$

Wir quantisieren indem wir für $Q_{j\vec{q}}$ und $P_{j\vec{q}}$ Operatoren mit den Vertauschungsrelationen

$$[Q_{j\vec{q}}, P_{j'\vec{q}'}] = i\hbar \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \delta_{jj'} \quad (8.13)$$

einführen. Schliesslich gehen wir noch zu bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren über, indem wir definieren

$$a_{j\vec{q}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j(\vec{q})}} [\omega_j(\vec{q}) Q_{j\vec{q}}^\dagger - iP_{j\vec{q}}], \quad (8.14)$$

$$a_{j\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j(\vec{q})}} [\omega_j(\vec{q}) Q_{j\vec{q}} + iP_{j\vec{q}}^\dagger], \quad (8.15)$$

$$Q_{j\vec{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_j(\vec{q})}} [a_{j\vec{q}} + a_{j-\vec{q}}^\dagger], \quad (8.16)$$

$$P_{j\vec{q}} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_j(\vec{q})}{2}} [a_{j-\vec{q}} - a_{j\vec{q}}^\dagger], \quad (8.17)$$

mit $[a_{j\vec{q}}, a_{j'\vec{q}'}^\dagger] = \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \delta_{jj'}$. Der Hamiltonoperator wird damit zu

$$H = \sum_{j\vec{q}} \hbar\omega_j(\vec{q}) [a_{j\vec{q}}^\dagger a_{j\vec{q}} + 1/2]. \quad (8.18)$$

Damit haben wir die $3r$ Phononenäste des Kristalls gefunden. Die \vec{q} -Werte sind auf die erste Brioullinzone beschränkt, welche ihrerseits durch die Punktgruppe des Kristalls bestimmt ist. Bei N Elementarzellen haben wir N erlaubte \vec{q} -Werte in der 1.B.Z., also $3rN$ Moden mit den Energien $\omega_j(\vec{q})$, die den $3rN$ Freiheitsgraden der rN Atome bzw. Ionen entsprechen. Die Energien $\omega_j(\vec{q})$ der Gittermoden sind damit analog zu den Bandenergien $E_n(\vec{k})$ des elektronischen Systems mit dem bemerkenswerten Unterschied, dass der Bandindex $j = 1, \dots, r$ beschränkt ist. Entsprechend folgt $\omega_j(\vec{q})$ denselben Symmetriebedingungen wie $E_n(\vec{k})$, insbesondere der Zeitumkehrinvarianz, $\omega_j(\vec{q}) = \omega_j(-\vec{q})$.

Von den $3r$ Ästen sind drei *akustisch*,³ d.h. linear in \vec{q} für kleine q , die übrigen $3(r-1)$ Moden sind *optisch*, d.h., die Basisatome oszillieren für

³Diese Goldstone Moden ergeben sich aus der Brechung der kontinuierlichen Translationssymmetrie der Flüssigkeit beim flüssig-fest Phasenübergang; für $\vec{q} \rightarrow 0$ ähnelt die Mode mehr und mehr einer Translation die keine Energie kostet.

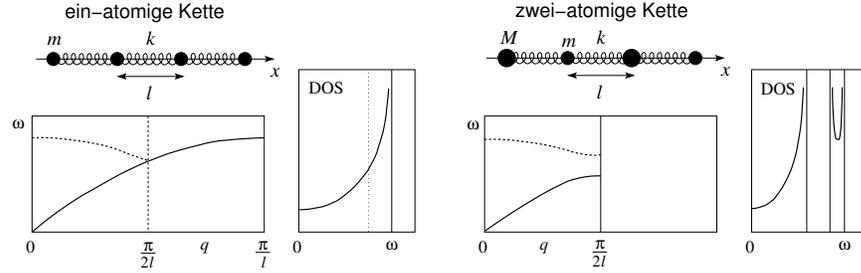


Abb. 8.1: Skizzen der Dispersion $\omega(q)$ und der Zustandsdichte $\rho(\omega)$ für die ein- und zweiatomige lineare Kette; beachte die Verdoppelung der Moden und Halbierung der Brillouin Zone beim Übergang von der ein- zur zweiatomigen Kette (bei gleichbleibender Anzahl der Moden). Die einatomige Kette zeigt nur eine van Hove Singularität, die zweiatomige Version deren drei.

$q \rightarrow 0$ gegeneinander und $\omega_j(\vec{q} \rightarrow 0) \neq 0$. Entlang der Symmetrielinien in der Brillouin Zone können wir die Moden als longitudinal und transversal klassifizieren, für allgemeine Richtungen ist dies nicht möglich. Wie bei den Energiebändern der Elektronen definieren wir die Zustandsdichte

$$\rho(\omega) = \frac{\nu}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{\omega_j(\vec{q})=\omega} \frac{dS_{\vec{q}}}{|\vec{\nabla}_{\vec{q}} \omega_j(\vec{q})|}; \quad (8.19)$$

$\rho(\omega)$ zeigt Van-Hove-Singularitäten, wenn $\vec{\nabla}_{\vec{q}} \omega_j(\vec{q}) = 0$ ist. In Abb. 8.1 sind die Dispersion und Zustandsdichte (DOS) für die ein- und zweiatomige Kette skizziert.

Die Abbildung 8.2 zeigt eine gemessene Phonondispersion im Diamant mit $2 \times 3 = 6$ Moden (zwei Atome pro Einheitszelle).

8.1.1 Kontinuumsimes

Für die akustischen Zweige können wir eine Brücke schlagen zur Kontinuums-Elastizitätstheorie des Kristalls, indem wir \vec{s}_n entwickeln ($s_\mu(0) = s_\mu^0$) gemäss

$$s_{n\mu} = s_\mu(\vec{R}_n^0) \approx s_\mu^0 + (\vec{R}_n^0 \cdot \vec{\nabla}) s_\mu + \frac{1}{2} (\vec{R}_n^0 \cdot \vec{\nabla}) (\vec{R}_n^0 \cdot \vec{\nabla}) s_\mu. \quad (8.20)$$

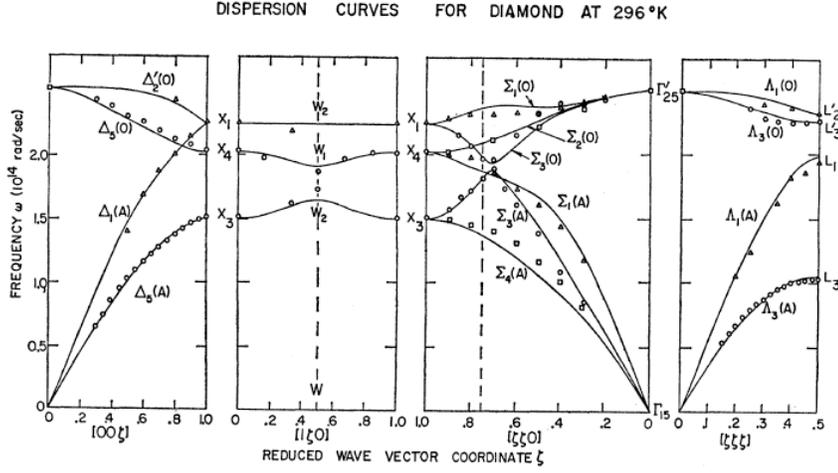


Abb. 8.2: Phonondispersion des Diamants mit 6 Moden; beachte die Symmetrieklassifikation der Moden wie bereits aus den elektronischen Bandstrukturen bekannt (aus J.L. Warren, J.L. Yarnell, G. Dolling, and R.A. Cowley, Phys. Rev. **158**, 805 (1967)).

Aufgrund der Symmetrien von $D_{n\mu}^{n'\mu'}$ überlebt nur der letzte Term von (8.20) in der Bewegungsgleichung (8.7)

$$M\ddot{s}_{n\mu} = V_{uc} \sum_{\substack{n'\mu' \\ \nu\nu'}} E_{\mu\mu'\nu\nu'} \frac{\partial^2 s_{\mu'}}{\partial R_\nu \partial R_{\nu'}}, \quad (8.21)$$

wobei $M = \sum_\alpha M_\alpha$ die totale Masse der Einheitszelle und

$$E_{\mu\mu'\nu\nu'} = -\frac{1}{2V_{uc}} \sum_{n'} D_{n'\mu}^{n'\nu'} R_{n'\nu} R_{n'\nu'} \quad (8.22)$$

die dynamische Matrix definiert. Unter Ausnutzung der Symmetrien von $E_{\mu\mu'\nu\nu'}$ können wir die Bewegungsgleichungen auch via den *elastischen Konstanten* $C_{\mu\mu'\nu\nu'}$ schreiben,

$$\rho\ddot{s}_\mu = \sum_{\mu'\nu\nu'} E_{\mu\mu'\nu\nu'} \frac{\partial^2 s_{\mu'}}{\partial R_\nu \partial R_{\nu'}} = \sum_{\mu'\nu\nu'} C_{\mu\mu'\nu\nu'} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R_{\mu'}} \left[\frac{\partial s_\nu}{\partial R_{\nu'}} + \frac{\partial s_{\nu'}}{\partial R_\nu} \right]. \quad (8.23)$$

In einem kubischen Kristall gibt es 3 unabhängige elastische Konstanten $C_{11} = C_{22} = C_{33}$, $C_{12} = C_{23} = C_{31}$ und $C_{44} = C_{55} = C_{66}$, wobei die

Doppelindizes via den Regeln

$$11 \rightarrow 1 \quad , \quad 23 \rightarrow 4, \quad (8.24)$$

$$22 \rightarrow 2 \quad , \quad 13 \rightarrow 5, \quad (8.25)$$

$$33 \rightarrow 3 \quad , \quad 12 \rightarrow 6, \quad (8.26)$$

in Einzelindizes kodiert wurden. Komplizierte Kristalle haben bis zu 21 verschiedene elastische Koeffizienten, ein isotropes Medium hat nur 2, und zwar die kubischen mit der Nebenbedingung $C_{11} = C_{12} + 2C_{44}$. Die longitudinalen und transversalen Schallgeschwindigkeiten der Kompressions- und Schermoden sind dann⁴

$$s_l = \sqrt{C_{11}/\rho}, \quad (8.27)$$

$$s_t = \sqrt{C_{44}/\rho}. \quad (8.28)$$

8.2 Elektron-Phonon-Kopplung

Ausgehend von der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Kernen (\vec{r}_i die Koordinate des i -ten Elektrons)

$$V_{\text{eK}} = \sum_{n\alpha i} V_\alpha(\vec{r}_i - \vec{R}_{n\alpha}^0 - \vec{s}_{n\alpha}) \quad (8.29)$$

entwickeln wir die Energie für kleine Auslenkungen $\vec{s}_{n\alpha}$ und benutzen Gl. (8.5),

$$V_{\text{eK}} = - \sum_{n\alpha i} \frac{1}{\sqrt{NM_\alpha}} \sum_{j\vec{q}} Q_{j\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n^0} (\vec{\varepsilon}_\alpha^j \cdot \vec{\nabla}) V_\alpha(\vec{r}_i - \vec{R}_{n\alpha}^0). \quad (8.30)$$

Beim Übergang zur zweiten Quantisierung schreiben wir für die Phononen

$$Q_{j\vec{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_j(\vec{q})}} [a_{j\vec{q}} + a_{j-\vec{q}}^\dagger], \quad (8.31)$$

während wir für die Elektronen die Substitution

$$V_\alpha(\vec{r}_i - \vec{R}_{n\alpha}^0) \rightarrow \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) V_\alpha(\vec{r} - \vec{R}_{n\alpha}^0) \Psi(\vec{r}) \quad (8.32)$$

⁴Vgl. mit der Formel $s^2 = 1/\kappa\rho$

vornehmen. Wir drücken die Feldoperatoren via Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Blochwellen aus,

$$\Psi^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{n'\vec{p}'} e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} u_{n'\vec{p}'}^*(\vec{r}) c_{n'\vec{p}'}, \quad (8.33)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{n\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{p}}(\vec{r}) c_{n\vec{p}}, \quad (8.34)$$

und entwickeln das periodische Potential $V_\alpha(\vec{r}) = N^{-1} \sum_{\kappa} V_{\alpha\kappa} e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}}$ im Fourierraum. Die Summe \sum_n über alle Gittervektoren ergibt via der Poisson'schen Formel

$$\sum_n e^{i(\vec{q}-\vec{\kappa})\cdot\vec{R}_n^0} = N \sum_m \delta_{\vec{q}-\vec{\kappa}, \vec{K}_m}, \quad (8.35)$$

wobei \vec{K}_m ein reziproker Gittervektor ist. Im Integral $\int d^3r$ verbleibt

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r e^{i(\vec{p}+\vec{q}+\vec{K}_m-\vec{p}')\cdot\vec{r}} u_{n'\vec{p}'}^*(\vec{r}) u_{n\vec{p}}(\vec{r}) \\ &= \delta_{\vec{p}', \vec{p}+\vec{q}+\vec{K}_m} \int \frac{d^3r}{V_{\text{uc}}} u_{n'\vec{p}'}^*(\vec{r}) u_{n\vec{p}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (8.36)$$

Fassen wir alle Faktoren zusammen, so erhalten wir einen länglichen Ausdruck der Form

$$\begin{aligned} V_{\text{eK}} = & - \sum_{\substack{nn'\vec{p}\sigma \\ j\vec{q}\alpha m}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_\alpha N \omega_j(\vec{q})}} V_{\alpha\vec{q}+\vec{k}_m} e^{-i(\vec{q}+\vec{K}_m)\cdot\vec{R}_\alpha^0} i(\vec{q}+\vec{K}_m) \cdot \vec{\varepsilon}_\alpha^j(\vec{q}) \\ & \int \frac{d^3r}{V_{\text{uc}}} u_{n'\vec{p}+\vec{q}+\vec{K}_m}(\vec{r}) u_{n\vec{p}}(\vec{r}) [a_{j\vec{q}} + a_{j-\vec{q}}^\dagger] c_{n'\vec{p}+\vec{q}+\vec{K}_m\sigma}^\dagger c_{n\vec{p}\sigma}. \end{aligned} \quad (8.37)$$

Wir diskutieren einige Aspekte:

- Die Vektoren \vec{p} , \vec{p}' sind auf die 1. Brillouin Zone reduziert, ebenso \vec{q} . Allerdings kann $\vec{p} + \vec{q}$ ausserhalb der 1. B.Z. zu liegen kommen; dann muss ein reziproker Gittervektor \vec{K}_m den Impuls $\vec{p} + \vec{q}$ in die 1. B.Z. zurückbringen, $\vec{p}' = \vec{p} + \vec{q} + \vec{K}_m \in 1. \text{ B.Z.}$; man spricht von einem *Normalprozess* wenn $\vec{K}_m = 0$ und von einem *Umklapp-Prozess* wenn $\vec{K}_m \neq 0$; der Impuls \vec{K}_m wird vom (∞ schweren) Gitter absorbiert. Umklapp Prozesse produzieren eine Impulsrelaxation und sind wichtig in der Berechnung der Leitfähigkeit bei Elektron-Elektron Streuung und für die thermische Leitfähigkeit.

- Die Dimensionen der Operatoren sind $[c]$, $[a]$, $[\varepsilon] \sim 1$, $V_{\vec{q}}$ ist eine Energie und deshalb ist $\sqrt{\hbar/2M\omega N}q \sim [(\hbar^2q^2/M) (1/N) (1/\hbar\omega)]^{1/2} \propto 1$ dimensionslos.
- Zumeist bleibt das Elektron im gleichen Band, da $\hbar\omega_j(\vec{q}) \ll E_{n'}(\vec{p}') - E_n(\vec{p})$ für $n' \neq n$. Eine Ausnahme ist die Intervalley-Streuung in Halbleitern, z.B. im Si oder Ge mit 6 bzw. 8 äquivalenten Taschen im Leitungsband.
- Sei $\vec{K}_m = 0$ und die Phononen seien nach ihrem transversalen und longitudinalen Charakter klassifizierbar. Dann schränkt der Faktor $\vec{q} \cdot \varepsilon_{\alpha}^j(\vec{q})$ die Elektron-Phonon-Streuung auf die longitudinalen Phononen ein.
- *Modell-Hamiltonoperator*: Um Elektron-Phonon-Prozesse qualitativ zu beschreiben, betrachtet man den einfachsten Hamiltonoperator, der die relevante Physik mitnimmt. Folgende Vereinfachungen sind gängig
 - 1 Atom pro Zelle.
 - Normalprozesse $\vec{K}_m = 0$.
 - Klassifikation in longitudinale und transversale Moden, z.B., im isotropen Medium.
 - $n = n'$.

Wir erhalten den Modell-Hamiltonian

$$H_{e-ph} = \sum_{\vec{p}\vec{q}\sigma} M_{\vec{p}\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p}\sigma} [a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^{\dagger}] \quad (8.38)$$

mit

$$M_{\vec{p}\vec{q}} = -i \sqrt{\frac{\hbar^2 q^2}{2MN} \frac{1}{\hbar\omega_{\vec{q}}}} V_{\vec{q}} \int \frac{d^3r}{V_{uc}} u_{n\vec{p}+\vec{q}}^* u_{n\vec{p}}. \quad (8.39)$$

- Wir diskutieren einige typische Beispiele für $M_{\vec{p}\vec{q}}$:
Wir modellieren die Elektron-Ion Wechselwirkung $V(\vec{r} - \vec{R}_n)$ im *Metall* als abgeschirmtes Potential eines Ions der Ladung Z , dann ist wegen $\omega_{\vec{q}} \ll \omega_p$

$$V_{\vec{q}} = \frac{4\pi Z e^2 / V_{uc}}{q^2 \varepsilon(\vec{q}, \omega_{\vec{q}})} \approx \frac{4\pi Z e^2 / V_{uc}}{q^2 + \lambda_{TF}^{-2}} \quad (8.40)$$

und⁵

$$M_{\vec{p}\vec{q}} \underbrace{\approx}_{u_n^* u_n \sim 1} M_{\vec{q}} \approx -i \sqrt{\frac{\hbar^2 q^2}{2MN\hbar\omega_{\vec{q}}}} \frac{4\pi Z e^2 / V_{\text{uc}}}{q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2}} \propto \frac{q}{\sqrt{\omega_{\vec{q}}}}. \quad (8.41)$$

In *Halbleitern* ist die *Deformationspotentialstreuung* wichtig: Wir schreiben für eine Änderung des Volumens ν durch eine longitudinale akustische Schallwelle (ε_c ist die (volumenabhängige) Bandkante des Leitungsbandes, $D_c = \nu \partial_\nu \varepsilon_c$ bezeichnet die Deformationspotentialkonstante)

$$\begin{aligned} H_{\text{e-ph}} &= \int d^3r \rho(\vec{r}) \varepsilon_c[V(\vec{r})] = \int d^3r \rho(\vec{r}) \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial \nu} |\vec{\nabla} \cdot \vec{s}| \nu \quad (8.42) \\ &= \int d^3r \rho(\vec{r}) D_c \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega(\vec{q})}} |\vec{q}| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} [a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger] \end{aligned}$$

und erhalten

$$M_{\vec{q}} = D_c \sqrt{\frac{\hbar^2 q^2}{2MN\hbar\omega_{\vec{q}}}} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}}}} \propto \frac{q}{\sqrt{\omega_{\vec{q}}}}. \quad (8.43)$$

Schliesslich erwähnen wir noch die Elektron-Phonon-Streuung durch *polar-optische Phononen*, die in polaren Halbleitern wie z.B., GaAs, InSb, ZnO wichtig ist,

$$M_{\vec{q}} \approx i \left[\frac{4\pi e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2\nu} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \right]^{1/2} q^{-1} \propto \frac{1}{q} \quad (8.44)$$

und durch die *piezoelektrische Wechselwirkung*, die in polaren Kristallen ohne Inversionszentrum möglich ist:⁶

$$M_{\vec{q}} \approx i \left[\frac{4\pi e^2 \hbar^2 s^2}{2\nu \hbar \omega_{\vec{q}}} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon_0 + \varepsilon_{\text{piezo}}} \right) \right]^{1/2} \propto \frac{i}{\sqrt{\omega_{\vec{q}}}}. \quad (8.45)$$

Die piezoelektrische Streuung involviert sowohl longitudinale als auch transversale akustische Phononen und ist phasenverschoben zur Deformationspotentialstreuung. Ein notorisches Problem sind die Normierungsfaktoren N und ν – bitte vor Gebrauch überprüfen. Beachte dabei, dass $NM = \rho\nu$ und $H_{\text{e-ph}} \propto 1/\sqrt{\nu}$.

⁵In Fermiliquid-Theorie kommt noch ein Faktor $1/(1 + F_0^s)$ dazu.

⁶Wichtig in II-VI-Halbleitern wie CdS, ZnO; GaAs ist schwach piezoelektrisch, Si und Ge sind nicht piezoelektrisch.

8.2.1 Schallmoden

Ein weiterer interessanter Aspekt ist die Entstehung von Schall in Metallen – ein Thema, das bereits früher diskutiert worden ist und das an dieser Stelle unter einem anderen Gesichtspunkt betrachtet werden soll. Wir starten mit dem einfachen Elektron-Phonon-Hamiltonoperator für die longitudinalen Phononen

$$\begin{aligned}
H &= H_{\text{el}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{e-ph}} \\
&= \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'-\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}\sigma} \\
&\quad + \sum_{\vec{q}} \hbar\Omega_{\vec{q}} [a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + 1/2] + \sum_{\vec{p}\vec{q}\sigma} M_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} [a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger]. \quad (8.46)
\end{aligned}$$

Die beiden letzten Terme können wir auch in der Form

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [P_{\vec{q}}^\dagger P_{\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}}^\dagger Q_{\vec{q}}] + \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}} Q_{\vec{q}} \quad (8.47)$$

schreiben, wobei $Q_{-\vec{q}} = Q_{\vec{q}}^\dagger$, $v_{\vec{q}} = M_{\vec{q}} \sqrt{2\Omega_{\vec{q}}/\hbar} = -i\sqrt{q^2/MN}(4\pi Z e^2/V_{\text{uc}} q^2)$ die Elektron-Phonon Kopplungskonstante ohne Abschirmung und $\Omega_{\vec{q}} \approx (4\pi n_i Z^2 e^2/M)^{1/2}$ die Plasmafrequenz, d.h., die nicht abgeschirmte ‘Phononfrequenz’ der geladenen Ionen (Ladung eZ , Dichte n_i) ist. Die Bewegungsgleichung für die Amplitude $Q_{\vec{q}}$ hat die Form ($L = \sum_{\vec{q}} P_{\vec{q}} \dot{Q}_{\vec{q}} - H$ und $P_{\vec{q}} = \dot{Q}_{\vec{q}}$)

$$\ddot{Q}_{\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}} = -v_{-\vec{q}} \rho_{\vec{q}}. \quad (8.48)$$

Mitteln wir über die Elektronenkoordinaten und berücksichtigen wir, dass die Störung $\phi_{\vec{q}} = v_{\vec{q}} Q_{\vec{q}}$ via Gl. (5.19) und (5.24) eine Polarisation

$$\langle \rho_{\vec{q}} \rangle = \chi(\vec{q}, \omega_{\vec{q}}) v_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} \quad (8.49)$$

im Elektronensystem erzeugt, so erhalten wir

$$-\omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}} = -|v_{\vec{q}}|^2 Q_{\vec{q}} \chi(\vec{q}, \omega_{\vec{q}}) \quad (8.50)$$

und damit die neue Schwingungsfrequenz

$$\omega_{\vec{q}}^2 = \Omega_{\vec{q}}^2 + |v_{\vec{q}}|^2 \frac{q^2}{4\pi e^2} [1/\varepsilon(\vec{q}, \omega_{\vec{q}}) - 1] \quad (8.51)$$

des gekoppelten Elektron-Ion-Systems. Setzen wir die komplexe Lösung $\omega_{\vec{q}} = \omega_1 - i\omega_2$ an, so erhalten wir die Ausdrücke

$$\omega_1^2 = \Omega_{\vec{q}}^2 - \frac{q^2}{4\pi e^2} |v_{\vec{q}}|^2 [1 - 1/\varepsilon(\vec{q}, 0)], \quad (8.52)$$

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} = \frac{q^2}{8\pi e^2} \frac{|v_{\vec{q}}|^2}{\omega_1^2} \left[-\text{Im} \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega_1)} \right], \quad (8.53)$$

für die Frequenz und Dämpfung der Mode. Dabei haben wir angenommen, dass $\omega_2 \ll \omega_1 \ll qv_F$ ist und deshalb die statische Dielektrizitätskonstante verwendet werden kann. Mit dem Normierungsvolumen $\nu = 1$ und

$$\frac{q^2}{4\pi e^2} |v_{\vec{q}}|^2 = \frac{4\pi Z^2 e^2 n_i}{M} = \Omega_p^2 \approx \Omega_{\vec{q}}^2 \quad (8.54)$$

erhalten wir

$$\omega_1^2 = \frac{\Omega_p^2}{\varepsilon(\vec{q}, 0)} \approx \Omega_p^2 \frac{q^2 s^2}{\omega_p^2} = s_{\text{ph}}^2 q^2 = \frac{Zm}{M} s^2 q^2, \quad (8.55)$$

das Bohm-Staver Resultat. Für die Dämpfung vereinfacht sich das Resultat zu

$$\omega_2 = \frac{\varepsilon''(\vec{q}, \omega_1)}{\varepsilon(\vec{q}, 0)} \approx \frac{\pi}{12} \sqrt{\frac{mZ}{M}} \frac{p_F}{ms} \omega_1 \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \omega_1. \quad (8.56)$$

8.3 Gitterdefekte

Analog zum Elektron-Phonon-Hamiltonoperator finden wir leicht den Hamiltonoperator für die Wechselwirkung von Elektronen und Defekten. Seien \vec{R}_i die Positionen der Defekte und

$$V_{\text{eD}} = \sum_{ij} V^{\text{D}}(\vec{r}_i - \vec{R}_j) \quad (8.57)$$

der zu Gl. (8.29) analoge Defekt-Elektron-Anteil im Hamiltonoperator. In zweiter Quantisierung schreiben wir

$$H_{\text{e-D}} = \int d^3r \sum_n \Psi^\dagger(\vec{r}) V_{\text{D}}(\vec{r} - \vec{R}_n) \Psi(\vec{r}) \quad (8.58)$$

und mit Gl. (8.33) und (8.34), sowie der Fouriertransformation des Streupotentials $V_{\text{D}}(\vec{r}) = (1/\nu) \sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) V_{\vec{q}}^{\text{D}}$, erhalten wir den Ausdruck

$$H_{\text{e-D}} = \sum_{\substack{\vec{p}\vec{q}\vec{\sigma} \\ nn'}} \frac{1}{\nu} \sum_j V_{\vec{q}}^{\text{D}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} \int \frac{d^3r}{V_{\text{uc}}} u_{n'\vec{p}+\vec{q}}^* u_{n\vec{p}} c_{n'\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{n\vec{p}\sigma}. \quad (8.59)$$

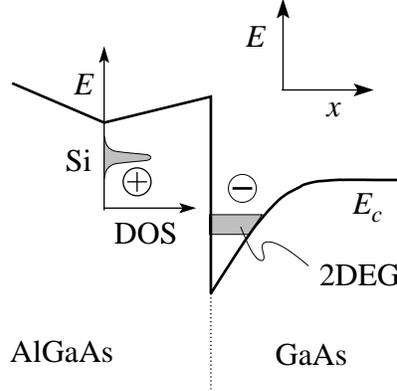


Abb. 8.3: Modulations Dotierung im Halbleiter: Die Donatoren (Si Atome im AlGaAs) werden weg vom zwei-dimensionalen Elektronen Gas (2DEG) eingeführt, so dass die zurückbleibenden positiven Streuzentren nur wenig streuen. Dieser Trick erlaubt hoch-mobile 2D Elektronen Gase zu realisieren wie sie im Quanten-Hall-Effekt benötigt werden.

Wiederum sind folgende Vereinfachungen üblich: wir betrachten die Streuung von Elektronen im Leitungsband $n = n'$ (im folgenden unterdrücken wir den Index), wir ignorieren die Struktur der Blochwellen $u_{n'\vec{p}+\vec{q}}^* u_{n\vec{p}} \sim 1$, und drücken die Defektdichte im Fourierraum aus, $\rho_{\vec{q}}^D = \sum_j \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}_j) / \nu$; damit erhalten wir den Elektron-Defekt Hamiltonian

$$H_{e-D} = \sum_{\vec{q}\vec{p}\sigma} V_{\vec{q}}^D \rho_{\vec{q}}^D c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} = \sum_{\vec{q}} \underbrace{V_{\vec{q}}^D \rho_{\vec{q}}^D}_{\text{Energie}} \rho_{-\vec{q}}. \quad (8.60)$$

Vergleiche dies mit dem Resultat für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$H_{e-ph} = \sum_{\vec{q}} \underbrace{v_{\vec{q}} Q_{\vec{q}}}_{\text{Energie}} \rho_{-\vec{q}}. \quad (8.61)$$

Die Positionen \vec{R}_j der Defekte sind im allgemeinen zufällig verteilt. Ein typisches Beispiel für das Defektpotential ist das abgeschirmte Potential einer geladenen (Ze) Verunreinigung,

$$V^D(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{r} e^{-r/\lambda_{\text{TF}}}, \quad (8.62)$$

$$V_{\vec{q}}^D = \frac{4\pi Ze^2}{q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2}}. \quad (8.63)$$

Beachte, dass in Halbleitern die Abschirmlänge λ_{TF} recht lang ist,

$$\frac{1}{\lambda_{\text{TF}}^2} \Big|_{\text{Metall}} = 4\pi g e^2 = \frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F}, \quad (8.64)$$

$$\frac{1}{\lambda_{\text{D}}^2} \Big|_{\text{Halbleiter}} = \frac{4\pi n e^2}{\epsilon_0 T}, \quad (8.65)$$

mit der statischen Dielektrizitätskonstanten ε_0 des Gitters. Mit $n_{\text{HL}} \sim 10^{-5} n_{\text{M}}$, $T \sim 10^{-2} T_{\text{F}}$ ist die Abschirmlänge $\lambda_{\text{HL}} \sim 10 - 100 \lambda_{\text{M}} \sim 10 - 100 \text{ \AA}$, d.h. die Dotieratome im Halbleiter sind effiziente Streuer, welche die Leitfähigkeit signifikant herabsetzen. Mit einem Trick kann das Problem in modernen Strukturen durch sogenanntes *Modulation Doping* umgangen werden, d.h. man dotiert an anderer Stelle, weg vom Aufenthaltsort der beweglichen Ladungsträger, vgl. Abb. 8.3.

Kapitel 9

Quasiteilchen Zerfall und dissipativer Transport

In diesem Kapitel konzentrieren wir uns auf die physikalischen Konsequenzen der Streuprozesse, die endliche Lebenszeit der Quasiteilchen und den Eigenschaften des dissipativen Transportes.

9.1 Lebenszeiten

Der ursprüngliche Hamiltonoperator (8.1) reduziert sich für niedrige Energien unter idealisierten Bedingungen auf den Modellhamiltonian

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\vec{q}}^{\text{scr}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'-\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}\sigma} \\ & + \sum_{\vec{q}\lambda} \hbar\omega_{\vec{q}\lambda} [a_{\vec{q}\lambda}^\dagger a_{\vec{q}\lambda} + 1/2] + \sum_{\vec{q}} \frac{v_{\vec{q}}}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}}}} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) \rho_{-\vec{q}} \\ & + \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}^{\text{D}} \rho_{\vec{q}}^{\text{D}} \rho_{-\vec{q}}. \end{aligned} \quad (9.1)$$

In Gl. (9.1) haben wir zusätzlich die Defektstreuung berücksichtigt. Die Terme $H_{0,\text{el}}$ (Term # 1) und $H_{0,\text{ph}}$ (# 3) definieren Eigenzustände mit unendlicher Lebensdauer des elektronischen bzw. des Gittersystems. Die Wechselwirkungs-Terme H_{ee} (# 2) und H_{eD} (# 5) erzeugen endliche Lebensdauern für die Elektronen, der Term H_{ep} (# 4) erzeugt eine endliche

Lebensdauer gleichermassen für die Elektronen und die Phononen.¹ Im vorliegenden Kapitel wollen wir die elektronischen Lebenszeiten näher untersuchen.

9.1.1 Elektron-Defekt-Streuung

Ein Streuer mit $V^D(\vec{r}) = (e^2/r)e^{-r/\lambda_{\text{TF}}}$ erzeugt nach Fermi's Goldener Regel eine Streurrate

$$W_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}+\vec{q}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{p} + \vec{q} | V^D | \vec{p} \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_{\vec{p}\vec{q}}) \quad (9.2)$$

und damit eine Lebenszeit ($a_{\text{B}} = \hbar^2/e^2m$ ist der Bohr'sche Radius)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \nu \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} W_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}+\vec{q}} (1 - n_{\vec{p}+\vec{q}}) \\ &= \frac{1}{\nu} \int \frac{d\Omega_{\vec{q}}}{4\pi} \int \frac{dq q^2}{2\pi^2} \frac{2\pi}{\hbar} \left[\frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2}} \right]^2 \delta[(\hbar^2/2m)(2\vec{p} \cdot \vec{q} - q^2)] (1 - n_{\vec{p}+\vec{q}}) \\ &\sim \frac{1}{\nu} \int_{-1}^1 dz \int dq^2 q \frac{e^4 m}{\hbar^3} \frac{1/k_{\text{F}} q}{(q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2})^2} \delta(z - q/2k_{\text{F}}) \\ &\sim \frac{e^4 m}{\hbar^3 k_{\text{F}}} \frac{1}{\nu} \int dq^2 \frac{1}{(q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2})^2} \\ &\sim \frac{\hbar}{m k_{\text{F}}} \frac{1}{\nu} \frac{\lambda_{\text{TF}}^2}{a_{\text{B}}^2} \sim \frac{\varepsilon_{\text{F}}}{\hbar n} \frac{1}{\nu} \frac{\lambda_{\text{TF}}^2}{a_{\text{B}}^2}. \end{aligned} \quad (9.4)$$

Mit N_{D} Streuzentren erhalten wir damit

$$\frac{\hbar/\tau}{\varepsilon_{\text{F}}} = \frac{n_{\text{D}}}{n} \frac{\lambda_{\text{TF}}^2}{a_{\text{B}}^2} \ll 1. \quad (9.5)$$

Mit $\varepsilon_{\text{F}} \sim 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ist $1/\tau \sim (n_{\text{D}}/n) 10^{15} \text{ Hz}$.

9.1.2 Elektron-Phonon-Streuung

Wir betrachten den Elektron-Phonon-Hamiltonoperator

$$H_{\text{ep}} = \sum_{\vec{p}\vec{q}\sigma} M_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}\sigma} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) \quad (9.6)$$

¹Wir erwähnen noch, dass die Entwicklung von $V(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})$ in Gl. (8.3) in Ordnung s^3 ein Matrixelement zur Phonon-Phonon-Streuung erzeugt und ebenso in Ordnung s^4 einen 4-Phonon-Streuprozess. Bei einer konvexen Dispersion kann ein Phonon spontan in zwei zerfallen, da der Prozess kinematisch nicht verboten ist.

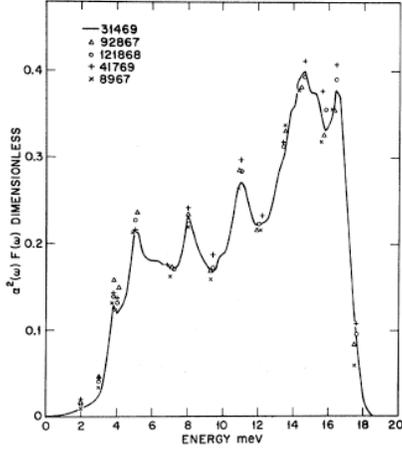


Abb. 9.1: Das experimentel gemessene (via Tunnelspektroskopie) Spektrum $\alpha^2 F$ von Zinn (Sn) kann durch den Ausdruck in Gl. (9.12) genähert werden (Abb. aus J.M. Rowell, W.L. McMillan, and W.L. Feldmann, Phys. Rev. B **3**, 4065 (1971)).

mit

$$M_{\vec{q}} = -i \sqrt{\frac{\hbar^2 q^2}{2MN\hbar\omega_{\vec{q}}}} \frac{4\pi Z e^2 \lambda_{\text{TF}}^2}{V_{\text{uc}}(1 + q^2 \lambda_{\text{TF}}^2)}. \quad (9.7)$$

Im Limes $\vec{q} \rightarrow 0$ schreiben wir $M_{\vec{q}}$ um auf

$$|M_{\vec{q}}|^2 = \lambda \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{g(\varepsilon_{\text{F}})\nu}, \quad g(\varepsilon_{\text{F}}) = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_{\text{F}}}, \quad \lambda = \frac{2Z}{3} \frac{\varepsilon_{\text{F}}^2}{T_s^2} \frac{m}{M}. \quad (9.8)$$

Hierbei haben wir eine akustische Dispersion $\omega_{\vec{q}} = s_{\text{ph}}q$ angesetzt und $s_{\text{ph}} = T_s/p_{\text{F}}$ durch die Phonon-Temperatur T_s ausgedrückt, wobei $T_s \sim T_{\text{D}} = s_{\text{ph}}\hbar q_{\text{D}}$ und $\hbar q_{\text{D}} \sim p_{\text{F}}$. λ ist die dimensionslose *Elektron-Phonon-Kopplungskonstante*. Benutzen wir für $s_{\text{ph}}^2 = (Zm/3M)v_{\text{F}}^2$ das Bohm-Staver-Resultat, so erhalten wir $\lambda = 1/2$. Oft braucht man anstelle von λ einen über die Fermifläche gemittelten Wert und benutzt Gl. (9.6) mit Gl. (9.8) auf dem ganzen Intervall $q \in [0, 2k_{\text{F}}]$,

$$\bar{\lambda} = N(\varepsilon_{\text{F}})\nu \frac{\sum_{\alpha} \int \frac{dS}{v_{\text{F}}} \int \frac{dS'}{v_{\text{F}}} |M_{\vec{p}\vec{p}'}^{\alpha}|^2 / \hbar\omega_{\alpha}(\vec{p} - \vec{p}')}{\int \frac{dS}{v_{\text{F}}} \int \frac{dS'}{v_{\text{F}}}}. \quad (9.9)$$

Typische Werte für $\bar{\lambda}$ sind 0.47 (Na), 0.16 (Cu), 0.12 (Ag), 0.08 (Au), 0.9 (Al), 1.05 (In).²

²Beachte, dass reines Ag und Au nicht supraleitend werden.

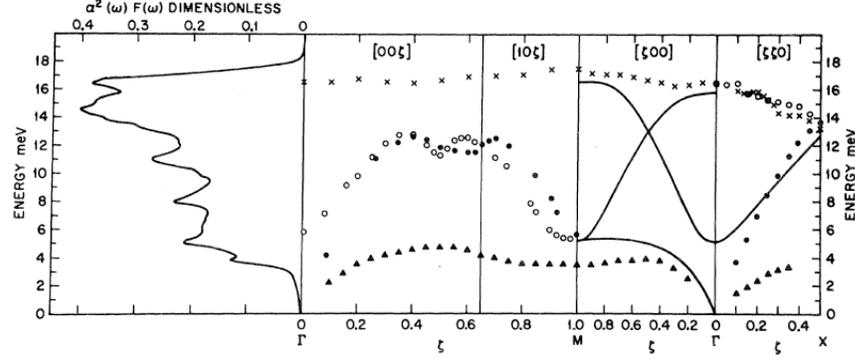


Abb. 9.2: Vergleich von $\alpha^2 F$ im Sn mit dem Phonenspektrum (gemessen via Neutronenstreuung); beachte die Übereinstimmung zwischen den Peaks in $\alpha^2 F(\omega)$ und den Bandkanten im Spektrum, aus J.M. Rowell, W.L. McMillan, and W.L. Feldmann, Phys. Rev. B **3**, 4065 (1971).

Eine weitere oft gebrauchte Grösse ist die Funktion $\alpha^2 F(\omega)$, der Mittelwert von $|M_{\vec{q}}|^2$ über die Fermifläche,³

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\nu}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_{\vec{p}'}}{\hbar^2 v_{\vec{p}'}} |M_{\vec{p}'-\vec{p}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{p}-\vec{p}'}); \quad (9.10)$$

mit

$$|M_{\vec{q}}|^2 = \lambda \frac{\hbar \omega_{\vec{q}}}{\nu N(\epsilon_F)}, \quad \omega_{\vec{q}} = T_s \frac{q}{p_F}, \quad (9.11)$$

ist

$$\alpha^2 F(\omega) = \begin{cases} \lambda (\hbar \omega / 2T_s)^2 & \hbar \omega < 2T_s \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (9.12)$$

Das experimentelle Resultat für $\alpha^2 F$ in Sn ist in Abb. 9.1 gezeigt⁴ und Abb. 9.2 zeigt den Zusammenhang dieser Grösse mit dem Phononspektrum.

Für die Lebenszeit $1/\tau(\epsilon)$ müssen wir den Ausdruck

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\vec{p}}} = \nu \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\vec{q}}|^2 & [(1 - n_{\vec{q}+\vec{p}})(1 + N_{-\vec{q}}) \delta(\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} + \hbar\omega_{-\vec{q}}) \\ & + (1 - n_{\vec{p}+\vec{q}}) N_{\vec{q}} \delta(\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} - \hbar\omega_{\vec{q}})] \end{aligned} \quad (9.13)$$

³Beachte: 'alpha-squared F' ist eine Grösse, kein Produkt $\alpha \cdot \alpha \cdot F$.

⁴Finde aus diesen Daten und einem Fit an Gleichung (9.12) einen Schätzwert für λ_{Sn} .

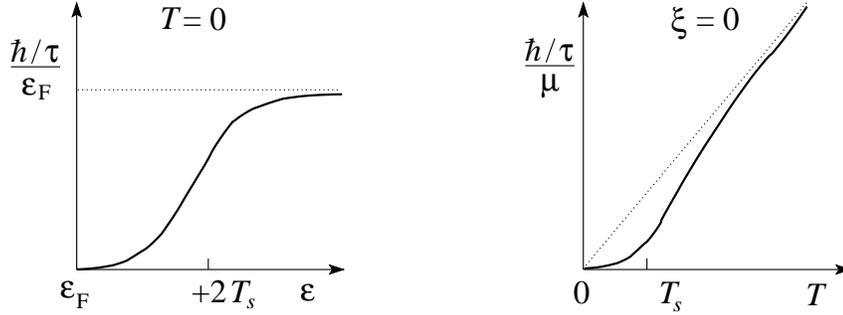


Abb. 9.3: Streuraten (skizziert) $(\hbar/\tau)/\varepsilon_F$ für Elektron-Phonon-Streuung bei $T = 0$ und endlicher Anregungsenergie $\xi = \varepsilon - \varepsilon_F$ (links) und für $\xi = \varepsilon - \mu = 0$ und endlicher Temperatur (rechts).

berechnen, wobei die erste (zweite) δ -Funktion die Emission (Absorption) von Phononen beschreibt. Für ein isotropes freies Elektronen-Modell lässt sich dieser Ausdruck (mit viel Arbeit) auf die Form

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = 2\pi \int_0^\infty d\omega \alpha^2 F(\omega) \{1 + 2N(\omega) - f(\varepsilon - \hbar\omega) + f(\varepsilon + \hbar\omega)\} \quad (9.14)$$

bringen ($N(\omega)$: Bosefaktor). Damit erhalten wir die Resultate für $T = 0$, $\xi = \varepsilon - \mu \neq 0$ (vgl. Abb. 9.3)

$$\frac{\hbar/\tau(\varepsilon)}{\varepsilon_F} = \begin{cases} \lambda \frac{\pi}{6} (T_s/\varepsilon_F) [(\varepsilon - \varepsilon_F)/T_s]^3, & |\xi| < 2T_s, \\ \lambda \frac{4\pi}{3} (T_s/\varepsilon_F), & |\xi| > 2T_s, \end{cases} \quad (9.15)$$

und für $\xi = 0$, $T > 0$,

$$\frac{\hbar/\tau(\mu)}{\mu} = \begin{cases} \lambda 4.2 \pi (T_s/\mu) (T/T_s)^3, & T < T_s, \\ \lambda 2\pi T/\mu, & T > T_s. \end{cases} \quad (9.16)$$

Das Hochtemperaturresultat $1/\tau \propto T$ lässt sich klassisch einfach verstehen: mit steigender Temperatur wächst die mittlere Auslenkung der Ionen wie $\langle s^2 \rangle \propto T$ und damit auch der Wirkungsquerschnitt.⁵

⁵Benutze das Fluktuations-Dissipations-Theorem zur Berechnung von $\langle s^2 \rangle$; alle Moden mit $\hbar\omega < T$ sind thermisch angeregt mit $\coth(\hbar\omega/2T) \sim T/\hbar\omega > 1$, diejenigen mit $\hbar\omega > T$ sind nicht voll angeregt mit $\coth(\hbar\omega/2T) \sim 1$. Wenn alle Moden bei $T > T_s$ thermisch angeregt sind wächst $\langle s^2 \rangle \propto T$.

Die Elektron-Phonon-Streuung erzeugt auch eine endliche Lebenszeit für die Phononen,

$$\frac{1}{\tau_{\text{ph}}\omega_{\vec{q}}} = \pi \lambda \frac{s_{\text{ph}}}{v_{\text{F}}} = \pi \lambda \sqrt{\frac{Zm}{3M}} \ll 1, \quad (9.17)$$

d.h. die Phononen sind wohldefinierte Quasiteilchen.⁶

9.1.3 Elektron-Elektron-Streuung

Das Resultat für die elektronische Lebenszeit unter Elektron-Elektron-Streuung haben wir im Abschnitt 6.7 bereits hergeleitet. Wir müssen nur noch die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung für $W_{\vec{p}_1\sigma_1, \vec{p}_2\sigma_2, \vec{p}'_1\sigma'_1, \vec{p}'_2\sigma'_2}$ einsetzen. Fermi's Goldene Regel gibt uns

$$W_{\vec{p}_1\sigma_1, \vec{p}_2\sigma_2, \vec{p}'_1\sigma'_1, \vec{p}'_2\sigma'_2} = \frac{2\pi}{\hbar} |V^{\text{scr}}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)\delta_{\sigma_1\sigma'_1}\delta_{\sigma_2\sigma'_2} - V^{\text{scr}}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2)\delta_{\sigma_1\sigma'_2}\delta_{\sigma_2\sigma'_1}|^2$$

mit

$$V^{\text{scr}}(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2 \lambda_{\text{TF}}^2}{1 + q^2 \lambda_{\text{TF}}^2}. \quad (9.18)$$

Die Umrechnung auf $W(\theta, \varphi)$ ist etwas mühsam und wir zitieren an dieser Stelle nur das Resultat für $1/\tau_{\text{pF}}(T)$ im Limes niedriger bzw. hoher Dichte,

$$\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon} = \frac{\hbar/\tau_{\text{pF}}}{\varepsilon_{\text{F}}} = \begin{cases} \frac{\pi^3}{16} (T/\varepsilon_{\text{F}})^2, & e^2 k_{\text{F}}/\pi\varepsilon_{\text{F}} \gg 1, \\ \frac{\pi^3}{16} \frac{\lambda_{\text{TF}}}{a_{\text{B}}} (T/\varepsilon_{\text{F}})^2, & e^2 k_{\text{F}}/\pi\varepsilon_{\text{F}} \ll 1, \end{cases}, \quad (9.19)$$

in qualitativer Übereinstimmung mit Gl. (6.125).

9.1.4 Zusammenfassung

Noch einmal ganz kurz die Resultate für die Lebensdauern der Quasiteilchen auf Grund der verschiedenen Streuprozesse:

$$\left. \frac{\hbar/\tau}{\varepsilon_{\text{F}}} \right|_{\text{eD}} \approx \frac{n_{\text{D}}}{n}, \quad (9.20)$$

⁶Bei $T \rightarrow 0$ wird $\xi_{\vec{p}} \sim T < \hbar/\tau_{\text{ph}}$, d.h. die Streuung findet an 'nicht wohldefinierten' Phononen statt und \hbar/τ_{ep} geht von $\propto T^3$ zu $\propto T^2$ über, siehe Abrikosov, Gor'kov, Dyaloshinski.

$$\left. \frac{\hbar/\tau}{\varepsilon_F} \right|_{\text{ep}} \approx \lambda \frac{T}{\varepsilon_F} \begin{cases} (T/T_s)^2 \\ 1 \end{cases}, \quad (9.21)$$

$$\left. \frac{\hbar/\tau}{\varepsilon_F} \right|_{\text{ee}} \approx (T/\varepsilon_F)^2. \quad (9.22)$$

Wegen $\varepsilon_F \sim 10^4$ K und $T_s \sim 100$ K dominiert die Elektron-Elektron-Streuung für $T < 1$ K über die Elektron-Phonon-Streuung.

9.2 Dissipativer Transport

Der elektrische Transport/Wärmetransport in Festkörpern ist ein sehr breites Thema und wir können hier nur die Spitze des Eisberges behandeln. Unsere Strategie wird nicht auf Vollständigkeit ausgelegt sein, sondern eher auf das Verständnis einiger tieferer Zusammenhänge. Ziel ist es, das Territorium für die Supraleitung zu planieren und einige interessante Details zu erwähnen. Dabei konzentrieren wir uns hauptsächlich auf den elektrischen Transport in Metallen.

Zuerst identifizieren wir den wichtigsten Streuprozess: Für kleine Temperaturen T stehen $\hbar/\tau_{\text{ee}} \sim \varepsilon_F(T/\varepsilon_F)^2$ und $\hbar/\tau_{\text{eD}} \sim \varepsilon_F n_D/n$ im Wettbewerb; für Reinheiten $n_D/n > 10^{-8}$ und niedrigen Temperaturen (\sim K) ist die Defekt-Streuung relevant, bei Zimmertemperatur (~ 300 K) dagegen ergibt ein Vergleich von τ_{eD} mit τ_{ep} (T/ε_F versus n_D/n), dass die Elektron-Phonon-Streuung dominant ist. Wir starten daher mit der Elektron-Defekt-Streuung, um das Tieftemperaturverhalten zu verstehen, und arbeiten im Formalismus der Landau-Silin-Theorie.

9.2.1 Elektron-Defekt Streuung

Die Transportgleichung hat die Form⁷

$$\begin{aligned} -\omega \delta n_{\vec{p}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} + ie \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) &= -i \partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}}, \quad (9.23) \\ \partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \delta(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} - \bar{\varepsilon}_{\vec{p}'}) [n_{\vec{p}}(1 - n_{\vec{p}'}) - n_{\vec{p}'}(1 - n_{\vec{p}})]. \end{aligned}$$

⁷Für $\vec{q} \rightarrow 0$, vgl. Gl. (7.43), das externe Feld \vec{D} plus Polarisationsfeld \vec{E}_p ergibt $\vec{D} + \vec{E}_p = \vec{E}$.

Haben wir die Lösung $n_{\vec{p}}$ gefunden, so können wir die Ladungs- und Stromdichte,

$$e\rho = 2e \sum_{\vec{p}} \delta n_{\vec{p}}, \quad (9.24)$$

$$e\vec{J} = 2e \sum_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} \vec{v}_{\vec{p}}, \quad (9.25)$$

und daraus die Dielektrizitätskonstante ε bzw., die Leitfähigkeit σ berechnen. Wir vereinfachen zuerst den Streuterm. Mit $n_{\vec{p}} = f(\bar{\varepsilon}_{\vec{p}}) + \delta \bar{n}_{\vec{p}}$, vgl. Gl. (6.37), und $\bar{\varepsilon}_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} + O(\delta n_{\vec{p}})$ erhalten wir in niedrigster Ordnung in $\delta n_{\vec{p}}$,

$$\partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'}) [\delta \bar{n}_{\vec{p}} - \delta \bar{n}_{\vec{p}'}]. \quad (9.26)$$

Alle Grössen leben auf der Fermifläche und lassen sich in sphärische Harmonische entwickeln (θ, φ Winkel zu \vec{p}),

$$W_{\vec{p}\vec{p}'} = \sum_l W_l P_l(\cos \vartheta), \quad \cos \vartheta = \hat{p} \cdot \hat{p}', \quad (9.27)$$

$$\delta \bar{n}_{\vec{p}} = \sum_{lm} \delta \bar{n}_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (9.28)$$

Das Ausnutzen des Additionstheorems

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi'), \quad (9.29)$$

ergibt für den Streuterm (die Integration über $d\Omega_{\vec{p}'}$ erzeugt die Terme $\delta_{l0}\delta_{m0}Y_{l'm'}(\theta, \varphi)$ und $\delta_{ll'}\delta_{mm'}Y_{lm}(\theta, \varphi)$)

$$\begin{aligned} \partial_t n_{\vec{p}}|_{\text{streu}} &= -\frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{dp' p'^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{\vec{p}'} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'}) \\ &\quad \times \sum_{lm l'm'} W_l \frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi') \delta \bar{n}_{l'm'} [Y_{l'm'}(\theta, \varphi) - Y_{l'm'}(\theta', \varphi')] \\ &= -\sum_{lm} \delta \bar{n}_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{dp' p'^2}{2\pi^2} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'}) [W_0 - W_l/(2l+1)]}_{1/\tau_l} \end{aligned} \quad (9.30)$$

Damit wird Gl. (9.23) zu

$$-\omega \delta n_{\vec{p}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta \bar{n}_{\vec{p}} + ie \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) = i \sum_{lm} \frac{\delta \bar{n}_{lm}}{\tau_l} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (9.31)$$

mit

$$\frac{1}{\tau_l} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{dp' p'^2}{2\pi^2} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'}) [W_0 - W_l / (2l + 1)], \quad (9.32)$$

$$\frac{1}{\tau_0} = 0, \quad (\text{Teilchenzahlerhaltung}) \quad (9.33)$$

$$\frac{1}{\tau_1} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{p}'} W_{\vec{p}\vec{p}'} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}'}) [1 - \cos \vartheta]. \quad (9.34)$$

Jede Mode $l > 0$ relaxiert mit der ihr zugehörigen Relaxationszeit τ_l , wobei die Rate $1/\tau_0 = 0$ aufgrund der Teilchenzahlerhaltung verschwindet und τ_1 die *Impulsrelaxationszeit* oder *Transportzeit* angibt.

Die resultierende kinetische Gleichung für $\delta n_{\vec{p}}$ im Limes $\omega\tau, ql \gg 1$ haben wir im Abschnitt 7.3 untersucht; hier konzentrieren wir uns auf die durch den Stossterm induzierten Modifikationen und berechnen die (longitudinalen und transversalen) Antwortfunktionen ε und σ . Nebst den Transporteigenschaften (z.B., das Drude Gesetz für σ) erhalten wir auch einen Einblick in die Abschirmeigenschaften eines realen Systems mit endlicher Streuzeit (nichtidealer Leiter).

Eine *longitudinale Anregung* mit $\vec{q} \parallel \vec{E}$, $ql \ll 1$ erzeugt in Ordnung $(ql)^1$ Antworten in den Kanälen $l = 0, 1$. Wir wählen die Achse $\parallel \vec{q}, \vec{E}$, die Quantenzahl $m = 0$ und berücksichtigen die Teilchenzahlerhaltung durch $\tau_{l=0} = \infty$. Für die Kanäle $l = 0, 1$ erhalten wir dann via Projektion⁸

$$-\omega \delta n_0 + \frac{1}{3} q v_F \delta \bar{n}_1 = 0, \quad (9.35)$$

$$-\omega \delta n_1 + q v_F \delta \bar{n}_0 + ie E v_F \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) = \frac{i}{\tau_1} \delta \bar{n}_1. \quad (9.36)$$

Mit den Relationen⁹

$$\delta \bar{n}_{lm}^{s,a} = [1 + F_l^{s,a} / (2l + 1)] \delta n_{lm}^{s,a} \quad (9.38)$$

finden wir mit

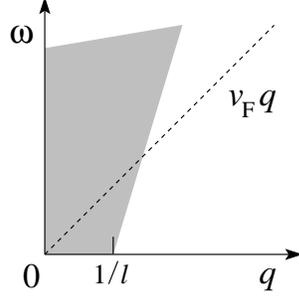
$$m^* = (1 + F_1^s / 3) m \quad (9.39)$$

⁸Benutze $\int d \cos \vartheta \cos^2 \vartheta = 1/3$.

⁹Diese Beziehung folgt aus der Definition

$$\delta \bar{n}_{\vec{p}} = \delta n_{\vec{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \sum_{\vec{p}'} f_{\vec{p}\vec{p}'} \delta n_{\vec{p}'} \quad (9.37)$$

und der Entwicklung in sphärischen Harmonischen, $\delta n_{\vec{p}\pm} = \delta n_{\vec{p}}^s \pm \delta n_{\vec{p}}^a$ und $\delta n_{\vec{p}}^{s,a} = \sum_{lm} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) \delta n_{lm}^{s,a} Y_{lm}$.


 Abb. 9.4: Bereich $q < 1/l$, $\omega \geq 0$, beliebig im $\omega - q$ Diagramm.

sofort das Resultat

$$\delta \bar{n}_1(\Omega) = \frac{ie \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu)}{\frac{m}{m^*} \omega + \frac{i}{\tau_1} - \frac{q^2 v_F^2}{3\omega} (1 + F_0^s)} \quad (9.40)$$

und die Stromdichte

$$\begin{aligned} e\vec{J} &= 2ie^2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{(\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \vec{v}_{\vec{p}} (1 + F_1^s/3)}{\omega + i/\tau_{\text{eff}} - q^2 s^2/\omega} \\ &= ie^2 \frac{m p_F (1 + F_1^s/3)}{\pi^2 \hbar^2} \int d\varepsilon_{\vec{p}}^0 \int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{4\pi} \frac{\cos^2 \theta \vec{E} v_{\vec{p}}^2 \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu)}{\omega + i/\tau_{\text{eff}} - q^2 s^2/\omega} \\ &= ie^2 \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F} \frac{m^*}{m} \frac{1}{3} v_F^2 \frac{\tau_{\text{eff}}/i}{1 - i\omega\tau_{\text{eff}} + iq^2 s^2 \tau_{\text{eff}}/\omega} \vec{E} \end{aligned} \quad (9.41)$$

mit $\tau_{\text{eff}} = \tau_1 m/m^*$ und $s^2 = (v_F^2/3)(1 + F_0^s)(1 + F_1^s/3)$. Damit finden wir die *longitudinale Leitfähigkeit*

$$\sigma_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2 n \tau_{\text{eff}}}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau_{\text{eff}}(1 - q^2 s^2/\omega^2)}, \quad (9.42)$$

gültig für beliebige ω im Gebiet $ql < 1$, vgl. Abb. 9.4, also insbesondere auch im Gebiet der *optischen Antwort*, wo $\sigma_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = \sigma_{\perp}(\vec{q}, \omega)$. Im Grenzfall $q \rightarrow 0$ erhalten wir die Drudeformel für $\sigma(\omega)$.

Tatsächlich liefert in diesem Gebiet ($q \rightarrow 0$) die transversale Anregung mit $l = 1$, $m = \pm 1$ und $\delta n_{l=0} = 0$ (keine Raumladungen) bis auf Korrekturen der Ordnung $qv_F\tau$ die gleiche Antwort,

$$-\delta n_1 + ie \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) = \frac{i}{\tau_1} \delta \bar{n}_1, \quad (9.43)$$

$$\delta\bar{n}_1(\Omega) = \frac{ie\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \mu)}{m\omega/m^* + i/\tau_1}, \quad (9.44)$$

$$\sigma_{\perp}(ql < 1, \omega) = \frac{e^2 n \tau_{\text{eff}}}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau_{\text{eff}}}. \quad (9.45)$$

Für $\omega\tau > q^2 l^2$ können wir den Term $\propto q^2$ im Nenner vernachlässigen und erhalten das Drude-Resultat (gültig für \parallel und \perp Felder)

$$\sigma(\omega\tau > q^2 l^2) = \frac{ne^2\tau_{\text{eff}}}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau_{\text{eff}}} = \frac{\sigma_{\text{dc}}}{1 - i\omega\tau_{\text{eff}}} \quad (9.46)$$

Im Grenzfall $\omega\tau \ll 1$ und $ql \ll 1$ erhalten wir für die longitudinale diffusive Leitfähigkeit (beachte den sogenannten Diffusionspol $1/(i\omega - dq^2)$)

$$\sigma_{\parallel}(\omega\tau < 1, ql < 1) = \frac{ne^2}{m} \frac{i\omega\tau_{\text{eff}}}{i\omega - Dq^2} \quad (9.47)$$

mit der Diffusionskonstanten $D = s^2\tau_{\text{eff}}$; dieses (hydrodynamische) Resultat lässt sich durch rein makroskopische Argumente herleiten, siehe Ref. [Pin66].

Für die Dielektrizitätskonstante finden wir

$$\varepsilon(q < 1/l, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - s^2q^2 + i\omega/\tau_{\text{eff}}}. \quad (9.48)$$

Der statische Limes $\varepsilon(q, \omega \rightarrow 0) = 1 + \omega_p^2/s^2q^2$ wird durch Stöße nicht verändert, die Abschirmung ist deshalb unabhängig von τ und Stöße ändern auch die Teilchenzahl in der Raumladung nicht. Für $\omega\tau > q^2 l^2$ erhalten wir das Drude Resultat mit dem *metallischen Pol* bei $\omega = 0$ und einem weiteren *dissipativen Pol* zurück,

$$\varepsilon(\omega > q^2 l^2/\tau) = 1 + \frac{4\pi i\sigma_{\text{dc}}}{\omega(1 - i\omega\tau_{\text{eff}})}. \quad (9.49)$$

9.2.2 Elektron-Phonon-Streuung

Bloch-Grüneisen-Gesetz

Die Lösung der Transportgleichung für Elektron-Phonon-Streuung ist eine schöne Rechnung, auf die wir leider aus Zeitgründen nicht eingehen können. Wie bei der Defektstreuung müssen wir anstelle der Einteilchen-Relaxationszeit τ eine Transportzeit τ_{trans} berechnen. Einsetzen derselben in $\sigma =$

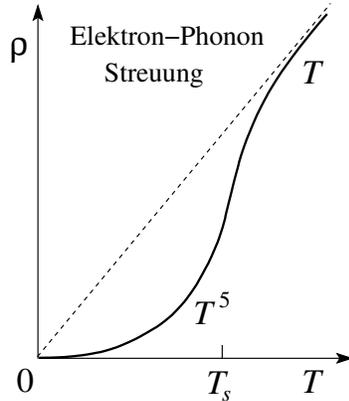


Abb. 9.5: Bloch-Grüneisen $\rho(T) \propto T^5$ Gesetz für den durch Elektron-Phonon Streuung generierten Widerstand (Skizze). Für $T > T_s$ wird der Widerstand T -linear.

$ne^2\tau_{\text{trans}}/m$ gibt uns die Leitfähigkeit. Man findet

$$\frac{\hbar}{\tau_{\text{trans}}} = \frac{\pi}{2} T_s \left(\frac{T}{T_s}\right)^5 J_5(2T_s/T), \quad (9.50)$$

$$J_n(y) = \int_0^y dx \frac{x^n}{4 \sinh^2(x/2)} \begin{cases} n! \zeta(n), & y \rightarrow \infty, \\ y^{n-1}/(n-1), & y \rightarrow 0. \end{cases} \quad (9.51)$$

Dies liefert uns das berühmte *Bloch-Grüneisen-Gesetz* $\rho(T) \propto T^5$, vgl. Abb. 9.5. Beachte, dass in höherer Ordnung $J_5 \approx 4(T_s/T)^4 - 8(T_s/T)^6$, d.h. ρ extrapoliert linear auf 0 bei hohen T .

Matthiesen'sche Regel

Im Experiment können wir nur ρ_{tot} , nicht aber die einzelnen Anteile ρ_{eD} und ρ_{ep} messen. Man kann zeigen, dass $\rho_{\text{tot}} \geq \rho_{\text{ep}} + \rho_{\text{eD}}$. Die sog. *Matthiesen'sche Regel* ersetzt \geq durch $=$.

9.2.3 Elektron-Elektron-Streuung

Der Impuls \vec{p} ist im Elektron-Elektron-Streuprozess erhalten, also ist im Prinzip der korrespondierende Widerstand $\rho = 0$. Im Metall erzeugen allerdings *Umklapp-Prozesse* einen endlichen Widerstand $\rho \propto T^2$ (Landau und Pomeranchuk, 1936), d.h. die T -Abhängigkeit ist durch τ_{qp} , der Relaxationszeit der Quasiteilchen, bestimmt. Die Wärmeleitfähigkeit $\kappa \propto 1/T$ ist auch ohne Umklappprozesse endlich.

Kapitel 10

Abschirmung: Long. vs Trans.

In diesem Kapitel gehen wir nochmals auf das Phänomen der Abschirmung ein, wobei wir besonderes Gewicht auf den Unterschied zwischen der longitudinalen, metallischen Abschirmung und der transversalen Abschirmung im Supraleiter legen.

10.1 Maxwell- und konstitutive Gleichungen

Wir starten mit den Maxwellgleichungen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi[\langle \rho \rangle + \rho_{\text{ext}}], \quad (10.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (10.2)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \vec{B}, \quad (10.3)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \frac{1}{c} \partial_t \vec{E} + \frac{4\pi}{c} [\langle \vec{j} \rangle + \vec{j}_{\text{ext}}], \quad (10.4)$$

mit den lokalen Feldern \vec{E} und \vec{B} im Metall und den induzierten Ladungs- und Stromdichten $\langle \rho \rangle$ und $\langle \vec{j} \rangle$. Die homogenen Gleichungen werden mit den Potentialen ϕ und \vec{A} und den Feldern $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$ und $\vec{E} = -\nabla\phi - c^{-1}\partial_t\vec{A}$ gelöst. Die externen Potentiale ϕ_{ext} und \vec{A}_{ext} werden durch die externen Quellen ρ_{ext} und \vec{j}_{ext} erzeugt; die Potentiale ergeben sich dann aus externen und induzierten Komponenten, $\phi = \phi_{\text{ext}} + \phi_{\text{pol}}$ und $\vec{A} = \vec{A}_{\text{ext}} + \vec{A}_{\text{pol}}$. Nach

einer Fouriertransformation $\vec{r}, t \rightarrow \vec{q}, \omega$ finden wir

$$q^2 \phi = 4\pi[\langle \rho \rangle + \rho_{\text{ext}}], \quad (10.5)$$

$$q^2 \phi_{\text{ext}} = 4\pi \rho_{\text{ext}}, \quad (10.6)$$

$$(\omega^2 - c^2 q^2) \vec{A} = 4\pi c [\langle \vec{j} \rangle + \vec{j}_{\text{ext}}], \quad (10.7)$$

$$(\omega^2 - c^2 q^2) \vec{A}_{\text{ext}} = 4\pi c \vec{j}_{\text{ext}}. \quad (10.8)$$

Wir benutzen die konstitutiven Materialgleichungen für die Stromdichte (\rightarrow Leitfähigkeitstensor $\sigma_{\mu\nu}$)

$$\langle j_\mu(\vec{q}, \omega) \rangle = \sigma_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) E_\nu(\vec{q}, \omega) \quad (10.9)$$

und für die Polarisation (\rightarrow dielektrischer Tensor $\varepsilon_{\mu\nu}$; das \vec{D} -Feld wird durch externe Ladungen und Ströme erzeugt)

$$D_\mu = \varepsilon_{\mu\nu} E_\nu; \quad (10.10)$$

mit der Gleichung für den Verschiebungsstrom

$$\partial_t \vec{D} = \partial_t \vec{E} + 4\pi \langle \vec{j} \rangle \quad (10.11)$$

folgt dann die Beziehung

$$\varepsilon_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) \quad (10.12)$$

zwischen $\varepsilon_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega)$ und $\sigma_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega)$. Für ein isotropes System gilt

$$(\varepsilon)_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\perp} \end{pmatrix} = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \begin{pmatrix} \sigma_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\perp} \end{pmatrix} \quad (10.13)$$

10.1.1 Longitudinaler Response

Aus den longitudinalen Gleichungen (10.5), (10.6) und der konstitutiven Gleichung (10.10) erhalten wir die Beziehung

$$\phi(\vec{q}, \omega) = \frac{\phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)}{\varepsilon_{\parallel}(\vec{q}, \omega)}. \quad (10.14)$$

Im statischen Limes $\omega \rightarrow 0$ ist

$$\varepsilon_{\parallel}(q) = 1 + \omega_p^2 / q^2 s^2 \quad (10.15)$$

und longitudinale Felder werden abgeschirmt,

$$\phi(\vec{q}, \omega) = \frac{\phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)}{1 + \omega_p^2/s^2 q^2}, \quad (10.16)$$

$$[\Delta - \omega_p^2/s^2] \phi = -4\pi\rho. \quad (10.17)$$

10.1.2 Dynamischer Response, Skineffekt

Im Metall wird auch jede dynamische Anregung abgeschirmt (*Skineffekt*). Ausgehend von (10.7) mit $\vec{j}_{\text{ext}} = 0$ und unter Benutzung von (10.9) und (10.12) erhält man die bekannte Dispersionsrelation (wir betrachten den optischen Grenzfall $q \rightarrow 0$ wo $\varepsilon_{\parallel}(0, \omega) = \varepsilon_{\perp}(0, \omega) = \varepsilon(\omega)$)

$$q^2 = \varepsilon(\omega)\omega^2/c^2; \quad (10.18)$$

Einsetzen von (10.12) ergibt die Eindringtiefe (es ist $q = q' + i/\delta$, $\sigma(\omega) = \sigma_{\text{dc}}/(1 - i\omega\tau_{\text{eff}})$, cf. Gl. (9.42)) und wir betrachten Frequenzen $\omega\tau_{\text{eff}} \ll 1$)

$$\delta = \sqrt{\frac{c^2}{2\pi\omega\sigma_{\text{dc}}}}. \quad (10.19)$$

Mit zunehmender Frequenz ω wird die Skintiefe δ kleiner; wenn $\omega\tau_{\text{eff}} > 1$, geht das Resultat in den stossfreien Limes über und δ saturiert auf den Wert der London-Eindringtiefe

$$\delta = \sqrt{\frac{c^2\tau_{\text{eff}}}{2\pi m} \frac{m}{e^2 n \tau_{\text{eff}}}} = \sqrt{\frac{c^2 m}{2\pi e^2 n}} \approx \lambda_{\text{L}}. \quad (10.20)$$

Gehen wir schliesslich mit ω über die Plasmafrequenz hinaus, so wird $\varepsilon(\omega) > 0$ positiv und das Metall wird transparent. Beachte, dass für einen idealen Leiter mit $\tau_1 \rightarrow \infty$ jedes dynamische Signal auf der Länge λ_{L} abgeschirmt wird,

$$\sigma(\omega) = \frac{ie^2 n}{m} [P(1/\omega) - i\pi\delta(\omega)]. \quad (10.21)$$

Insbesondere geben der ideale Leiter und der Supraleiter dieselbe dynamische Antwort. Beachte, dass die dynamische Leifähigkeit (10.21) aus der Trägheit der Elektronen resultiert,

$$e\vec{E} = m\partial_t\vec{v} = \frac{m}{en}\partial_t\vec{j} = -\frac{i\omega m}{en}\vec{j}, \quad (10.22)$$

$$\vec{j} = \frac{ie^2 n}{m\omega}\vec{E} = \sigma(\omega\tau \gg 1)\vec{E}. \quad (10.23)$$

10.1.3 Transversaler statischer Response

Der Unterschied zwischen Metall und Supraleiter tritt erst im statischen Abschirmverhalten zu Tage. Im Limes $\omega = 0$ ist der Wellenvektor \vec{q} relevant und wir müssen zwischen longitudinaler und transversaler Antwort unterscheiden. Die transversalen Eigenmoden erfüllen die Wellengleichung

$$\left(1 + \frac{4\pi i \omega \sigma_{\perp}}{\omega^2 - c^2 q^2}\right) \vec{A} = \vec{A}_{\text{ext}} = 0, \quad (10.24)$$

$$\rightarrow \text{Dispersion aus : } c^2 q^2 = \omega^2 \varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega); \quad (10.25)$$

ein endliches externes Feld \vec{A}_{ext} erzeugt die Antwort

$$\vec{A}(\vec{q}, \omega) = \frac{\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)}{1 + \frac{4\pi i \omega \sigma_{\perp}(\vec{q}, \omega)}{\omega^2 - c^2 q^2}}. \quad (10.26)$$

Ein statisches \vec{A} -Feld wird gemäss

$$\vec{A}(\vec{q}, \omega) = \frac{\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega = 0)}{1 - \frac{4\pi i \omega \sigma_{\perp}(\vec{q}, \omega)}{c^2 q^2}} \quad (10.27)$$

genau dann abgeschirmt, wenn $\sigma_{\perp}(\vec{q}) \propto 1/\omega$ ist. Dies ist im Supraleiter, in dem $\sigma_{\perp} = ie^2 n_s / m \omega$ (n_s bezeichnet die supraleitende Dichte), gerade der Fall,

$$\vec{A}(\vec{q}) \Big|_{\text{SL}} = \frac{\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q})}{1 + \omega_{ps}^2 / c^2 q^2} = \frac{\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q})}{1 + 1/\lambda_L^2 q^2}, \quad (10.28)$$

$$\frac{1}{\lambda_L^2} = \frac{4\pi n_s e^2}{m^2 c^2} = \frac{\omega_{ps}^2}{c^2}. \quad (10.29)$$

Das Überleben einer supraleitenden, diamagnetischen Dichte im Supraleiter ist eine subtile Angelegenheit, siehe Kapitel 11.

10.1.4 Landau-Diamagnetismus

In diesem Zusammenhang erwähnen wir der Vollständigkeit halber auch den *Landau-Diamagnetismus* im Metall: Während in einem Metall die diamagnetische Dichte $n_s = n - n_n$ wegen $n_n = n$ vollständig kompensiert wird und deshalb keine transversale Abschirmung $\sigma \propto n_s/\omega$ auftritt, überlebt

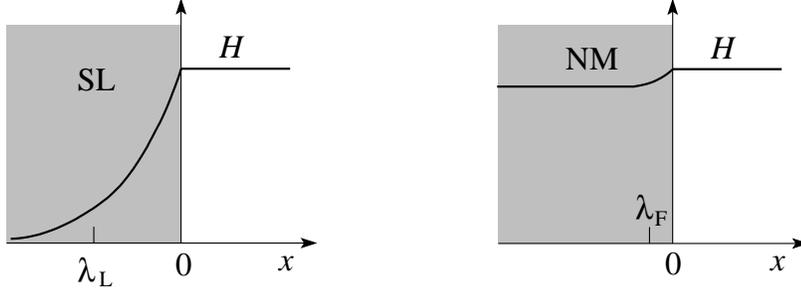


Abb. 10.1: Meissner-Ochsenfeld Effekt mit vollständiger diamagnetischer Abschirmung des Magnetfeldes im Supraleiter auf der Skala der London-Eindringtiefe (links); Landau Diamagnetismus mit einer (kleinen) Reduktion des Magnetfeldes im Normalmetall (rechts).

dennoch ein dispersiver Term $\propto nq^2/\omega$, der den Landau-Diamagnetismus beschreibt,

$$\sigma_{\perp}(\vec{q}) = \frac{ie^2}{m\omega} \left[\underbrace{(n - n_n)}_{= 0 \text{ im Metall}} + \frac{q^2 n}{4p_F^2} \right] + \text{const.} \quad (10.30)$$

Der dispersive Anteil $\propto nq^2/\omega$ ist in der Fermiliquidtheorie nicht enthalten; man erhält ihn aus einer mikroskopischen Berechnung der transversalen Suszeptibilität ($J_{\vec{q}\perp}$ ist eine Komponente des transversalen paramagnetischen Stromes $J_{\vec{q}}$ orthogonal zu \vec{q})

$$\chi_{\perp}(\vec{q}, \omega) = \sum_n |\langle n | J_{-\vec{q}\perp} | 0 \rangle|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2} \quad (10.31)$$

in einer Random Phase Approximation für den Grenzfall $\omega \rightarrow 0$, siehe Ref. [Pin66]. Das Einsetzen in Gl. (10.26) ergibt

$$\frac{4\pi i \sigma_{\perp} \omega}{-c^2 q^2} = \frac{\omega_p^2}{4c^2 p_F^2}, \quad (10.32)$$

$$\Rightarrow \vec{A}(\vec{q}) = \frac{\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q})}{1 + \omega_p^2/4c^2 p_F^2}, \quad (10.33)$$

das interne Feld ist also leicht reduziert, wird aber nicht exponentiell abgeschirmt wie z.B. in einem Supraleiter, vgl. Abb. 10.1.

Zusammenfassend sehen wir, dass das ω -Verhalten bei $\vec{q} = 0$ den Transport beschreibt und in diesem Fall die longitudinalen \parallel und transversalen \perp Antworten gleich ist. Das \vec{q} -Verhalten bei $\omega \rightarrow 0$ beschreibt dagegen die *Abschirmung*: im \parallel -Kanal von skalaren Feldern und elektrischen Ladungen, im \perp -Kanal von transversalen Vektorfeldern und Strömen. Im Isolator sind beide Felder ϕ und \vec{A} masselos. Im Metall wird das longitudinale Potential ϕ massiv mit der ‘Masse’ $\mu = 1/\lambda_{\text{TF}}^2$. Im Supraleiter wird zusätzlich das transversale Feld \vec{A} massiv, mit der Masse $\mu = 1/\lambda_{\text{L}}^2$, wobei $\lambda_{\text{L}}^2 = c^2/\omega_p^2 \gg v_{\text{F}}^2/\omega_p^2 = \lambda_{\text{TF}}^2$.

10.2 Long. und transv. Antwortfunktionen

Wir suchen mikroskopische Ausdrücke für die transversalen Antwortfunktionen ε_{\perp} und σ_{\perp} ; die entsprechenden Ausdrücke für die longitudinalen Größen ε_{\parallel} und σ_{\parallel} kennen wir bereits aus Kapitel 7. Analog zu $\varepsilon_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = 1 - (4\pi e^2/q^2)\chi^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega)$ mit¹ $\chi^{\text{scr}} \sim \langle \rho^{(1)} \rho^{(1)} \rangle$ können wir $\varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega)$ durch eine transversale Stromdichteantwortfunktion $\chi_{\perp}^{\text{scr}} \sim \langle \vec{J}_{\perp}^{(1)} \vec{J}_{\perp}^{(1)} \rangle$ ausdrücken. Im folgenden berechnen wir die Antwortmatrix $\chi_{\mu\nu}$ auf interne Felder. Wir müssen deshalb die transversale magnetische Wechselwirkung in der Berechnung von $\chi_{\perp}^{\text{scr}}$ abschirmen. Dies ist allerdings ein Effekt der Ordnung v^2/c^2 , den wir vernachlässigen: $\vec{J}_{\perp}^{(1)} \approx \vec{J}$ und $\chi_{\perp}^{\text{scr}} \approx \chi_{\perp}$. In der Berechnung der longitudinalen Komponente $\chi_{\parallel}^{\text{scr}}$ müssen wir die Coulomb-Wechselwirkung abschirmen, was ein Effekt der Ordnung 1 ist; deshalb gilt $J_{\parallel}^{(1)} \neq J_{\parallel}$ und $\chi_{\parallel}^{\text{scr}} \neq \chi_{\parallel}$. $\chi_{\mu\nu}$ ergibt dann im transversalen Kanal gerade $\chi_{\perp}^{\text{scr}} = \chi_{\perp}$ (mit \vec{J}_{\perp}), im longitudinalen Kanal dagegen $\chi_{\parallel}^{\text{scr}} \neq \chi_{\parallel}$ (mit $\vec{J}_{\parallel}^{(1)}$ und nicht \vec{J}_{\parallel}). Beachte, dass χ aus Gl. (5.26) χ_{\parallel} entspricht, χ_{scr} aus Gl. (7.87) aber $\chi_{\parallel}^{\text{scr}}$.

Wir starten vom Wechselwirkungshamiltonian

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{c} \sum_{\vec{q}} \vec{J}_{-\vec{q}} \cdot \vec{A}_{\vec{q}} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (10.34)$$

$$\vec{J}_{\vec{q}} = \frac{1}{2m} \sum_i [\vec{p}_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} + e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \vec{p}_i], \quad (10.35)$$

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{e}{2} \sum_i [\vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{v}_i], \quad (10.36)$$

$$\vec{v}_i = \vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i), \quad (10.37)$$

¹Die Dichte $\rho^{(1)}$ und die Ströme $\vec{J}^{(1)}$ und $\vec{J}_{\perp}^{(1)}$ sind abgeschirmte Dichten und Ströme.

und finden die Stromdichte

$$\vec{j}_{\vec{q}} = e\vec{J}_{\vec{q}} - \frac{e^2}{mc} \sum_{\vec{k}} \rho_{\vec{q}-\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}} \quad (10.38)$$

mit einem paramagnetischen Anteil $\vec{J}_{\vec{q}}$ und einem diamagnetischen Teil $\propto \vec{A}_{\vec{k}}$. Durch Mitteln und Verwenden der linearen Antwort $\rho_{\vec{q}-\vec{k}} = n\delta_{\vec{q}\vec{k}}$ ergibt sich

$$\langle \vec{j}(\vec{q}, \omega) \rangle = e\langle \vec{J}(\vec{q}, \omega) \rangle - \frac{e^2 n}{mc} \vec{A}(\vec{q}, \omega), \quad (10.39)$$

$$\langle J_{\mu}(\vec{q}, \omega) \rangle = -\frac{e}{c} \chi_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) A_{\nu}(\vec{q}, \omega). \quad (10.40)$$

In erster Ordnung Störungstheorie erhält man:

$$\chi_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) = \sum_n \left[\frac{\langle 0 | J_{\vec{q}\mu} | n \rangle \langle n | J_{-\vec{q}\nu} | 0 \rangle}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{\langle 0 | J_{-\vec{q}\mu} | n \rangle \langle n | J_{\vec{q}\nu} | 0 \rangle}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right],$$

$$\sigma_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \left[\chi_{\mu\nu} + \frac{n}{m} \delta_{\mu\nu} \right], \quad (10.41)$$

$$\varepsilon_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \delta_{\mu\nu} - \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \chi_{\mu\nu}. \quad (10.42)$$

10.2.1 Antwort im isotropen System

Allgemein gilt

$$\varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \left[\chi_{\perp}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right], \quad (10.43)$$

$$\sigma_{\perp}(\vec{q}, \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \left[\chi_{\perp}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right], \quad (10.44)$$

$$\varepsilon_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \left[\chi_{\parallel}^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right], \quad (10.45)$$

$$\sigma_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \left[\chi_{\parallel}^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right] \quad (10.46)$$

und für ein isotropes System wissen wir aus Gl.(7.87)

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega), \quad (10.47)$$

$$\sigma(\vec{q}, \omega) = \frac{ie^2 \omega}{q^2} \chi^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega). \quad (10.48)$$

Die Äquivalenz zwischen Gln. (10.45),(10.46) und Gln. (10.47),(10.48) verlangt, dass²

$$\chi_{\parallel}^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} = \frac{\omega^2}{q^2} \chi^{\text{scr}}(\vec{q}, \omega). \quad (10.49)$$

Dies wird durch die f -Summenregel Gl. (5.29) als Ausdruck der Teilchenzahlerhaltung garantiert. Ebenso garantiert die Teilchenzahlerhaltung die Beziehung

$$\chi_{\parallel}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} = \frac{\omega^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega), \quad (10.50)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \frac{\omega^2}{q^2} \chi - \chi_{\parallel} &= \frac{1}{q^2} \sum_n \left[|\langle n | \omega \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 - |\langle n | \vec{q} \cdot \vec{J}_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \right] \\ &\quad \times \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2} \\ &= \frac{1}{q^2} \sum_n 2\omega_{n0} |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 = \frac{n}{m}. \end{aligned} \quad (10.51)$$

Dabei wurden die Ausdrücke

$$\chi_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{q^2} \sum_n |\langle n | \vec{q} \cdot \vec{J}_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2}, \quad (10.52)$$

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \sum_n |\langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2}, \quad (10.53)$$

die Kontinuitätsgleichung,

$$\partial_t \rho_{-\vec{q}} = i \vec{q} \cdot \vec{J}_{-\vec{q}} \quad \rightarrow \quad \omega_{n0} \langle n | \rho_{-\vec{q}} | 0 \rangle = \vec{q} \cdot \langle n | \vec{J}_{-\vec{q}} | 0 \rangle, \quad (10.54)$$

und im letzten Schritt die Gl. (5.29) verwendet. Gl. (10.49) ist mathematisch analog zu Gl. (10.50), aber physikalisch subtiler. Tatsächlich sind Gl. (10.49) und (10.50) Bedingungen für die Eichinvarianz der Theorie, die sich auch in der Gleichheit von ε_{\parallel} (definiert durch \vec{A}) und ε (definiert durch ϕ) ausdrückt.

10.2.2 Eichinvarianz

Das longitudinale Vektorfeld $\hat{q} \cdot \vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$ definiert via $\vec{D} = -c^{-1} \partial_t \vec{A}_{\text{ext}}$, $\vec{D} = -\vec{\nabla} \phi_{\text{ext}}$ ein Skalarfeld

$$\phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) = -\frac{\omega}{cq^2} \vec{q} \cdot \vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega). \quad (10.55)$$

²Beachte: Aus der Kontinuitätsgleichung $\vec{q} \cdot \vec{J}_{\vec{q}} = \omega \rho_{\vec{q}}$ folgt ein Korrekturfaktor q^2/ω^2 beim Übergang vom $\langle \vec{j} \vec{j} \rangle$ Korrelator in $\chi_{\mu\nu}$ zum $\langle \rho \rho \rangle$ -Korrelator in χ .

Der Übergang $\vec{A}_{\text{ext}} \rightarrow \phi_{\text{ext}}$ definiert eine Eichtransformation. Die ganze Response-Theorie, welche wir im Kapitel (5) mit ϕ_{ext} hergeleitet haben, können wir jetzt mit dem *longitudinalen* Vektorfeld $\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$ repetieren,³

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{c} \vec{J}_{-\vec{q}} \cdot \vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (10.56)$$

Mit denselben Schritten wie am Anfang des Kapitels erhält man ($\vec{A}_{\text{ext}} = (-ic/\omega)\vec{D}$)

$$\langle \vec{j} \rangle = -\frac{e^2}{c} \left[\chi_{\parallel}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right] \vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega), \quad (10.57)$$

$$\chi_{\parallel}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{q^2} \sum_n |\langle n | \vec{q} \cdot \vec{J}_{-\vec{q}} | 0 \rangle|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2}. \quad (10.58)$$

Die Umrechnung von Strömen in Dichten via $\vec{\nabla} \cdot \langle \vec{j} \rangle = -e\partial_t \langle \rho \rangle$ ergibt analog

$$\langle \rho \rangle = \frac{q^2}{\omega^2} \left[\chi_{\parallel}(\vec{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right] \frac{-e\omega \vec{q} \cdot \vec{A}_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)}{cq^2} \quad (10.59)$$

$$= \chi(\vec{q}, \omega) e\phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) \quad (10.60)$$

und damit (10.50). Beachte dabei die etwas trickigen, aber mit etwas Nachdenken wohl verständlichen Unterschiede zwischen externen und internen Feldern. Insbesondere enthält $\chi_{\mu\nu}$, das in Gl. (10.40) definiert wurde, die abgeschirmte longitudinale Stromdichte $\vec{J}^{(1)}$,

$$\langle n | \vec{q} \cdot \vec{J}_{-\vec{q}}^{(1)} | 0 \rangle = \varepsilon(\vec{q}, \omega_{n0}) \langle n | \vec{q} \cdot \vec{J}_{-\vec{q}} | 0 \rangle = \omega_{n0} \langle n | \rho_{-\vec{q}}^{(1)} | 0 \rangle, \quad (10.61)$$

und damit ist die longitudinale Komponente von $\chi_{\mu\nu}$ äquivalent zu χ^{scr} , denn $\chi_{\mu\nu}$ ist als Antwortfunktion auf interne Felder definiert. Andererseits ist die Abschirmung der magnetischen Wechselwirkung, die für transversale Ströme relevant ist, aber keine Raumladungen erzeugt, $\vec{q} \cdot \vec{J}_{\vec{q}} = 0 = \omega\rho$, vernachlässigbar. $\chi_{\mu\nu}$ enthält deshalb die vollen transversalen Ströme \vec{J} .

10.2.3 Zusammenfassung

Wir gehen aus von den Definitionen der Korrelatoren für die totale Stromdichte $\vec{j} = n\vec{v}$, die paramagnetische Stromdichte \vec{J} und die Ladungsdichte

³Beachte, dass \vec{A}_{ext} ein nicht abgeschirmtes äusseres Feld ist, wohingegen in (10.34) ein internes abgeschirmtes Feld steht.

ρ ,

$$\Pi_{\mu\nu} \leftrightarrow \langle j_\mu j_\nu \rangle - \text{Korrelator}, \quad (10.62)$$

$$\chi_{\mu\nu} \leftrightarrow \langle J_\mu J_\nu \rangle - \text{Korrelator}, \quad (10.63)$$

$$\Pi = \chi \leftrightarrow \langle \rho \rho \rangle - \text{Korrelator}; \quad (10.64)$$

assoziiert zu den Strömen \vec{J} und Ladungen ρ sind die Wechselwirkungen $H_{\text{int}} = \int \vec{J} \cdot \vec{A}/c$ und $H_{\text{int}} = \int \rho \phi$ und es ist $\vec{p} = \vec{v} + (e/c)\vec{A}$, $e > 0$. Dann ist im isotropen Medium

$$\Pi_{\mu\nu} = -j_\mu/(eA_\nu/c) = \chi_{\mu\nu} + n/m, \quad (10.65)$$

$$\Pi = \chi = \rho\phi, \quad (10.66)$$

$$\Pi_{\parallel} = \chi_{\parallel} + n/m, \quad \text{longitudinaler Teil}, \quad (10.67)$$

$$\Pi_{\perp} = \chi_{\perp} + n/m, \quad \text{transversaler Teil}, \quad (10.68)$$

$$\Pi_{\parallel} = (\omega^2/q^2)\Pi. \quad (10.69)$$

Für die Suzeptibilitäten gilt

$$(\chi_{\mu\nu})_{\text{trans}} = \underbrace{\chi_{\perp}}_{\sim \langle \vec{J}_{\perp} \vec{J}_{\perp} \rangle}, \quad (10.70)$$

$$(\chi_{\mu\nu})_{\text{long}} = \underbrace{\chi_{\parallel}^{\text{scr}}}_{\sim \langle J_{\parallel}^{(1)} J_{\parallel}^{(1)} \rangle} = \frac{\omega^2}{q^2} \underbrace{\chi_{\parallel}^{\text{scr}}}_{\sim \langle \rho^{(1)} \rho^{(1)} \rangle} - \frac{n}{m}. \quad (10.71)$$

χ_{\parallel} (Response auf externe Felder) ist nicht $\chi_{\mu\nu}$ (Response auf interne Felder)! Schliesslich müssen wir ‘nur’ noch χ_{\perp} und χ_{\parallel} finden, um alle σ und ε zu berechnen. Wir zitieren hier lediglich einige wichtige Resultate:

– $\vec{q} = 0$: Es gibt keine Anregungen, welche $\chi_{\parallel}^{\text{scr}}$ und χ_{\perp} endlich machen:

$$\begin{aligned} \chi_{\parallel}(0, \omega) &= \chi_{\perp}(0, \omega) = 0 \\ \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \varepsilon_{\parallel}(\vec{q}, \omega) &= \varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \end{aligned} \quad (10.72)$$

Aus $\varepsilon_{\parallel} = 0$ erhalten wir die longitudinalen Plasmonen, währenddem die Transversale Dielektrizitätskonstante via $c^2 q^2 = \omega^2 \varepsilon_{\perp}(\vec{q}, \omega)$ die Lichtmode liefert.

– $\omega = 0$: In diesem Fall gilt für $\vec{q} \rightarrow 0$

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \chi_{\parallel}(\vec{q}, 0) = \chi_{\perp}(\vec{q}, 0) = -\frac{n}{m}. \quad (10.73)$$

Im Normalmetall ist

$$\chi_{\perp}(\vec{q}, 0) = -\frac{n}{m} \left(1 - \frac{q^2}{4p_F^2}\right). \quad (10.74)$$

Dabei eliminiert der erste Term in der Klammer die Supraleitung im Normalmetall und der zweite erzeugt den Landau'schen Diamagnetismus. Im Supraleiter gilt dagegen

$$\chi_{\perp}(\vec{q}, 0) = -\frac{n_n}{m}, \quad n_n < n \quad (10.75)$$

und daraus folgt

$$\sigma_{\perp} = \frac{ie^2}{\omega} \left[\chi_{\perp} + \frac{n}{m} \right] = \frac{ie^2 n_s}{\omega m} \quad (10.76)$$

und es resultiert die London-Gleichung

$$\vec{j}_{\perp} = \frac{ie^2 n_s}{\omega m} \vec{E} = -\frac{e^2 n_s}{cm} \vec{A}. \quad (10.77)$$

Die Aufgabe einer mikroskopischen Theorie der Supraleitung ist es also zu erklären, warum $\chi_{\perp}(\vec{q}, 0) \neq -n/m$ ist. Schaut man sich an, woher das Resultat $\chi_{\perp} = -n/m + \dots$ im Normalleiter herkommt, so bemerkt man siehe Kapitel 11, dass dies mit dem Shift der Elektronen-Niveaus als Antwort auf ein \vec{A} -Feld zu tun hat. Im Metall werden demzufolge Zustände bei ε_F umbesetzt. Erreichen wir einen Zustand, wo bei ε_F keine Niveaus sind, so findet diese Umbesetzung nicht statt: das System ist 'steif'. Eine Energielücke bei ε_F erzeugt gerade diesen Effekt. Die BCS-Theorie der Supraleitung gibt uns diese Energielücke und generiert das Resultat $\chi_{\perp}(\vec{q}, 0) = -n_n/m$. Dies ist das Thema des nächsten Kapitels.

Kapitel 11

Supraleitung

Die Supraleitung ist ein Paradebeispiel für eine Fermiflüssigkeits-Instabilität die auf eine neue geordnete (tief-temperatur) Phase führt (andere Beispiele sind magnetische Instabilitäten (ferro-, anti-ferro-), oder verschiedene Typen von Dichtewellen, Ladungsdichte-Wellen, Spindichte-Wellen). Charakteristika des supraleitenden Zustandes sind der verschwindende elektrische Widerstand und die Verdrängung des Magnetfeldes aus seinem Inneren. Der neue Zustand resultiert aus einer attraktiven Wechselwirkung zwischen den Elektronen am Ferminiveau, welche im einfachsten Fall durch Phononen vermittelt wird. Als Konsequenz bilden die Elektronen in einer Umgebung der Fermifläche Paarzustände, welche dann (dank ihres bosonischen Charakters im \vec{k} -Raum) kondensieren. Wir leiten zuerst die attraktive Wechselwirkung zwischen Elektronen an der Fermifläche her, diskutieren die Cooper-Instabilität, die Bardeen-Cooper-Schrieffer Grundzustands-Wellenfunktion des supraleitenden Zustandes, und das neue Quasiteilchen Anregungsspektrum resultierend aus einer Bogoliubov-Valatin Transformation wo Elektronen und Löcher mischen. Alsdann gehen wir auf einige Eigenschaften des neuen Zustandes ein, insbesondere den Meissner-Ochsenfeld Effekt: wir berechnen die supraleitende Dichte n_s welche die transversale Abschirmung erzeugt.

11.1 Effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Wir gehen in drei Schritten vor:

- wir studieren eine alternative Herleitung der abgeschirmten Elektron-

Elektron-Wechselwirkung in Gl. (7.132),

- wir koppeln die Elektronen an longitudinale Phononen ohne Berücksichtigung von Abschirmeffekten und leiten eine durch die Phononen vermittelte Elektron-Elektron-Wechselwirkung her,
- wir berücksichtigen die Abschirmung und addieren das Resultat des ersten Schrittes um die effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu finden.

11.1.1 Abgeschirmte Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Wir betrachten den Wechselwirkungs-Hamiltonoperator

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma} \quad (11.1)$$

mit der Coulomb-Wechselwirkung $V_{\vec{q}} = 4\pi e^2/q^2$ und sondern die (Elektron-Loch Paar) Komponente

$$\rho_{\vec{q}\vec{p}} = c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma} \quad (11.2)$$

der Dichtefluktuation $\rho_{\vec{q}} = \sum_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}$ ab. Wir betrachten den Streuprozess $V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}}$ in Anwesenheit der anderen Elektronen,

$$h_0 = V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}}, \quad (11.3)$$

$$h_{\text{int}} = V_{\vec{q}} [\rho_{\vec{q}}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}} + \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}}], \quad (11.4)$$

wobei $\rho_{\vec{q}}$ die Komponenten $\rho_{\vec{q}\vec{p}'}$ und $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ nicht enthält (wir nehmen $\sigma \neq \sigma'$ und ignorieren die Spin-Indizes und damit eventuelle Komplikationen durch Austauschprozesse). h_{int} beschreibt die Wechselwirkung der Elektron-Loch Paare $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ und $\rho_{\vec{q}\vec{p}'}$ mit den übrigen Elektronen. Den Term $V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}}$ interpretieren wir via Gl. (5.19) als Störterm: $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ als Störung produziert via $V_{\vec{q}}$ eine Polarisation

$$\langle \rho_{\vec{q}} \rangle = V_{\vec{q}} \chi(\vec{q}, \omega) \rho_{\vec{q}\vec{p}}. \quad (11.5)$$

Via dem Term $V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}}$ wirkt diese Polarisation auf die Komponente $\rho_{\vec{q}\vec{p}'}$ zurück und wir erhalten eine Renormierung von h_0 durch h_{int} ,

$$h_0^{\text{R}} = V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}} \underbrace{[1 + V_{\vec{q}} \chi(\vec{q}, \omega)]}_{=1/\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (11.6)$$

$$= V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}} \quad (11.7)$$

mit $V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} = V_{\vec{q}}/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$. Damit wird der Niederenergiesektor von Gl. (11.1) zu

$$H_{\text{int}}^{\text{scr}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'+\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}. \quad (11.8)$$

In weiteren Betrachtungen, die Gl. (11.8) verwenden, müssen wir dann berücksichtigen, dass wir die Abschirmung bereits im Modell inkorporiert haben und dürfen diese nicht noch einmal berücksichtigen.

Interessant ist, dass die statische Wechselwirkung $V_{\vec{q}}$ nun dynamisch geworden ist, $V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}}$. Der Grund ist natürlich, dass sich die Polarisationswolke erst ausbilden muss, was typischerweise eine Zeitskala $1/\omega_p$ dauert; solange wir Niederenergiephysik mit $\omega \ll \omega_p$ betreiben, können wir

$$V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} \approx V_{\vec{q}}^{\text{scr}} = \frac{V_{\vec{q}}}{\varepsilon(\vec{q}, 0)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + 1/\lambda_{\text{TF}}^2} \quad (11.9)$$

setzen. Bei hohen Energien, z.B. beim Abbremsen von keV-Elektronen im Metall, werden die Plasmonen relevant und obige Approximation bricht zusammen.

11.1.2 Elektron-Phonon-Kopplung

Im gleichen Sinne betrachten wir jetzt die Kopplung der Komponente $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ an ein Phononfeld $Q_{\vec{q}} = \sqrt{1/2\Omega_{\vec{q}}}[a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger]$ mit Energie $\Omega_{\vec{q}} = \Omega_p$, vgl. Abschnitt 8.2.1,

$$h_{\text{ep}} = v_{-\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}} Q_{\vec{q}}^\dagger + v_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger Q_{\vec{q}}, \quad (11.10)$$

$$v_{\vec{q}} = -i \sqrt{\frac{q^2}{MN}} \frac{4\pi Z e^2}{V_{\text{uc}} q^2}. \quad (11.11)$$

Wiederum treibt die Komponente $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ eine Polarisation, diesmal im Ionensystem, und mit der Bewegungsgleichung (vgl. Gl. (8.48)),

$$\ddot{Q}_{\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}} = -(\omega^2 - \Omega_{\vec{q}}^2) Q_{\vec{q}} = -v_{-\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}}, \quad (11.12)$$

erhalten wir ($\eta \rightarrow 0^+$ adiabatisches Einschalten)

$$\langle Q_{\vec{q}} \rangle = \frac{v_{-\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}}}{\omega^2 - \Omega_{\vec{q}}^2 + i\eta}. \quad (11.13)$$

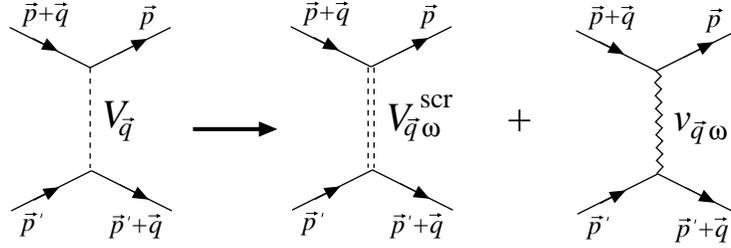


Abb. 11.1: Die Coulomb-Wechselwirkung $V_{\vec{p}}$ wird ersetzt durch die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung $V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}}$ und der durch die Ionen induzierten Wechselwirkung $v_{\vec{q}\omega}$.

Die Polarisierung der Ionen wirkt via Gl. (11.10) auf $\rho_{\vec{q}\vec{p}}^\dagger$ zurück und wir erhalten eine durch die Phononen, d.h., durch die Deformation des Ionen-hintergrundes, induzierte Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$h_{\text{int}}^{\text{ph}} = \frac{|v_{\vec{q}}|^2}{\omega^2 - \Omega_{\vec{q}}^2 + i\eta} \rho_{\vec{q}\vec{p}'}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}}. \quad (11.14)$$

Beachte, dass diese Wechselwirkung für $\omega < \Omega_{\vec{q}}$ attraktiv ist. Diagrammatisch ist die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Abb. 11.1 dargestellt. Offensichtlich müssen wir noch $v_{\vec{q}\omega}$ abschirmen und auch die Phononmode von $\Omega_{\vec{q}}$ zu $\omega_1 = s_{\text{ph}}q$ renormieren, vgl. Abschnitt 8.2.1. Diese Aufgaben erledigen wir im dritten und letzten Schritt.

11.1.3 Abgeschirmte Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Zusätzlich zum Hintergrund polarisiert $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ auch das Elektronen-System und anstelle von Gl. (11.13) erhalten wir

$$\ddot{Q}_{\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}} = -(\omega^2 - \Omega_{\vec{q}}^2) Q_{\vec{q}} = -v_{-\vec{q}}(\rho_{\vec{q}\vec{p}} + \langle \rho_{\vec{q}} \rangle) \quad (11.15)$$

mit (beachte, dass $\rho_{\vec{q}\vec{p}}$ sowohl eine Polarisationsdichte $\langle \rho_{\vec{q}} \rangle$ als auch eine Phononamplitude $\langle Q_{\vec{q}} \rangle$ erzeugt; beide sind relevant in der Berechnung der induzierten Polarisation $\langle \rho_{\vec{q}} \rangle$)

$$\langle \rho_{\vec{q}} \rangle = \chi(\vec{q}, \omega) [V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}} + v_{\vec{q}} Q_{\vec{q}}]. \quad (11.16)$$

Die Polarisation $\langle \rho_{\vec{q}} \rangle$ enthält jetzt einerseits Terme, die durch $V_{\vec{q}}$ getrieben sind, vgl. Gl. (11.5), als auch solche, die via $v_{\vec{q}}$ von der Ionenpolarisation

herrühren, vgl. Gl. (8.49) und (11.10). Das Einsetzen von Gl. (11.16) in (11.15) liefert uns

$$\langle Q_{\vec{q}} \rangle = \frac{v_{-\vec{q}}(1 + V_{\vec{q}}\chi(\vec{q}, \omega))}{\omega^2 - \Omega_{\vec{q}}^2 - |v_{\vec{q}}|^2\chi(\vec{q}, \omega)} \rho_{\vec{q}\vec{p}} \quad (11.17)$$

$$= \frac{v_{-\vec{q}}}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \frac{1}{\omega^2 - \omega_1^2} \rho_{\vec{q}\vec{p}}. \quad (11.18)$$

Damit tritt an die Stelle von $v_{-\vec{q}}$ die abgeschirmte Wechselwirkung $v_{-\vec{q}}^{\text{scr}} = v_{-\vec{q}}/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ und an die Stelle von $\Omega_{\vec{q}} \approx \Omega_p$ die abgeschirmte Phonondispersion $\omega_1 = s_{\text{ph}}q$, vgl. Gl. (11.18) mit (11.13). Setzen wir schliesslich die Resultate von Gl. (11.16) und (11.18) in die Wechselwirkungsterme Gln. (11.4) und (11.10) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} h_{\text{int}}^{\text{eff}} &= V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}} + V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}}^\dagger \chi [V_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}} + v_{\vec{q}} Q_{\vec{q}}] + v_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}\vec{p}}^\dagger Q_{\vec{q}} \\ &= \left[(1 + V_{\vec{q}}\chi) V_{\vec{q}} + \frac{|v_{\vec{q}}|^2}{\varepsilon} (1 + V_{\vec{q}}\chi) \frac{1}{\omega^2 - \omega_1^2} \right] \rho_{\vec{q}\vec{p}}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}} \\ &= \left[V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} + \frac{|v_{\vec{q}}^{\text{scr}}|^2}{\omega^2 - \omega_1^2} \right] \rho_{\vec{q}\vec{p}}^\dagger \rho_{\vec{q}\vec{p}}. \end{aligned} \quad (11.19)$$

Damit tritt an die Stelle von Gl. (11.8) der neue effektive Hamiltonoperator im Niederenergiesektor,

$$H_{\text{int}}^{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{p}\vec{p}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} \left[V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} + \frac{|v_{\vec{q}}^{\text{scr}}|^2}{\omega^2 - \omega_1^2} \right] c_{\vec{p}\sigma}^\dagger c_{\vec{p}'+\vec{q}\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'\sigma'} c_{\vec{p}+\vec{q}\sigma} \quad (11.20)$$

mit (vgl. Gl. (8.55))

$$V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} = \frac{V_{\vec{q}}}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \approx \frac{V_{\vec{q}}}{\varepsilon(\vec{q}, 0)}, \quad (11.21)$$

$$v_{\vec{q}}^{\text{scr}} = \frac{v_{\vec{q}}}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \approx \frac{v_{\vec{q}}}{\varepsilon(\vec{q}, 0)}, \quad (11.22)$$

$$\omega_1 = \omega_{\vec{q}} = s_{\text{ph}} q \approx \sqrt{\frac{Zm}{3M}} v_{\text{F}} q. \quad (11.23)$$

Benutzen wir noch Gl. (8.54), $|v_{\vec{q}}|^2 = V_{\vec{q}}\Omega_{\vec{q}}^2$, sowie Gl. (8.55), $\omega_{\vec{q}}^2 = \Omega_{\vec{q}}^2/\varepsilon(\vec{q}, 0)$, so können wir die beiden Terme in Gl. (11.20) kombinieren und

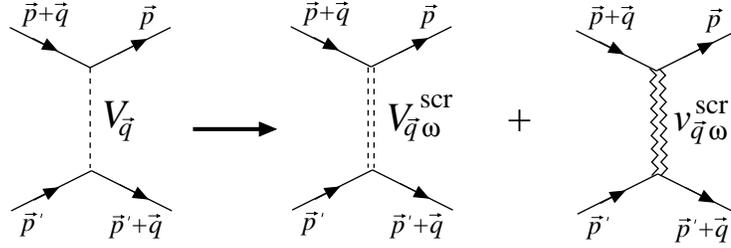


Abb. 11.2: Schliesslich tritt anstelle der einfachen Coulomb-Wechselwirkung $V_{\vec{q}}$ die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung $V_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}}$ und der elastische Hintergrund trägt eine dynamische abgeschirmte Wechselwirkung $v_{\vec{q}\omega}^{\text{scr}} = |v_{\vec{q}}^{\text{scr}}|^2 [1/(\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2)]$ bei.

erhalten (vgl. Abb. 11.2

$$V_{\vec{q}}^{\text{eff}} = V_{\vec{q}}^{\text{scr}} + \frac{v_{\vec{q}}^2}{\varepsilon^2} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2} = V_{\vec{q}}^{\text{scr}} \left(1 + \frac{\omega_{\vec{q}}^2}{\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2} \right), \quad (11.24)$$

$$\Rightarrow V_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega) = V_{\vec{q}}^{\text{scr}} \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2} \quad (11.25)$$

$$= \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda_{\text{TF}}^{-2}} \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2}. \quad (11.26)$$

$V_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega)$ variiert langsam in \vec{q} und ist damit kurzreichweitig. Durch seine ausgeprägte ω -Abhängigkeit wird V_{eff} stark zeitabhängig, d.h., ein Elektron beeinflusst andere Elektronen noch während Zeitintervallen $\Delta t \sim 1/\omega_{\vec{q}}$, in denen das fragliche Elektron bereits weit weg ist. Zudem ist Gl. (11.26) für $\omega < \omega_{\vec{q}}$ negativ, d.h. die Wechselwirkung ist attraktiv.

Wir können dies folgendermassen verstehen: Bei kleinen Frequenzen $\omega \rightarrow 0$ schirmen Elektronen und Ionen die Wechselwirkung vollständig ab. Bei endlichen Frequenzen $\omega_{\text{ph}} < \omega < \omega_{\text{p}}$ schirmen die Elektronen instantan ab, die Ionen folgen aber nur langsam. Dadurch entstehen positive Ladungsdichten im Untergrund, welche andere Elektronen anziehen, also eine attraktive Wechselwirkung erzeugen. Bei hohen Frequenzen kann der Hintergrund nicht mehr folgen und wir erhalten $V_{\vec{q}}^{\text{scr}}$ zurück, vgl. Abb. 11.3.

Es ist diese attraktive Wechselwirkung, welche innerhalb des Modells von *Bardeen-Cooper-Schrieffer* die *Supraleitung in Metallen* erzeugt. Oft benutzt man in der BCS-Beschreibung ein Modellpotential (vgl. Abb. 11.3, $\xi_{\vec{k}} =$

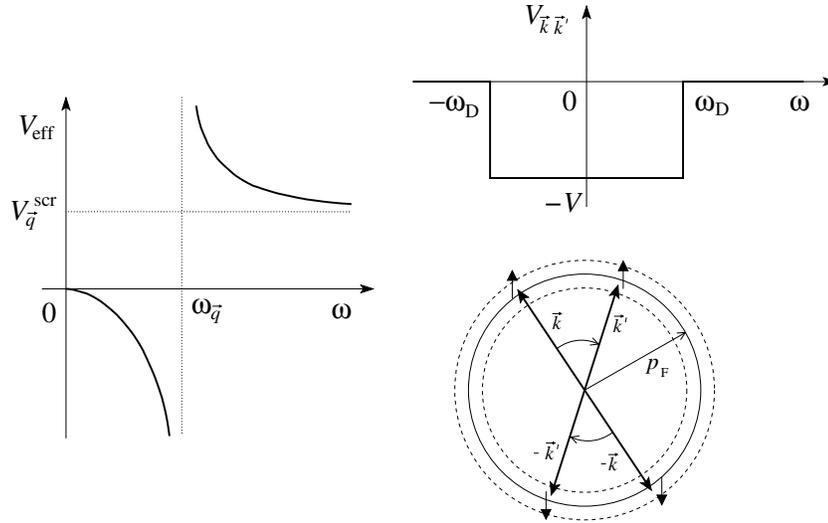


Abb. 11.3: Effektive Wechselwirkung $V_{\text{eff}}(\omega)$ (links) und BCS Modellpotential $V_{\vec{k}\vec{k}'}$, attraktiv im Bereich $\hbar\omega_D$ um ε_F herum. Das Modellpotential $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ ordnet der Streuung $\vec{k}\uparrow, \vec{k}\downarrow \rightarrow \vec{k}'\uparrow, \vec{k}'\downarrow$ die attraktive Energie $-V < 0$ zu.

$\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)$

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = \begin{cases} -V, & |\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'}| < \omega_D, \\ 0, & |\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'}| > \omega_D \end{cases}, \quad (11.27)$$

d.h., die Elektronen spüren in einer Schicht der Dicke $2\omega_D$ um ε_F herum eine attraktive Wechselwirkung.

11.2 Eine kurze Geschichte der Supraleitung

11.2.1 Experiment

Die Supraleitung wurde im Jahre 1911 durch Heike Kamerlingh Onnes entdeckt. An der Messapparatur stand allerdings sein Student, Gilles Holst; er hatte an der ETH studiert (1904-8, Elektrotechnik, dann Physik und Mathematik, Geprüfter Fachlehrer, 1908) und war temporär in Leiden, mit dem Ziel dort einige Erfahrungen für seine Dissertation in Zürich (1914, über thermodynamische Eigenschaften von Ammonia und Methylechlorid) zu machen; zuvor (1901) hat sich auch ein anderer Zürcher Student bei Onnes um

eine Assistentenstelle in Leiden beworben, Albert Einstein. Der Name von Gilles Holst erschien nicht als Autor in der Publikation; erst später hat sich Kamerlingh Onnes anerkennend über Gilles Holst's Rolle in der Entdeckung geäußert als es darum ging, den Direktorposten bei Phillips Eindhoven zu besetzen und bei seiner Ernennung zum Mitglied der Königlich Niederländischen Akademie.

Die Erforschung des Phänomens 'Supraleitung' führte zu einem spannenden Wettbewerb zwischen verschiedenen Forschungsgruppen [Dahl92]. Eine wichtige Station war die Entdeckung des *Meissner-Ochsenfeld-Effektes* (MO) in Berlin-Charlottenburg (1933). Der MO Effekt beweist, dass die supraleitende Phase ein thermodynamischer Zustand ist, in dem der spezifische Widerstand verschwindet, $\rho = 0$, und aus dem das Magnetfeld verdrängt wird, $\vec{B} = 0$.¹

11.2.2 Phänomenologische Theorien

In der Folge wurden die phänomenologischen Theorien von Gorter und Casimir (Thermodynamik) und der Gebrüder London erstellt. Aus den beiden *London-Gleichungen*,

$$\partial_t \vec{j} = \frac{ne^2}{m} \vec{E}, \quad (11.28)$$

$$\vec{j} = -\frac{ne^2}{mc} \vec{A}, \quad (11.29)$$

folgt der MO-Effekt.

Schliesslich erstellten Ginzburg und Landau im Jahre 1955 eine phänomenologische Theorie, welche das Suprafluidum als geladene, kohärente Quantenflüssigkeit (QF) beschreibt. Währenddem in der klassischen Hydrodynamik eine Flüssigkeit durch die Dichte ρ und die Geschwindigkeit \vec{v} charakterisiert ist, wird die kohärente QF durch eine komplexe Amplitude Ψ beschrieben, zu welcher die Dichte $\rho = |\Psi|^2$, und der *Suprastrom*

$$\vec{j} = -\frac{e^* \hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*) - \frac{(e^*)^2}{mc} \Psi^* \Psi \vec{A} = -e^* \rho \vec{v} \quad (11.30)$$

gehören; die (mit $-e^* < 0$) geladene Quantenflüssigkeit ist durch die Maxwellgleichungen an das elektrostatische Potential ϕ und das Vektorpotential

¹Beachte, dass die ideale Leitfähigkeit allein kein thermodynamischer Zustand ist.

\vec{A} gekoppelt. Der Paarungsmechanismus der BCS Theorie führte dann später auf den Wert $e^* = 2e$ der effektiven Ladung = Ladung eines Cooperpaares.

Die Grundidee der phänomenologischen GL Theorie ist, dass die *makroskopische Wellenfunktion* Ψ einen komplexen Ordnungsparameter definiert der das kohärente Verhalten von 10^{23} Teilchen beschreibt (statt wie üblich eines einzelnen Teilchens in der Quantenmechanik). Es verbleibt die Aufgabe, das Energiefunktional $\mathcal{F}[\Psi, \vec{A}]$ für die (klassischen, makroskopischen) Felder Ψ und \vec{A} zu finden (daraus lässt sich das klassisch-statistische Verhalten des Supraleiters bestimmen; für die quantenstatistische Beschreibung des Supraleiters brauchen wir eine entsprechende Wirkung $\mathcal{S} = \int dt [\mathcal{T} - \mathcal{F}]$; die Herleitung des dynamischen Terms \mathcal{T} ist schwierig). Das berühmte Ginzburg-Landau Funktional hat die Form

$$\mathcal{F}[\Psi, \vec{A}] = \int d^3r \left[\alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{2m} \left| \left(\vec{p} - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \Psi \right|^2 + \frac{(\vec{\nabla} \wedge \vec{A})^2}{8\pi} \right] \quad (11.31)$$

mit $\alpha(T) = \alpha_0(T - T_c)$, T_c die kritische Temperatur des Phasenüberganges. Im räumlich homogenen Fall findet man für $T < T_c$ ein nichttriviales Minimum $|\Psi_0|^2 = -\alpha/\beta > 0$ von \mathcal{F} und es existiert eine Quantenflüssigkeit endlicher Dichte, vgl. Abb. 11.4.

Die *Ginzburg-Landau-Theorie (GL)* erlaubt es, das Erscheinungsbild, insbesondere das H - T (Magnetfeld-Temperatur) Phasendiagramm, verschiedener Typen von Supraleitern im Detail zu verstehen. Z.B. ist der Typ I Supraleiter durch ein kritisches Feld $H_c(T)$ charakterisiert welches den 1. te Ordnung Phasenübergang zwischen der normal-metallischen und der supraleitenden Phase beschreibt; ebenso lassen sich die Zwischenzustände (mit normalen und supraleitenden Domänen) im Magnetfeld erklären. Für den Typ II Supraleiter findet man die kritischen Felder $H_{c1}(T)$ für die Shubnikov Phase und $H_{c2}(T)$ für den kontinuierlichen Übergang ins Normalmetall, die kritischen Ströme (j_0 für das Aufbrechen der Cooperpaare, j_c für den Übergang zum dissipativen Transport aufgrund bewegter Vortices) und die Vortices, Flussschläuche welche Flussquanten $\Phi_0 = 2 \cdot 10^{-7} \text{ Gcm}^2$ in zylindrischen Stromkonfigurationen einfangen.

11.2.3 BCS-Theorie

Um die mikroskopische Theorie der Supraleitung wurde Jahrzehnte gerungen, wobei berühmte Namen wie Felix Bloch, Lev Landau, u.a. auftauchen. Der Nebel begann sich um 1950 zu lichten mit Experimenten zum Isotopeneffekt (T_c ändert sich, wenn man für die originalen Atome ein Isotop

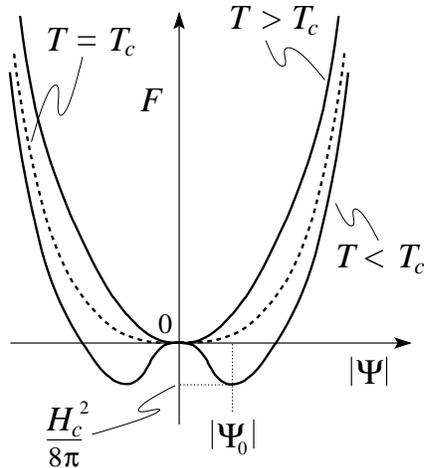


Abb. 11.4: Ginzburg-Landau-Funktional für ein räumlich homogenes Feld Ψ für $T > T_c$ (Minimum bei $|\Psi| = 0$), $T = T_c$ (breites Minimum bei $|\Psi| = 0$ welches starke Fluktuationen erlaubt), und für $T < T_c$ (Minimum bei $|\Psi_0| = \sqrt{-\alpha/\beta} > 0$ mit Kondensationsenergie $H_c^2/8\pi$).

substituiert) und der Erkenntnis (Fröhlich), dass die Supraleitung etwas mit dem Ionengitter zu tun haben muss. Ein grundlegendes Problem war, dass man den MO nur bekommen kann, wenn man die Anregungszustände am Fermi-niveau/chemischen Potential μ wegwirft – zu finden war demnach ein Gap oder zumindest ein Pseudogap. Die Einsicht von Schafroth (1951), dass die Störungstheorie in endlicher Ordnung kein Gap zu erzeugen vermag, war ein Rückschlag – das heisst nämlich, dass man das Resultat nicht systematisch erarbeiten kann, sondern in einem Wurf erfinden muss (ein neuer, nicht perturbativer Grundzustand ist gefragt). Diesen neuen Zustand haben Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) im Jahre 1956 gefunden: Die resultierende Energielücke $\Delta \sim \omega_D \exp(-1/\lambda)$ im Anregungsspektrum ist nicht-analytisch in der Elektron-Phonon-Kopplungskonstante λ . Den Auftakt zur BCS-Theorie gab Leon Cooper mit der Entdeckung der Cooperinstabilität.

11.3 Cooperinstabilität

Wir betrachten zwei Elektronen über dem gefüllten Fermisee bei $T = 0$, vgl. Abb. 11.5. Der quantenmechanische Zustand wird durch eine Paar-Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1; \vec{r}_2, \sigma_2) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \varphi(\vec{r}) \chi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (11.32)$$

beschrieben, wobei $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ die Schwerpunktskoordinate und $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ die Relativkoordinate bezeichnen. Die Antisymmetrie der Wellenfunktion

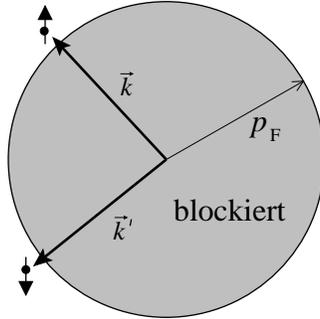


Abb. 11.5: Zwei Elektronen \vec{k} und \vec{k}' über der inerten Fermikugel; die Pauliblockade verhindert die Streuung in Zustände mit $k < p_F$.

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ verlangt, dass für eine symmetrische (antisymmetrische) Ortswellenfunktion $\varphi(\vec{r})$ der Spinanteil χ ein Singlet (Triplet) ist.

Gesucht ist der Grundzustand (trivial ist dann $\vec{q} = 0$) dieses 2-Teilchenproblems. Unsere naive Erwartung an das Spektrum involviert ein Streukontinuum von Zuständen mit positiver Energie. Bei einer attraktiven Wechselwirkung können wir für $V < V_c < 0$ einen gebundenen Zustand erwarten, denn gebundene Zustände in drei Dimensionen existieren, wenn die Attraktion gross genug ist. Die Überraschung ist dann, dass durch die Pauliblockade aller Zustände mit $k < k_F$ immer ein gebundener Zustand existiert, sogar für ein beliebig kleines attraktives V in einem endlichen Bereich (der Breite $\hbar\omega_D$) oberhalb von ε_F , vgl. Abb. 11.3 unter der Restriktion $\omega > 0$.

Ein solcher Zustand ist sicher homogen, $\vec{q} = 0$, da sonst unnötig kinetische Energie zu bezahlen ist. Ist V attraktiv und isotrop,² so ist sicher ein symmetrisches $\varphi(\vec{r})$ vorteilhaft und damit erwarten wir einen Singletzustand mit $\chi_s = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$. Ψ vereinfacht sich damit zu

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \chi_s = \sum_{\vec{k}'} a_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \chi_s. \quad (11.33)$$

Damit ist Ψ eine kohärente Superposition von Zuständen $|\vec{k}' \uparrow, -\vec{k}' \downarrow\rangle$. Setzen wir im Eigenwertproblem $H\Psi = E\Psi$ zum Hamiltonoperator $H = p^2/2m + V_{\text{int}}$ den Ansatz (11.33) ein und berechnen wir Matrixelemente mit

²Für ein anisotropes und evt. sogar repulsives Potential V kann das optimale $\varphi(\vec{r})$ auch antisymmetrisch sein.

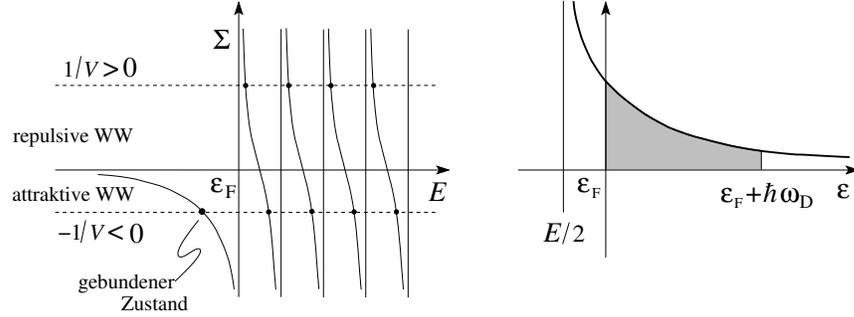


Abb. 11.6: Links: Graphische Lösung von Gl. (11.35) (Abb. aus [deG89]). Ein repulsives Potential $V > 0$ erzeugt einen kleinen positiven Shift in den Energien der Streuzustände; ein (beliebig schwaches) attraktives Potential $-V < 0$ erzeugt einen gebundenen Zustand. Rechts: Skizze zum Integral in Gl. (11.36): die Divergenz in $1/(\varepsilon - E/2)$ bei $E/2$ wird beim Fermineau ε_F abgeschnitten.

$|\vec{k}\uparrow, -\vec{k}\downarrow\rangle$, so erhalten wir das System

$$(E - 2\varepsilon_{\vec{k}}) a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}'}, \quad (11.34)$$

mit den Matrixelementen $V_{\vec{k}\vec{k}'} = \langle \vec{k}, -\vec{k} | V_{\text{int}} | \vec{k}', -\vec{k}' \rangle$, welche die Komponenten in Gl. (11.33) mischt. Die Lösung von Gl. (11.34) in dieser Allgemeinheit ist schwierig. Als einfachstes Modellpotential wählen wir $V_{\vec{k}\vec{k}'} = -V$ für $0 < (\varepsilon_{\vec{k}}, \varepsilon_{\vec{k}'}) - \varepsilon_F < \hbar\omega_D$ (vgl. Gl. (11.27)). Mit $a = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \neq 0$ erhalten wir aus Gl. (11.34) die Bedingung ($\Delta E = 2\varepsilon_F - E$)

$$-\frac{1}{V} = \sum_{k > k_F} \frac{1}{E - 2\varepsilon_{\vec{k}}} \left[= - \sum_{k > k_F} \frac{1}{2\varepsilon_{\vec{k}} + \Delta E} \right]. \quad (11.35)$$

In einer Box mit quantisierten Energien $\varepsilon_{\vec{k}}$ lässt sich die Lösung zu Gl. (11.35) graphisch wie in Abb. 11.6 finden: für ein repulsives Potential $V > 0$ werden die Einteilchenenergien $\varepsilon_{\vec{k}}$ nach oben verschoben. Für eine attraktive Wechselwirkung $-V < 0$ dagegen gibt es eine Lösung mit negativer Energie $E < 2\varepsilon_F$, die einem gebundenen Zustand entspricht.

Zur Berechnung des gebundenen Zustandes ersetzen wir (mit $N(\varepsilon_F)$ die Zustandsdichte pro Spin; $\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int N(\varepsilon) d\varepsilon \approx N(\varepsilon_F) \int d\varepsilon$; vgl. auch Abb. 11.6),

$$\frac{1}{V} = N(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E} = \frac{1}{2} N(\varepsilon_F) \ln \left(\frac{\Delta E + 2\hbar\omega_D}{\Delta E} \right), \quad (11.36)$$

$$\Delta E = 2\varepsilon_F - E = 2\hbar\omega_D e^{-2/N(\varepsilon_F)V}, \quad (11.37)$$

$$E = 2\varepsilon_F - 2\hbar\omega_D e^{-2/N(\varepsilon_F)V} < 2\varepsilon_F. \quad (11.38)$$

Das Resultat (11.38) bedeutet, dass in Anwesenheit einer beliebig schwachen, attraktiven Wechselwirkung der gefüllte Fermisee, also unser metallischer Grundzustand, instabil wird: Elektronen werden den Fermisee verlassen und sich in der Schicht der Breite $2\hbar\omega_D$ um ε_F paaren.

Am einfachsten würde man jetzt fortfahren mit dem Argument, dass diese Paare Bosonen sind und damit in einen makroskopisch besetzten Quantenzustand Ψ kondensieren, der Wellenfunktion der Quantenflüssigkeit, vgl. Abschnitt 11.2. Dass dieses Szenario zu einfach ist, erkennen wir, wenn wir die Grösse des Cooperpaares abschätzen:

$$\Psi(\vec{r}) \propto \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\xi_{\vec{k}} + \Delta E} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (11.39)$$

enthält Moden $k \sim k_F$ mit $\hbar^2 \Delta k / m \sim \Delta E$ und die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta k \Delta r = \frac{m \Delta E}{k_F \hbar^2} \Delta r \sim 1 \quad (11.40)$$

ergibt (mit $\omega_D \sim \sqrt{Zm/3M} v_F k_F$)

$$\Delta r \sim \frac{\hbar v_F}{\hbar \omega_D} e^{2/NV} \sim \underbrace{\sqrt{\frac{3M}{Zm}} e^{2/NV}}_{\gg 1} \underbrace{k_F^{-1}}_{\sim n^{-1/3}}. \quad (11.41)$$

Das heisst, im Volumen $(\Delta r)^3$ eines Paares befinden sich etwa $(3M/Zm)^{3/2} \exp(6/NV) \sim 10^{5+3}$, also (mehr als) Millionen anderer Paare (mit $NV \sim \lambda \sim 1$).

Dies wiederum muss uns mit der Besorgnis erfüllen, dass der gesuchte neue Zustand wegen der Korrelationen zwischen Millionen von Paaren schrecklich kompliziert sein wird. Insbesondere müssten wir dynamische Korrelationen zwischen den sich überlappenden Paaren erwarten, da sich dieselben offensichtlich spüren. Es stellt sich aber heraus, dass dynamische Korrelationen via attraktivem V_{int} nur für die Paarbildung relevant sind, während die Paar-Paar-Korrelationen hauptsächlich statistischer (und nicht dynamischer) Natur sind. Es genügt deshalb, nebst der Paarbildung, die Fermi-Dirac-Statistik zu berücksichtigen (automatisch in zweiter Quantisierung) um den supraleitenden Grundzustand zu finden. Im Jargon sagt man, dass

die Kondensation der Paare nicht im reellen Raum stattfindet,³ sondern im \vec{k} -Raum: Die Wahrscheinlichkeit mit \vec{k} den Zustand \vec{k}' besetzt zu haben, hat einen 'Kondensationspeak' bei $\vec{k}' = -\vec{k}$.

Unsere nächste Aufgabe ist die Bestimmung des Grundzustandes. Wir schauen uns zwei klassische Herleitungen an, via der BCS-Wellenfunktion und via der Bogoliubov-Valatin-Transformation.

11.4 BCS-Grundzustand

Statt des üblichen metallischen Grundzustandes

$$|\Psi_n\rangle = \prod_{k < k_F} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (11.42)$$

wollen wir jetzt einen neuen Grundzustand aufschreiben, welcher den Teilchen erlaubt, sich zu paaren,

$$|\Psi_s\rangle = \prod_{\vec{k}} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (11.43)$$

mit $|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1$. Im Zustand $|\Psi_s\rangle$ sind die Paare $|\vec{k}\uparrow, -\vec{k}\downarrow\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit $|v_{\vec{k}}|^2$ ($|u_{\vec{k}}|^2$) besetzt (unbesetzt). Die Paarung ist unmöglich, wenn wir $u_{\vec{k}} = \Theta(k - k_F)$ und $v_{\vec{k}} = \Theta(k_F - k)$ wählen, so dass $|\Psi_s\rangle = |\Psi_n\rangle$. Erst wenn Teilchen aus dem Fermisee abdampfen, d.h., $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ sind verschieden von 0, 1 bei k_F , dann kann (kohärente) Paarung auftreten.

Beachte, dass der Zustand $|\Psi_s\rangle$ in Gl. (11.43) eine unscharfe Teilchenzahl besitzt, sobald Supraleitung auftritt und $v_{\vec{k}}, u_{\vec{k}}$ keine Θ -Funktionen sind. Dies ist nicht ein mathematisches Handicap, sondern hat eine tiefe, physikalische Bedeutung: Der N -Teilchenanteil von $|\Psi_s\rangle$ hat eine Phase $\exp(iN\varphi)$, die Teilchenzahl N und die Phase φ sind somit konjugierte Variablen und es gilt die Heisenbergsche Unschärferelation, $\Delta\varphi\Delta N \sim 1$. Wünschen wir ein Kondensat mit wohldefinierter Phase φ , d.h. die $U(1)$ -Eichsymmetrie ist gebrochen, so muss N unscharf sein. In diesem Sinne können wir sagen, dass jedes Volumen δV in V das System $V \setminus \delta V$ als Reservoir benutzt und damit Teilchen austauscht. Damit dehnt sich die Information über die Phase auf das ganze Volumen V aus. Analog kann man sagen, dass die Paare im

³Im reellen Raum wären dynamische Korrelationen relevant oder die Paare müssten mit $\Delta r < n^{-1/3}$ lokalisiert sein (Schafroth Supraleitung)

Volumen V völlig delokalisiert sind. Beachte, dass

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle_{\Psi_s} = 4 \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^2 v_{\vec{k}}^2 \sim N \quad \Rightarrow \quad \frac{\delta N}{N} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (11.44)$$

Um den Grundzustand $|\Psi_s\rangle$ zu erhalten, müssen wir die optimalen Amplituden $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ finden. Mit dem Modell-Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \quad (11.45)$$

und unter Berücksichtigung der unscharfen Teilchenzahl (beschrieben durch das Ankoppeln an ein Reservoir mit chemischem Potential μ) gilt es, den Ausdruck $\langle \Psi_s | H - \mu N | \Psi_s \rangle$ zu minimieren, d.h.

$$0 = \delta \left\langle \Psi_s \left| \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \right| \Psi_s \right\rangle \quad (11.46)$$

$$= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}'}^* v_{\vec{k}'}. \quad (11.47)$$

Wir können $u_{\vec{k}}$ reell wählen und eine eventuelle Phase $\exp(i\varphi)$ in $v_{\vec{k}}$ inkorporieren. O.B.d.A. wählen wir für die Phase der Wellenfunktion $\varphi = 0$. Zudem können wir die Bedingung $|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1$ mit dem Ansatz $u_{\vec{k}} = \sin \theta_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}} = \cos \theta_{\vec{k}}$ erfüllen. Wir erhalten mit etwas Trigonometrie

$$\langle \dots \rangle = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} (1 + \cos(2\theta_{\vec{k}})) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sin(2\theta_{\vec{k}}) \sin(2\theta_{\vec{k}'}),$$

$$0 = \delta \langle \dots \rangle = -2\xi_{\vec{k}} \sin(2\theta_{\vec{k}}) + \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \cos(2\theta_{\vec{k}}) \sin(2\theta_{\vec{k}'}), \quad (11.48)$$

$$\Rightarrow \tan(2\theta_{\vec{k}}) = \frac{1}{2\xi_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sin(2\theta_{\vec{k}'}). \quad (11.49)$$

Indem wir die Größen

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'}, = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sin(2\theta_{\vec{k}'}), \quad (11.50)$$

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}, \quad (11.51)$$

definieren, können wir Gl. (11.49) umschreiben auf

$$\tan(2\theta_{\vec{k}}) = -\frac{\Delta_{\vec{k}}}{\xi_{\vec{k}}} \quad (11.52)$$

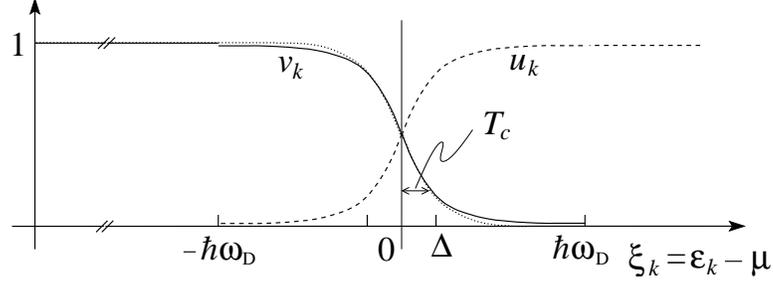


Abb. 11.7: $v_{\vec{k}}(\xi_{\vec{k}})$ (ausgezogene Linie) und $u_{\vec{k}}(\xi_{\vec{k}})$ (gestrichelte Linie) bei $T = 0$ im Vergleich mit der Fermifunktion $f(\xi_{\vec{k}}, T = T_c)$ bei der kritischen Temperatur T_c (gepunktet). Abb. aus [Tin96].

und die Winkelfunktionen ergeben sich als

$$\cos(2\theta_{\vec{k}}) = -\frac{\xi_{\vec{k}}}{\sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} = -\frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \quad [= v_{\vec{k}}^2 - u_{\vec{k}}^2], \quad (11.53)$$

$$\sin(2\theta_{\vec{k}}) = \frac{\Delta_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \quad [= 2u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}]. \quad (11.54)$$

Mit $\xi_{\vec{k}} \rightarrow \infty$ ist $\sin(2\theta_{\vec{k}}) \sim 0$, $\cos(2\theta_{\vec{k}}) \sim -1$, $\theta_{\vec{k}} \sim \pi/2$, $u_{\vec{k}} \sim 1$, $v_{\vec{k}} \sim 0$, d.h. wir erhalten mit diesen Vorzeichen das erwünschte Verhalten von $u_{\vec{k}}$, $v_{\vec{k}}$ bei hohen Energien.

Weiter erhalten wir durch Einsetzen von Gl. (11.54) in Gl. (11.52) die Selbstkonsistenzgleichung für den Gapparameter

$$\Delta_{\vec{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} \frac{V_{\vec{k}\vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}'}^2}}. \quad (11.55)$$

Diese Gleichung hat natürlich die triviale Lösung $\Delta_{\vec{k}} = 0$, $E_{\vec{k}} = \xi_{\vec{k}}$, $\theta_{\vec{k}} = (\pi/2) \Theta(k - k_F)$, welche gerade $|\Psi_n\rangle$ erzeugt.

Eine Lösung $\Delta_{\vec{k}} \neq 0$ finden wir leicht für unsere Modellwechselwirkung

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = \begin{cases} -V, & |\xi_{\vec{k}}|, |\xi_{\vec{k}'}| < \hbar\omega_D, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (11.56)$$

Wir setzen an,

$$\Delta_{\vec{k}} = \begin{cases} \Delta, & |\xi_{\vec{k}}| < \hbar\omega_D, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (11.57)$$

und erhalten nach Division durch Δ die Bedingung (vgl. Gl. (11.35))

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}} \quad (11.58)$$

$$\sim \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\xi_{\vec{k}} + \Delta E/2}. \quad (11.59)$$

Die übliche Integration liefert ($\int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} = 2 \int_0^{\hbar\omega_D}$)

$$\frac{1}{N(\varepsilon_F)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} = \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right), \quad (11.60)$$

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh(1/NV)} \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/N(\varepsilon_F)V}. \quad (11.61)$$

Die Kohärenzfaktoren haben die Form

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right), \quad v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right), \quad (11.62)$$

mit $E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}$, d.h., im Bereich Δ um ε_F herum dampfen die Elektronen aus dem metallischen Fermisee ab, um sich zu paaren. Tatsächlich zeigt die Berechnung der *Kondensationsenergie*

$$\begin{aligned} \langle \Psi_s | H - \mu N | \Psi_s \rangle - \langle \Psi_n | H - \mu N | \Psi_n \rangle &= -\frac{1}{2} N(\varepsilon_F) \Delta^2 \quad (11.63) \\ &\sim \underbrace{N(\varepsilon_F) \Delta}_{\# \text{ Paare}} \underbrace{\Delta}_{\text{Gewinn/Paar}}, \end{aligned}$$

dass der supraleitende Zustand stabil ist.

Weiter bemerken wir, dass die Superposition von \vec{k} -Zuständen im Bereich Δ um ε_F herum wegen der Heisenbergschen Unschärferelation $\xi \Delta k \sim 1$ und $\Delta k = \partial_E k \Delta \sim m \Delta / \hbar^2 k_F$ die Ausdehnung $\xi \sim \hbar v_F / \Delta$ der Paarwellenfunktion ergibt. Genauer bestimmt die *BCS-Kohärenzlänge*

$$\xi_{\text{BCS}} = \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta} \quad (11.64)$$

die Distanz, über welche sich eine Störung im Quantenfluidum ausweitet (bei $T = 0$; dies ist auch gerade die Ausdehnung eines Paares). Beachte auch, dass $v_{\vec{k}}$ aussieht wie eine Fermifunktion bei $T \approx \Delta$,

$$v_{\vec{k}}(\xi_{\vec{k}}) \approx f(T = \Delta, \xi_{\vec{k}}). \quad (11.65)$$

Demzufolge erwarten wir, dass eine Temperatur $T > T_c \sim \Delta$ den supraleitenden Zustand durch Aufspalten der Paare zerstört.

Als nächstes repetieren wir die Herleitung des supraleitenden Grundzustandes durch die kanonische Bogoliubov-Valatin-Transformation. Wir erhalten zusätzlich das Anregungsspektrum und können die Temperaturabhängigkeit des Gaps, $\Delta(T)$, und damit die Übergangstemperatur T_c durch $\Delta(T_c) = 0$ finden.

11.5 Bogoliubov-Valatin-Transformation

Wir starten mit dem Modellhamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow}. \quad (11.66)$$

Wie üblich macht uns der Wechselwirkungs- oder 4-Punkt-Term Probleme. Wir wissen, dass das System bei tiefen Temperaturen in einen neuen Zustand übergeht, wo die Zustände $|\vec{k}\uparrow\rangle$ und $|\vec{k}\downarrow\rangle$ kohärent und makroskopisch besetzt sind. Dies bringt uns auf die Idee, die Operatoren $c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}$ durch ein klassisches komplexes Feld $b_{\vec{k}}$ zu approximieren,

$$\begin{aligned} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} &= \langle c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \rangle + (c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} - \langle c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \rangle) \\ &= b_{\vec{k}} + (c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} - b_{\vec{k}}), \end{aligned} \quad (11.67)$$

$$c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = b_{\vec{k}}^* + (c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - b_{\vec{k}}^*), \quad (11.68)$$

mit dem Molekularfeld $b_{\vec{k}} = \langle c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \rangle \in \mathbb{C}$ und den (hoffentlich kleinen) Fluktuationen um das Molekularfeld (zweiter Term).

Das Einsetzen von Gl. (11.67) und das Vernachlässigen von Termen quadratisch in den Fluktuationen ergibt

$$H - \mu N \approx \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} (c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger b_{\vec{k}'} + b_{\vec{k}}^* c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} - b_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}'}). \quad (11.69)$$

Die Reduktion von Gl. (11.66) zu (11.69) ist Teil eines allgemeinen Konzeptes: Betrachte einen Hamiltonoperator $H = H_0 + V$ mit $V \sim \sum V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta$ oder $V \sim \sum c_\alpha^\dagger c_\beta Q_\gamma$ mit z.B. einem Phononen-Feld Q_γ . Ist die Wechselwirkung effizient genug, so vermag sie Phasenübergänge im Festkörper zu induzieren. Die neue Phase ist charakterisiert durch eine neue Ordnung, quantifiziert durch ein Molekularfeld $b = \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle$ bzw., $b = \langle Q_\gamma \rangle$.

Im Prinzip können wir uns jetzt jeden Typ Ordnung ausdenken und schauen, ob diese bei tiefen Temperaturen realisiert wird. Dazu setzen wir der Reihe nach unsere Ansätze für das Molekularfeld b in H ein und berechnen die neue Energie des Systems; der geordnete Zustand mit der tiefsten Energie gewinnt. Wie bekommen wir solch eine Energieabsenkung?

- Falls V attraktiv ist, können wir E durch Bindungen erniedrigen.
- Falls V repulsiv ist, wir aber mit cleveren Phasenbeziehungen ein Minuszeichen (kohärent) bekommen können, erhalten wir wieder eine Energieerniedrigung (dieser Mechanismus spielt in der unkonventionellen Supraleitung).
- Wir müssen möglichst viele Elektronen dazu bringen, diese Energiegewinne zu realisieren. Die BCS Instabilität tut dies besonders effizient indem die gesamte Fermifläche genutzt werden (solange die Zeitumkehrinvarianz \vec{k} und $-\vec{k}$ äquivalent macht). Ein alternatives Beispiel für das Auftreten von Instabilitäten findet man im Zusammenhang mit Spin- und Ladungsdichtewellen. In diesem Fall verbindet der Streuprozess V gegenüberliegende Teile der Fermifläche und involviert anstelle von Impulsen ~ 0 (Cooperproblem) Impulse \vec{Q} mit $Q \sim 2p_F$, vgl. Abb. 11.8. Bei einer generischen Fermifläche können allerdings nur wenige Elektronen an diesen Streuprozessen teilnehmen. Eine Instabilität bei endlichem \vec{Q} kann auftreten, wenn ‘parallele Stücke’ der Fermifläche durch einen Streuvektor verbunden werden; man spricht von *Fermi-Surface-Nesting*. Derartige Nesting-Eigenschaften von Fermiflächen treten in den Dimensionen $D = 1, 2$ stärker auf als in $D = 3$. Insbesondere die quasi-2D-CuO₂-basierten Hoch- T_c -Supraleiter (dotierte Mott-Isolatoren) mit ihrer anti-ferromagnetischen Ordnung in der Nähe von halber Bandfüllung besitzen solche Nestingeigenschaften. Dotiert man diese Materialien weg von halber Füllung so geht das Nesting verloren und die anti-ferromagnetische Instabilität macht der Supraleitung Platz.

Wir schreiben nun Gl. (11.69) um, indem wir den Gap-Parameter

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle \quad (11.70)$$

einführen,

$$H - \mu N \approx \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} - \sum_{\vec{k}} [\Delta_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\vec{k}}^* c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} - \Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^*]. \quad (11.71)$$

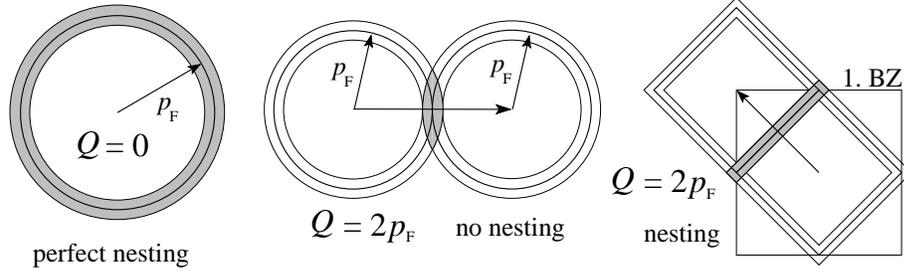


Abb. 11.8: In der BCS Instabilität ist der Impulsübertrag $\vec{Q} \approx 0$ und die ganze Fermifläche nimmt an der Streuung teil (links, ‘perfect nesting’). Für eine isotrope Fermifläche und Impulsübertrag $2p_F$ ist das ‘nesting’ minimal (Mitte). Für eine (quasi-) 2-dimensionale quadratische Kristallstruktur mit halb gefülltem Band ist der Vektor der Länge $2p_F$ entlang der Brillouinzone-Diagonale ein ‘Nestingvektor’ (rechts).

Wir diagonalisieren diesen Ausdruck durch die BV-Transformation (vgl. Gl. (4.19) und (4.20))

$$c_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}}^* \alpha_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger, \quad (11.72)$$

$$c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = -v_{\vec{k}}^* \alpha_{\vec{k}\uparrow} + u_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger, \quad (11.73)$$

$$\alpha_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger, \quad (11.74)$$

$$\alpha_{-\vec{k}\downarrow} = v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger + u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}. \quad (11.75)$$

Mit $|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1$ erfüllen die neuen Operatoren die Fermi-Vertauschungsrelationen.⁴ Die Operatoren $\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger$ und $\alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger$ erzeugen Quasiteilchen mit festem Impuls und Spin, $\vec{k}\uparrow$, und, $-\vec{k}\downarrow$. Das Einsetzen von Gl. (11.72) und (11.73) in Gl. (11.71) liefert

$$\begin{aligned} H - \mu N \approx & \quad (11.76) \\ & \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left\{ (u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2) (\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}) \right. \\ & \quad \left. + 2u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}^* \alpha_{-\vec{k}\downarrow} \alpha_{\vec{k}\uparrow} + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + 2v_{\vec{k}}^2 \right\} \\ & + \sum_{\vec{k}} \left\{ (\Delta_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^* + \Delta_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}) (\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}) - 1 \right\} \end{aligned}$$

⁴Wir könnten o.B.d.A. $u_{\vec{k}}$, $v_{\vec{k}}$, $\Delta_{\vec{k}}$ reell wählen, d.h. die Phase des Supraleiters als 0.

$$+(\Delta_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^{*2} - \Delta_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}}^{*2}) \alpha_{-\vec{k}\downarrow} \alpha_{\vec{k}\uparrow} + (\Delta_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}^2 - \Delta_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^2) \alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^* \}. \quad (11.76)$$

Wir diagonalisieren diesen Operator, indem wir die Koeffizienten der nicht-diagonalen Terme $\alpha_{-\vec{k}\downarrow} \alpha_{\vec{k}\uparrow}$ und $\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger$ durch geschickte Wahl der Amplituden $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ zum Verschwinden bringen,

$$\begin{aligned} (2\xi_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}^* + \Delta_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^{*2} - \Delta_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}}^{*2}) \alpha_{-\vec{k}\downarrow} \alpha_{\vec{k}\uparrow} &= 0, \\ \frac{\Delta_{\vec{k}}^*}{u_{\vec{k}}^2} (2\xi_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}^2 - \Delta_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^2) \alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger &= 0, \\ \Rightarrow \left(\frac{\Delta_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}}{u_{\vec{k}}} \right)^2 + 2\xi_{\vec{k}} \left(\frac{\Delta_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}}{u_{\vec{k}}} \right) - |\Delta_{\vec{k}}|^2 &= 0, \end{aligned} \quad (11.77)$$

$$\Rightarrow x = \frac{\Delta_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}}{u_{\vec{k}}} = -\xi_{\vec{k}} \pm \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} = E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}}. \quad (11.78)$$

Mit $|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1$ und $|v_{\vec{k}}/u_{\vec{k}}| = (E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}})/|\Delta_{\vec{k}}|$ erhalten wir

$$|v_{\vec{k}}|^2 = 1 - |u_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right) \quad (11.79)$$

und die Phase φ zwischen $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ ergibt sich gerade aus derjenigen von $\Delta_{\vec{k}}^* = |\Delta_{\vec{k}}| e^{-i\varphi} = \text{const.} u_{\vec{k}}^*/v_{\vec{k}}$, also $v_{\vec{k}} \propto e^{i\varphi}$, $u_{\vec{k}}$ reell, $\Delta_{\vec{k}} \propto e^{i\varphi}$

Die verbleibenden Terme in Gl. (11.76) ergeben dann

$$H - \mu N = \sum_{\vec{k}} (\xi_{\vec{k}} - E_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^*) + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}), \quad (11.80)$$

wobei der erste Term die Kondensationsenergie und der zweite die Anregungen über dem Grundzustand beschreibt.

Mit Gln. (11.72) – (11.75) und (11.80) haben wir eine Darstellung des Supraleiters in zweiter Quantisierung: Der Grundzustand ist $|\Psi_s\rangle$ und definiert ein neues nichttriviales ‘Vakuum’ für die neuen Operatoren $\alpha_{\vec{k}\uparrow}$ und $\alpha_{-\vec{k}\downarrow}$, $\alpha_{\vec{k}\uparrow} |\Psi_s\rangle = 0 = \alpha_{-\vec{k}\downarrow} |\Psi_s\rangle$; die Anregungen werden beschrieben durch

$$H_s = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}) \quad (11.81)$$

mit dem Spektrum $E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}$, vgl. Abb. 11.9.

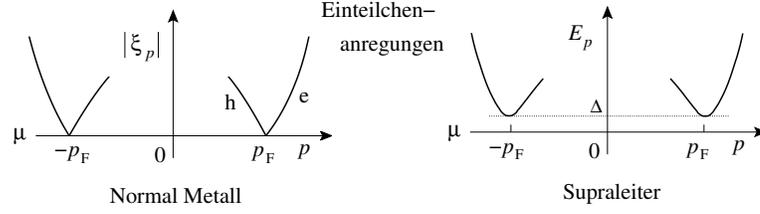


Abb. 11.9: Einteilchen Anregungen im Normalmetall (links) und im Supraleiter (rechts).

Analog dazu ist der Grundzustand des Metalls gegeben durch $|\Psi_n\rangle$ mit $\alpha_{\vec{k}\uparrow}|\Psi_n\rangle = 0 = \alpha_{-\vec{k}\downarrow}|\Psi_n\rangle$ und Anregungen beschrieben durch

$$H_n = \sum_{\vec{k}} |\xi_{\vec{k}}| (\alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow}) \quad (11.82)$$

mit dem Spektrum $|\xi_{\vec{k}}|$.

Das Gap $\Delta_{\vec{k}}$ ergibt sich aus der Lösung der Selbstkonsistenzgleichung, welche wir durch Einsetzen von Gl. (11.72)–(11.75) in Gl. (11.70) erhalten,

$$\begin{aligned} \Delta_{\vec{k}} &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle \\ &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'}^* v_{\vec{k}'} \langle 1 - \alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{k}\uparrow} - \alpha_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{k}\downarrow} \rangle, \\ &= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'}^* v_{\vec{k}'}. \end{aligned} \quad (11.83)$$

Die Lösung dieser Gleichung gibt unter Berücksichtigung der Gl. (11.79) die Energielücke

$$\Delta = 2\hbar\omega_D e^{-1/NV} \quad (11.84)$$

für unser Modellpotential $V_{\vec{k}\vec{k}'} = -V$ in einer Schale der Dicke $2\hbar\omega_D$ um ε_F (vgl. mit der Herleitung von (11.61)).

Gl. (11.83) erlaubt es uns, einen Schritt weiter zu gehen und die Temperaturabhängigkeit von $\Delta(T)$ zu berechnen. Da die Anregungen zu den α -Operatoren freie fermionische Quasiteilchen sind, können wir sofort die Gapgleichung in der Form

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'}^* v_{\vec{k}'} [1 - 2f(E_{\vec{k}'})] \quad (11.85)$$

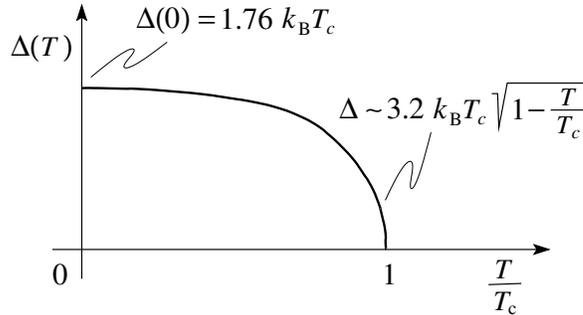


Abb. 11.10: Temperaturabhängigkeit der Energielücke (Gap) $\Delta(T)$. Abb. aus [deG89].

$$= - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}'}} \tanh(\beta E_{\vec{k}'}/2) \quad (11.86)$$

aufschreiben. Für unser Modellpotential reduziert sich diese Gleichung auf

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh(\beta E_{\vec{k}}/2)}{E_{\vec{k}}}. \quad (11.87)$$

Um T_c zu finden, benutzen wir $\Delta(T_c) = 0$, so dass sich Gl. (11.87) vereinfacht zu ($C \approx 0.5772$, die Euler-Konstante)

$$\frac{1}{N(\varepsilon_F) V} = \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2T_c}} dx \frac{\tanh x}{x} = \ln\left(\frac{2e^C}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{T_c}\right), \quad (11.88)$$

$$\Rightarrow T_c = \frac{2e^C}{\pi} \hbar\omega_D \exp[-1/N(\varepsilon_F)V] = \frac{e^C}{\pi} \Delta(0), \quad (11.89)$$

$$\Rightarrow \frac{2\Delta(0)}{T_c} = \frac{2\pi}{e^C} \approx 3.528. \quad (11.90)$$

Die volle T -Abhängigkeit findet man leicht durch numerische Integration, vgl. Abb. 11.10,

$$\Delta(T) \approx \Delta(0) \begin{cases} 1 - \sqrt{\frac{2\pi T}{\Delta(0)}} e^{-(\Delta(0)/T)}, & T \rightarrow 0, \\ 1.74 \sqrt{1 - T/T_c}, & T \rightarrow T_c. \end{cases} \quad (11.91)$$

- Bei $T \rightarrow 0$ ist die Quasiteilchenanregung exponentiell unterdrückt, d.h. $\delta\Delta = \Delta(0) - \Delta(T) \sim e^{-\Delta/T}$.
- Bei $T \rightarrow T_c$ ist wegen $n\xi_0^3 \gg 1$ die Molekularfeldtheorie sehr gut, es gibt wenig Fluktuationen, die Ginzburgzahl $Gi \sim 10^{-8}$ (Ausnahme: Hoch- T_c -Supraleiter $Gi \sim 10^{-2}$).

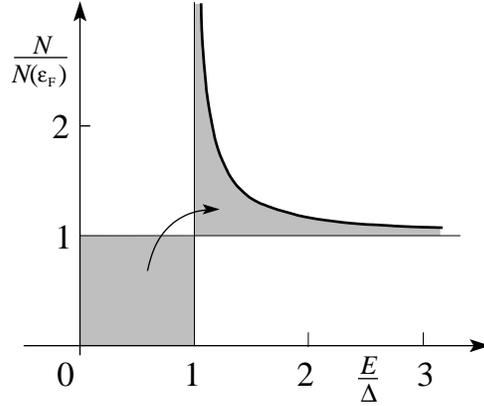


Abb. 11.11: Zustandsdichte $N(E)$ im Supraleiter. Das Gewicht bei Energien $E < \Delta$ wird in den Zustandspeak bei $E \sim \Delta$ angehoben. Abb. aus [Tin96].

Schliesslich berechnen wir noch die *Zustandsdichte* $N_s(E)$: mit $N_s(E)dE = N_n(\xi)d\xi \approx N_n(0)d\xi = N(\varepsilon_F)d\varepsilon$ finden wir

$$N_s(E) = N(\varepsilon_F) \frac{d\xi}{dE} = \begin{cases} \frac{E}{(E^2 - \Delta^2)^{\frac{1}{2}}}, & E > \Delta, \\ 0, & E < \Delta. \end{cases} \quad (11.92)$$

Die Zustände werden also im Bereich Δ um μ herum wegen der Paarung ‘weggedrückt’ und sammeln sich bei der Energie Δ , vgl. Abb. 11.11.

11.5.1 Thermodynamik

Ausgehend von obiger Grundlage können wir nun eine ganze Reihe interessanter Phänomene diskutieren: In der Thermodynamik finden wir für die spezifische Wärme der Elektronen (vgl. Abb. 11.12):

$$C_v|_n = \gamma T, \quad (11.93)$$

$$C_v|_s \propto e^{-\Delta(0)/T}, \quad T \rightarrow 0, \quad (11.94)$$

$$\frac{\Delta C_v}{C_v|_n} = \frac{C_v|_s - C_v|_n}{C_v|_n} \approx 1.43, \quad T \sim T_c. \quad (11.95)$$

Bei unkonventionellen Supraleitern mit Nullstellen im Gap wird $C_v(T \rightarrow 0)$ algebraisch:

- 0D-Nullstellen (Punkte): $C_v \sim T^3$,

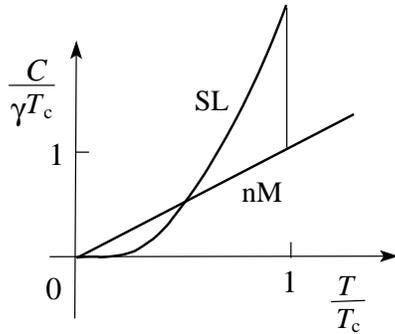


Abb. 11.12: Spezifische Wärme $C(T)$ im Supra- und Normalleiter. Am supraleitenden Phasenübergang (2. Ordnung) springt C_v um $\Delta C_v/C_v|_{nM} \approx 1.43$. Abb. aus [deG89].

- 1D-Nullstellen (Linien): $C_v \sim T^2$,
- 2D-Nullstellen (Flächen): $C_v \sim T$.

Die innere Energie U , Entropie S und freie Energie F folgen den üblichen Gesetzmäßigkeiten eines Phasenüberganges zweiter Ordnung, vgl. Abb. 11.13.

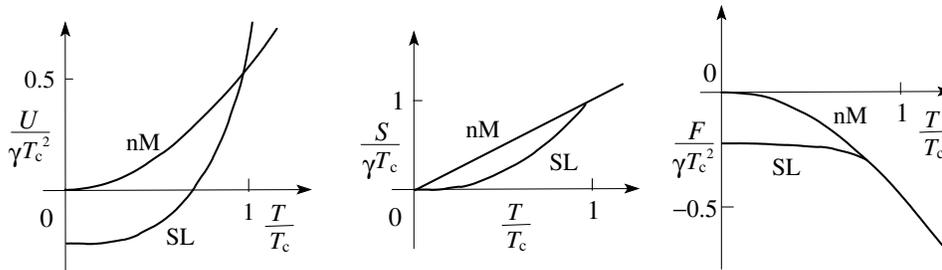


Abb. 11.13: Innere Energie $U(T)$, Entropie $S(T)$ und freie Energie $F(T)$ am supraleitenden Phasenübergang (2. Ordnung). Die inneren Energien U und die Entropien S kreuzen sich bei T_c , die freien Energien F gehen kontinuierlich ineinander über. Die freie Energie erniedrigt sich um die Kondensationsenergie $H_c^2/8\pi$. Abb. aus [Tin96].

11.5.2 Isotopeneffekt

Die kritische Temperatur T_c eines Supraleiters, dessen Paarbildung auf Elektron-Phonon-Kopplung beruht, hat eine charakteristische Abhängigkeit

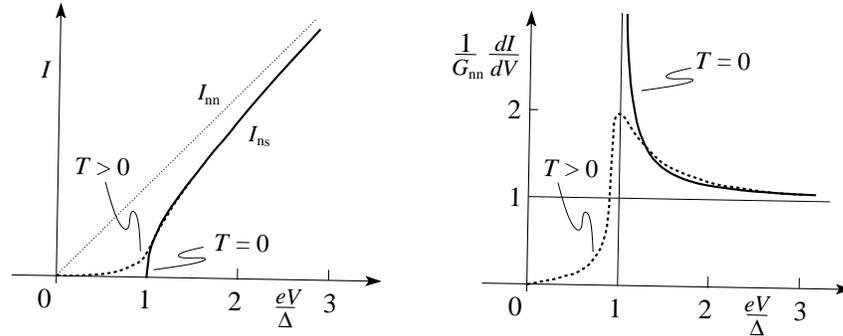


Abb. 11.14: $I(V)$ -Charakteristik und differentielle Leitfähigkeit $\partial_v I$ eines Kontaktes zwischen Normal- und Supraleiter. Abb. aus [Tin96].

von der Masse M der Ionen, die durch Substitution verschiedener Isotopen experimentell nachgewiesen werden kann. Im einfachsten Modell schwacher Kopplung ('weak-coupling limit') ergibt sich

$$T_c \propto \omega_D \propto \sqrt{\frac{f}{M}} \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{d \ln T_c}{d \ln M} = \frac{1}{2}; \quad (11.96)$$

für starke Elektron-Phonon-Kopplung kann $\alpha < 1/2$ sein und sogar $\alpha < 0$.

11.5.3 Tunneleffekt

In einem Tunnelexperiment an einem Normalmetall-Supraleiter Kontakt kann das Anregungsspektrum direkt ausgemessen werden. In der Tat ist $N_s(E) \sim \partial_v I$ und die Bestimmung von $I(V)$ liefert den Wert der Energielücke Δ (Giaver 1962), vgl. Abb. 11.14. Besonders interessante Effekte treten in NS-, SS'-, SIS-, SNS-Strukturen auf (S^(') = Supraleiter, N = Normalleiter, I = Isolator). Insbesondere kann man im Bereich $eV/\Delta > 1$ die Phononen als Resonanzen sehen, was eine selbstkonsistente Prüfung der Theorie erlaubt (McMillan 1965).

11.5.4 Ultraschall und NMR

Typische Ultraschallfrequenzen liegen im Bereich $\omega_{\text{US}} < 10^9 \text{ s}^{-1} < \Delta(0)/\hbar$. Ultraschall wird durch freie Quasiteilchen gestreut, deren Dichte im Supraleiter für $T \rightarrow 0$ verschwindet. Für seine Dämpfung α findet man in einem

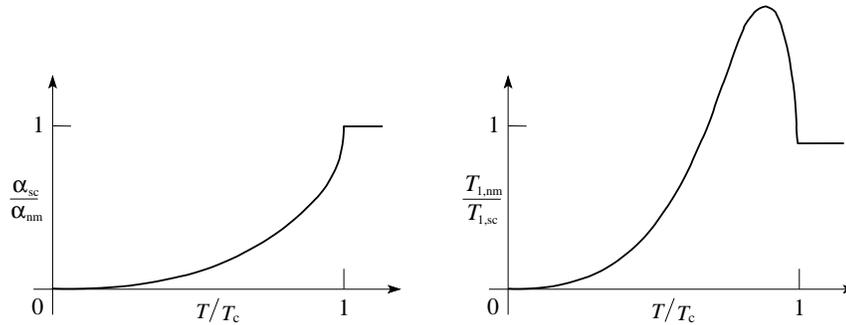


Abb. 11.15: Dämpfung α des Ultraschalls (links) und Relaxationsrate $1/T_1$ der Kernspins (rechts) im Supraleiter. Mit dem Verschwinden der thermisch angeregten normalen Quasiteilchen für $T \rightarrow 0$ fällt die Dämpfung exponentiell auf 0. Die in Singlets abgepaarten Elektronenspins tragen nicht mehr zur Spinrelaxation der Kerne bei. Der Hebel-Slichter Peak in $1/T_1$ resultiert aus einer speziellen Kombination von Kohärenzfaktoren.

Supraleiter mit isotropem Gap Δ (vgl. Abb. 11.15)

$$\frac{\alpha_{\text{sc}}}{\alpha_{\text{nm}}} = \frac{2}{1 + e^{\Delta/T}} \quad (11.97)$$

Wiederum führen Punkt- und Linien-Knoten in $\Delta_{\vec{k}}$ zu algebraischem Verhalten für $T \rightarrow 0$.

Bei der Kernspinrelaxation wird der Kernspin durch Streuung mit elektronischen Spins verändert. Wenn sich die Elektronenspins in den Cooper-Paaren abpaaren, können sie nicht mehr zur Relaxation der Kernspins beitragen; die Relaxationsrate $1/T_1$ geht deshalb, für einen konventionellen isotropen Supraleiter, exponentiell auf 0. Interessant ist, dass in der Ultraschallabsorption der Koeffizient α bei T_c ‘abstürzt’, während in der NMR die Rate $1/T_1$ ansteigt (Hebel-Slichter Peak), eine Konsequenz verschiedener Produktkombinationen (skalar versus vektoriell) der Kohärenzfaktoren $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$.

11.5.5 Elektromagnetische Absorption

Die Energielücke des Supraleiters manifestiert sich im Verschwinden der Absorption (beschrieben durch den Realteil $\sigma'(\omega)$ der dynamischen Leitfähigkeit) im Frequenzbereich $\omega < \Delta/\hbar$, vgl. Abb. 11.16. Die fehlende Oszilla-

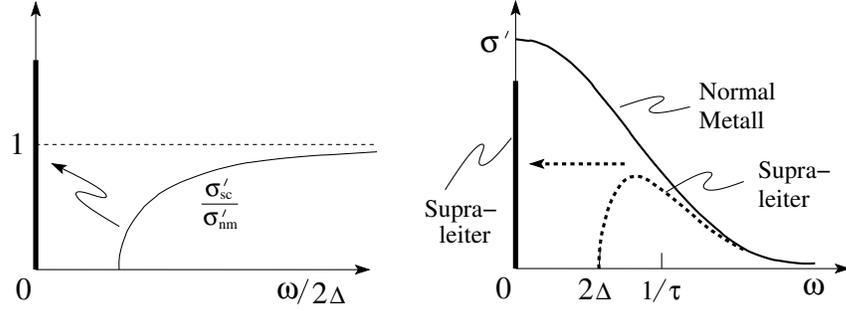


Abb. 11.16: Der Realteil der dynamischen Leitfähigkeit $\sigma'(\omega)$ verschwindet im Gapbereich $\omega < \Delta/\hbar$. Die fehlende Oszillatorstärke kondensiert in einem δ -Peak bei $\omega = 0$ mit Gewicht $n_s/n \approx \min[2\Delta\tau/\hbar, 1]$.

torstärke wird in den δ -Peak bei $\omega = 0$ verschoben (Mattis-Bardeen): Im supraleitenden Zustand findet sich in $\sigma(\omega)$ eine δ -Funktion bei $\omega = 0$ mit dem relativen Gewicht n_s/n , wobei für saubere Materialien mit $\hbar/\tau < 2\Delta \leftrightarrow \xi_0 < v_F\tau = l$ die gesamte Dichte $n_s = n$ kondensiert und für $2\Delta < \hbar/\tau \leftrightarrow \xi_0 > l$ nur der Anteil im σ' -Drude-Peak mit $\hbar\omega < 2\Delta$.

11.6 Meissner-Ochsenfeld-Effekt

Das Phänomen, welches wir im letzten Abschnitt im Detail verstehen wollen, ist der Meissner-Ochsenfeld-Effekt: im Supraleiter werden Ströme und Magnetfelder (insbesondere auch das \vec{A} -Feld) abgeschirmt; der Supraleiter produziert eine transversale Abschirmung (Masse), siehe dazu auch die Diskussion im Kapitel 10.

Die Antwort des System auf ein transversales \vec{A} -Feld ($\vec{q} \cdot \vec{A} = 0$) lässt sich aus dem üblichen Schema erhalten,

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{c} \sum_{\vec{q}} \vec{J}_{-\vec{q}} \cdot \vec{A}_{\vec{q}} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (11.98)$$

$$\vec{J}_{\vec{q}} = \frac{1}{2m} \sum_i [\vec{p}_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} + e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \vec{p}_i], \quad (11.99)$$

$$= \frac{1}{m} \sum_{\vec{p}\sigma} (\vec{p} + \vec{q}/2) c_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}. \quad (11.100)$$

Der gesuchte Strom setzt sich aus para- und diamagnetischen Anteilen zusammen:

$$\langle \vec{j} \rangle = \frac{e}{2} \sum_i [\vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{v}_i], \quad (11.101)$$

$$\vec{v}_i = \underbrace{\vec{p}_i}_{\text{para}} - \underbrace{(e/c) \vec{A}(\vec{r}_i)}_{\text{dia}}, \quad (11.102)$$

$$\langle \vec{j}_{\vec{q}} \rangle = e \langle \vec{J}_{\vec{q}} \rangle - \frac{e^2}{mc} \sum_{\vec{k}} \rho_{\vec{q}-\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}} \quad (11.103)$$

$$= e \langle \vec{J}_{\vec{q}} \rangle - \frac{e^2 n}{mc} \vec{A}_{\vec{q}}. \quad (11.104)$$

Dabei haben wir nur die führende Ordnung in \vec{A} berücksichtigt, insbesondere in der Berechnung des diamagnetischen Terms. Die transversale Antwortfunktion ist definiert via

$$\langle \vec{J}_{\vec{q}} \rangle = -(e/c) \chi_{\perp}(\vec{q}) \vec{A}_{\vec{q}}. \quad (11.105)$$

Die Aufgabe besteht darin, $\chi_{\perp}(\vec{q})$ via die Berechnung von $\langle \vec{J}_{\vec{q}} \rangle$, dem Parastrom, zu finden und zu zeigen, dass der Parastrom den Diastrom nicht aufhebt (genau dies geschieht im Normalmetall). Können wir zeigen, dass $\chi_{\perp} = -n_n/m \neq -n/m$ ist, so erhalten wir das Resultat

$$\vec{j}_{\vec{q}} = -\frac{e^2}{mc} (-n_n + n) \vec{A}_{\vec{q}} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \vec{A}_{\vec{q}} \quad (11.106)$$

und daraus den Meissner-Ochsenfeld-Effekt.⁵ Im reellen Raum gilt dann

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\frac{e^2 n_s}{mc} \vec{A}(\vec{r}), \quad (11.107)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{j} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \vec{B} \quad (11.108)$$

und mit der Maxwellgleichung, $\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = (4\pi/c) \vec{j}$, folgt

$$\vec{\nabla} \wedge (\vec{\nabla} \wedge \vec{B}) = -\Delta \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{\nabla} \wedge \vec{j} = -\frac{4\pi n_s e^2}{mc^2} \vec{B}, \quad (11.109)$$

$$\Rightarrow [\Delta - \lambda_L^{-2}] \vec{B} = 0. \quad (11.110)$$

⁵Wir vereinfachen das Problem etwas und benutzen $\vec{j}_{\vec{q}} = -(e^2 n_s/mc) \vec{A}_{\vec{q}}$ für alle \vec{q} .

Am Rande eines Supraleiters wird demnach das äussere magnetische Feld auf der Länge λ_L abgeschirmt,

$$B_z(x) = B_z(0)e^{-x/\lambda_L}, \quad (11.111)$$

vgl. Abb. 10.1.

Zur Berechnung von $\langle \vec{J}_{\vec{q}} \rangle$ schreiben wir Gl. (11.100) auf $\alpha_{\vec{k}\sigma}$ -Operatoren um ($u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ reell)

$$\vec{J}_{\vec{q}} = \frac{1}{m} \sum_{\vec{p}} (\vec{p} + \vec{q}/2) (c_{\vec{p}\uparrow}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}\uparrow} + c_{\vec{p}\downarrow}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}\downarrow}) \quad (11.112)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{m} \sum_{\vec{p}} (\vec{p} + \vec{q}/2) [(u_{\vec{p}} u_{\vec{p}+\vec{q}} + v_{\vec{p}} v_{\vec{p}+\vec{q}}) (\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}+\vec{q}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}-\vec{q}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}) \\ &\quad + (u_{\vec{p}} v_{\vec{p}+\vec{q}} - u_{\vec{p}+\vec{q}} v_{\vec{p}}) (\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}-\vec{q}\uparrow} - \alpha_{\vec{p}+\vec{q}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow})]. \end{aligned} \quad (11.113)$$

Im Limes $\vec{q} \rightarrow 0$ vereinfacht sich $\vec{J}_{\vec{q}}$ zu

$$\vec{J}_{\vec{q} \rightarrow 0} = \frac{1}{m} \sum_{\vec{p}} \vec{p} (\alpha_{\vec{p}\uparrow}^\dagger \alpha_{\vec{p}\uparrow} - \alpha_{-\vec{p}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\vec{p}\downarrow}). \quad (11.114)$$

Der Erwartungswert $\langle \vec{J}_{\vec{q}} \rangle$ ergibt sich aus dem Fermion-Charakter der $\alpha_{\vec{k}\sigma}$ -Operatoren,

$$\langle \vec{J}_{\vec{q} \rightarrow 0} \rangle = \frac{1}{m} \sum_{\vec{p}} \vec{p} [f(E_{\vec{p}}) - f(E_{-\vec{p}})]. \quad (11.115)$$

Im Feld \vec{A} werden die Niveaus $E_{\vec{p}}$ und $E_{-\vec{p}}$ der Quasiteilchen unterschiedlich verschoben, vgl. Abb. 11.17. Aus Gl. (11.100) ergibt sich

$$E_{\pm\vec{p}}^{\vec{A}} = E_{\pm\vec{p}}^0 \mp \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A} \quad (11.116)$$

und damit erhalten wir

$$\begin{aligned} e \langle \vec{J}_{\vec{q} \rightarrow 0} \rangle &= \frac{e}{m} \sum_{\vec{p}} \vec{p} \frac{\partial f}{\partial E} \left(-\frac{2e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}_{\vec{q} \rightarrow 0} \right) \\ &= \frac{2e^2}{m^2 c} \sum_{\vec{p}} \vec{p} \cdot (\vec{p} \cdot \vec{A}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \\ &= \frac{2}{3} \frac{e^2 p_F^2}{m^2 c} N(\varepsilon_F) 2 \int_{\Delta}^{\infty} dE \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \vec{A} \\ &= \frac{2e^2 n}{mc} \int_{\Delta}^{\infty} dE \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \vec{A}; \end{aligned} \quad (11.117)$$

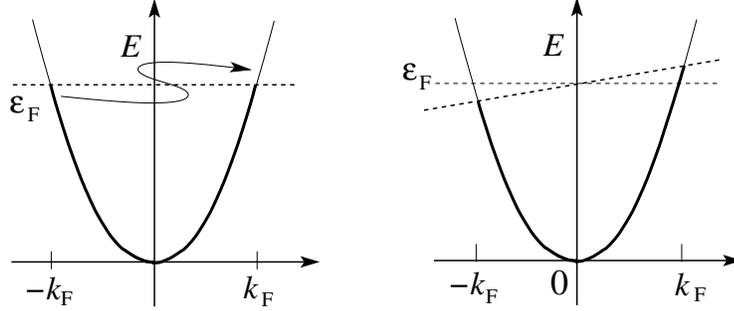


Abb. 11.17: Die Zustände bei \vec{k}_F und $-\vec{k}_F$ (links) sind in der Anwesenheit eines \vec{A} -Feldes nicht mehr äquivalent, woraus sich eine Umbesetzung mit zusätzlich besetzten Zuständen bei \vec{k}_F und unbesetzten Zuständen bei $-\vec{k}_F$ ergibt (rechts).

der Faktor 2 in der dritten Zeile berücksichtigt Zustände ober- und unterhalb von Δ . Für $\Delta = 0$ und $T = 0$ finden wir mit $\int_{\Delta}^{\infty} dE \delta(E) = 1/2$

$$e\langle \vec{J}_{\vec{q} \rightarrow 0} \rangle_n = \frac{e^2 n}{mc} \vec{A}, \quad \chi_{\perp}^n(\vec{q} \rightarrow 0) = -\frac{n}{m}; \quad (11.118)$$

der ideale Leiter ohne Streuung zeigt also bei $T = 0$ keinen Meissner-Ochsenfeld-Effekt. Im Supraleiter ist das Spektrum hingegen ‘gegappt’, d.h., dort wo $\partial_E f \neq 0$ ist, verschwindet die Zustandsdichte N_s , und deshalb ist

$$e\langle \vec{J}_{\vec{q} \rightarrow 0} \rangle_s = 0, \quad \chi_{\perp}^s(\vec{q} \rightarrow 0) = 0. \quad (11.119)$$

Bei endlicher Temperatur liefern die angeregten Quasiteilchen einen Beitrag $\chi_{\perp}^s(\vec{q} \rightarrow 0) = -n_n/m$, mit $n_n \propto \exp[-2\Delta(0)/T]$ für $T \rightarrow 0$.

Woher kommt dieser Effekt? Das Resultat in Gl. (11.119) ist eine Konsequenz der Steifigkeit der Wellenfunktion Ψ : Aus Gl. (11.116) folgt, dass ein \vec{A} -Feld die Energien der Niveaus shiftet. Im Normalleiter führt dies zu einer Umbesetzung der Niveaus bei ϵ_F und der Parastrom kompensiert gerade den Diastrom, $\vec{j}_{\text{para}} = -\vec{j}_{\text{dia}}$, vgl. Abb. 11.17. Im Supraleiter sind die Zustände, welche diese Umbesetzung machen ‘weggegappt’, die Wellenfunktion Ψ ist steif.

Wo haben wir das Problem vereinfacht? Wir haben gezeigt, dass

$$\vec{j}_{\vec{q} \rightarrow 0} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \vec{A}_{\vec{q} \rightarrow 0}. \quad (11.120)$$

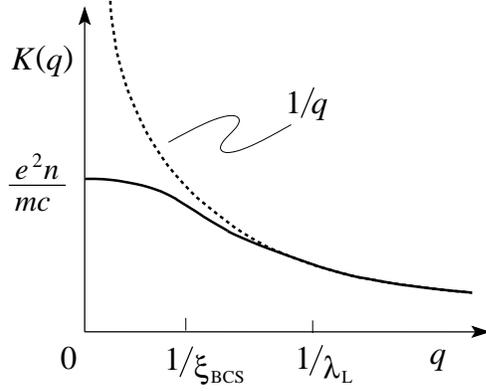


Abb. 11.18: Der Suprastrom ergibt sich aus dem q -abhängigen Kern $K(q)$ via $\vec{j}(q) = K(q)\vec{A}(\vec{q})$ oder im realen Raum via der nichtlokalen Relation $\vec{j}(\vec{r}) = \int d^3r' K(\vec{r}' - \vec{r})\vec{A}(\vec{r}')$.

Für den MO-Effekt brauchen wir diese Relation für alle $q < 1/\lambda_L$, die Gl. (11.106) gilt aber nur für $q < 1/\xi_{\text{BCS}}$, da nur Zustände mit $E < \Delta$ gepapt sind. Demnach ist unsere Analyse vollständig (d.h., gültig für alle relevanten \vec{q} -Werte), falls $1/\lambda_L < 1/\xi_{\text{BCS}}$ oder $\xi_{\text{BCS}} < \lambda_L$. Dies sind die *London-* oder *Typ-II-Supraleiter*, für welche sich Gl. (11.120) verallgemeinert zu⁶

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\frac{e^2 n_s}{mc} \vec{A}_\perp(\vec{r}). \quad (11.122)$$

Falls $\xi_{\text{BCS}} > \lambda_L$, wird die Beziehung $j_{\vec{q}} = K(\vec{q})A_{\vec{q}}$ abhängig von \vec{q} und $\vec{j}(\vec{r}) = \int K(\vec{r} - \vec{r}')\vec{A}(\vec{r}')d^3r'$ wird nichtlokal. Dies sind die *Pippard-* oder *Typ-I-Supraleiter*. Für ein isotropes Material findet man (vgl. Abb. 11.18)

$$K(\vec{q}) = -\frac{3\pi ne^2}{4 mc} \frac{1}{q\xi_{\text{BCS}}} \quad (11.123)$$

und damit ($n_s = n$)

$$\vec{j}_{\vec{q}} = -\frac{e^2 n}{mc} \begin{cases} \vec{A}_{\vec{q}}, & q < 1/\xi_{\text{BCS}}, \\ \frac{3\pi}{4} \frac{1}{q\xi_{\text{BCS}}} \vec{A}_{\vec{q}}, & 1/\xi_{\text{BCS}} < q < 1/\lambda_L. \end{cases} \quad (11.124)$$

⁶Beachte: Für ein longitudinales \vec{A} müssen wir die Antwort des Suprafluidums mitnehmen ($\Phi_0 = hc/2e$),

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{e^2 n_s}{mc} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \vec{\nabla}\varphi - \vec{A} \right). \quad (11.121)$$

Dieser Ausdruck ist Eichinvariant und deshalb immer korrekt.

Beachte die Verwandtschaft mit dem anomalen Skineffekt beschrieben durch Gl. (7.74),

$$\vec{j}_{\vec{q}} = \frac{4\pi e^2 n}{3 q v_F} \frac{i\omega}{c} \vec{A}_{\vec{q}}; \quad (11.125)$$

indem wir die Frequenz ω in σ_{\perp} durch die supraleitende Energielücke Δ ersetzen, $\omega \rightarrow \Delta/i\hbar$ erhalten wir die nichtlokale transversale Abschirmung (11.124) zurück.

Kapitel 12

Ausblick

In dieser Vorlesung konnten wir im ‘Garten der Festkörperphysik’ eine kleine, aber interessante Ecke beackern. Viele weitere interessante ‘Beete’ konnten wir aber leider nicht diskutieren; es mag deshalb instruktiv sein, den allgemeinen Hamiltonoperator des Festkörpers heranzuziehen und durch Variation der Parametern zumindest eine Skizze des Gartens zu erstellen.

- $H = H_0$: *Blochelektronen und Kristallsymmetrien*
- $+V_C$: Die *Coulomb-Wechselwirkung* ist im Kontinuum abgeschirmt, auf dem Gitter verbleibt ein lokaler Term $Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$. In diesem *Hubbard-Modell* finden sich
 - *Spindichtewellen (SDW)*
 - *Mott-Isolatoren*
- $+V_{e-ph}$: *Elektron-Phonon-Wechselwirkung*
 - *Polaronen* (Elektronen & Phonon Wolke)
 - *Elektron-Phonon-Streuung*
 - *Supraleitung* durch Attraktion der Elektronen
 - *Ladungsdichtewellen (CDW)* via Peierls-Instabilität
- $+V_{eD}$: *Elektron-Defekt-Wechselwirkung*
 - *Streuung*
 - *Lokalisierung* (Anderson-Isolator, starke/schwache Lokalisierung)

- V_{e-pl} : *Elektron-Plasmon-Wechselwirkung* führt zur Streuung (Bremsung) schneller Elektronen
- & Spin: Der Einbezug des Spins führt auf mannigfache neue Phänomene,
 - *Magnetismus* (Ferro-, Antiferro-, Meta-)
 - *Magnonen* (Spinwellen)
 - *Kondophysik* (Abschirmung lokalisierter Spins)
- & Füllung der Bänder (Dichte der Elektronen):
 - *Halbleiter*
 - *Isolatoren* (Bandisolatoren)
 - *Halbmetalle* (Graphene)
- & Dimensionalität: Fermionen in 1-3 dimensionalen Festkörpern bilden in Dimension
 - $D = 1$: *Luttinger-flüssigkeit*, deren elementare Anregungen Ladungs- und Spindichtewellen sind (Separation von Spin und Ladung)
 - $D = 1$: Wettstreit zwischen SDW, CDW, SS, TS (SS = Singlett Supraleiter, TS = Triplet Supraleiter), ‘g-ologie’
 - $D = 1$: Unordnung ist relevant (Lokalisierung), Fluktuationen sind dominant, nur algebraische Ordnung bei $T = 0$
 - $D = 2$: wahrscheinlich *Fermiliquid*
 - $D = 3$: *Fermiliquid*

Literaturverzeichnis

- [Abe66] W.R. Abel, A.C. Anderson, and J.C. Wheatley, *Propagation of Zero Sound in Liquid He³ at Low Temperatures*, Phys. Rev. Lett. **17**, 74 (1966).
- [Abr88] A.A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals* (North Holland, Amsterdam, 1988).
- [Ash76] N. Ashcroft and D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Reinhart & Winston, 1976). [*Ein Muss für jeden Festkörperphysiker*]
- [Bas75] F. Bassani and G. Pastori-Parravicini, *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Pergamon, 1975.
- [Bec92] A.D. Becke, *Density-functional thermochemistry. I. The effect of the exchange-only gradient correction*, J. Chem. Phys. **96**, 2155 (1992); *Density-functional thermochemistry. II. The effect of the Perdew-Wang generalized-gradient correlation correction*, J. Chem. Phys. **97**, 9173 (1992); *Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange*, J. Chem. Phys. **98**, 5648 (1993).
- [Cha95] P.M. Chaikin and T.C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge, 1995). [*ganz anders! super!*]
- [Cep80] D.M. Ceperley, B.J. Adler, *Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method*, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [Cit73] C.H. Citrin, *High-Resolution X-Ray Photoemission from Sodium Metal and Its Hydroxide*, Phys. Rev. B **8**, 5545 (1973).
- [Cor84] J.F. Cornwell, *Group Theory in Physics* (Academic Press, 1984).
- [Dahl92] Per Fridtjof Dahl, *Superconductivity, Its Historical Roots and Development from Mercury to Ceramic Oxides* (AIP, New York, 1992).

- [deG89] P.G. De Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Addison-Wesley, 1966, 1989).
- [Hoh64] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. **136**, B 864 (1964).
- [ITC] *International Table for Crystallography* (D. Reidel Publ. Comp., 1983).
- [Jos82] A.W. Joshi, *Elements of Group Theory for Physicists* (Wiley Eastern Limited, 3rd edition, 1982).
- [Kit63] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (John Wiley, 1963).
- [Kos63] G.F. Koster, J.O. Dimmock, R.G. Wheeler, and H. Statz, *Properties of the thirty-two point groups* (MIT Press, 1963).
- [Koh65] W. Kohn, L.J. Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev. **140**, A 1133 (1965).
- [Mah93] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, second edition (Plenum Press, New York, 1993).
- [Mad78] O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory* (Springer, Berlin, 1978).
- [Mil67] S.C. Miller and W.F. Love, *Tables of Irreducible Representations of Space Groups and Co-Representations of Magnetic Space Groups* (Pruett Press, 1967).
- [Pin66] D. Pines and P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids* (Benjamin, 1966). [*Klassiker*]
- [Per92] J.P. Perdew and Y. Wang, *Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy*, Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [Sarma05] Y. Zhang und S. Das Sarma, Phys. Rev. (????). cond-mat/0501213.
- [Sch64] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Addison Wesley, 1964, 1988).
- [Smi89] H. Smith and H.H. Jensen, *Transport Phenomena* (Oxford, 1989).

- [Tin96] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd edition (McGraw Hill, 1996). [*Klassiker, zweite Auflage!*]
- [Zim72] J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge, 1972).

Index

- $\alpha^2 F$, 209
- ab-initio Pseudopotential, 87
- Abschirmung, 161, 162, 175, 178, 221
- aequivalente Darstellungen, 14
- akustische Moden, 195
- analytische Fortsetzung, 115
- Anderson-Isolator, 47, 257
- Augmented Plane Waves (APW), 81
- Austausch-Korrelationsenergie, 74
- Bandisolator, 47
- Bandmasse m_c , 191
- Basis, 3, 19
- BCS-Grundzustand, 236
- BCS-Theorie, 228, 231
- Bogoliubov-Valatin-Transformation, 240
- Boltzmann-Transport-Gleichung (BTG), 135
- Born-Oppenheimer-Approximation, 67
- Bravaisgitter, 1
- Brillouinzone, 35
- Charakter, 15
- Darstellung einer Gruppe, 14
- Deformationpotentialstreuung, 201
- density wave, 151
- Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion, 110
- Dichte-Funktionaltheorie, 74
- Dichte-Korrelation, 109
- Dichtematrix, 103
- Dichteoperator, 103
- direktes Gap, 64
- direktes Produkt, 12
- Dispersion, 145, 152
- dissipativer Pol, 217
- Doppelgruppe, 26
- dynamische Dichte-Dichte-Korrelation, 109
- dynamische Matrix, 194
- dynamischer Strukturfaktor, 109, 118
- effektive Bandmasse, 95
- effektive Masse, 93, 128, 133, 174, 190
- Einteilchen-Anregungen, 98
- Einteilchenanregungen, 151
- Einteilchenlebensdauer, 153
- elastische Konstanten, 197
- Elektron-Phonon-Kopplungskonstante, 209
- Elektron-Defekt-Streuung, 208
- Elektron-Elektron-Streuung, 212
- Elektron-Elektron-Wechselwirkung, 224
- Elektron-Phonon-Kopplung, 225

- Elektron-Phonon-Streuung, 137, 208
- elementare Anregungen, 95
- Energieerhaltung, 138
- Energiefunktional, 127
- Entropie S des Supraleiter, 247
- erster Schall, 98, 140, 143, 147
- fast freie Elektronen, 75
- Fermi's Goldene Regel, 208, 212
- Fermi-Liquid-Theorie (FLT), 125
- Fermi-Surface-Nesting, 241
- Fermigas, 125, 152
- Fermiliquid, 125, 152
- Fermiverteilung, 102
- Fluktuationen, 111
- Fluktuations-Dissipations-Theorem (FDT), 122
- freie Energie F des Supraleiters, 247
- Gapgleichung, 238, 244
- Gibbsverteilung, 102
- Ginzburg-Landau-Theorie (GL), 231
- Graphene, 258
- grosskanonische Zustandssumme, 102
- Grundzustandsverteilungsfunktion, 127
- Gruppe, 11
- Halbleiter, 47, 258
- hydrodynamischer Limes, 140
- Impulserhaltung, 138
- Impulsrelaxationszeit, 215
- indirektes Gap, 61
- innere Energie U des Supraleiters, 247
- inneres Produkt, 11
- internes Feld, 162
- irreduzible Darstellung, 14, 19
- Isolatoren, 258
- Isotopeneffekt, 247
- Jellium-Modell, 68
- kanonische Zustandssumme, 102
- kinetische Gleichung, 134, 214
- Klasse, 11
- Klassenfunktion, 15
- kleine Gruppe, 40
- kleine Punktgruppe, 40
- kollektive Anregungen, 98, 139
- kollektive Moden, 150, 166, 169
- kompatible Darstellungen, 17
- komplex konjugierte Darstellung, 32
- Kondensationsenergie, 239
- Kondophysik, 258
- konjugiertes Element, 11
- Koordinationszahl, 2
- Korringa-Kohn-Rostoker Green's function method (KKR), 81
- Korrelationen, 111
- Kramersentartung, 31
- Kristall, 3
- Kristallsysteme, 4, 9
- Ladungsdichte, 214
- Landau-Diamagnetismus, 220
- Landau-Silin-Theorie, 166
- Landauparameter, 130
- Lebensdauer, 153
- level crossing, 126
- Lindhard-Funktion, 183
- linear response, 109, 111
- lineare Kette, 196
- Lokale-Dichte-Approximation, 71, 74

- London-Gleichungen, 230
 longitudinale Anregungen, 215
 longitudinaler Schall, 142

 Magnetismus, 258
 Magnonen, 258
 makroskopische Wellenfunktion, 231
 Matthiesen'sche Regel, 222
 Meissner-Ochsenfeld-Effekt (MO), 230, 250, 253
 Metall, 47
 metallischer Pol, 217
 Modulation Doping, 205
 Molekularfeld, 128
 Mottisolator, 47
 Muffin-Tin-Potential, 80
 Multi-Paaranregungen, 150

 Nearly Free Electrons (NFE), 80, 81
 Nicht-Gleichgewichts-Verteilung, 133
 Nicht-primitive Einheitszelle, 3
 nicht-symmorphe Gruppe, 39
 Nichtgleichgewicht, 128
 nichtlineare Effekte, 151
 NMR, 249
 Normal-Prozess, 199
 nullter Schall, 98, 139, 140, 144, 145, 147, 168

 oktahedrische Gruppe, 12
 optische Antwort, 216
 optische Moden, 195
 Ordnung einer Gruppe, 11
 orthogonale Darstellungen, 15
 Orthogonalized Plane Wave Approximation (OPW), 80

 Paaranregungen, 150, 152

 Paaranregungsspektrum, 119
 Partnerfunktionen, 20
 Pauli-Blockade, 155
 Phasenraum, 155
 Phonondispersion, 196
 Phononen im Metall, 200
 Phononen in Halbleitern, 201
 piezoelektrische Wechselwirkung, 201

 Plasmafrequenz, 165
 Plasmaschwingung, 98, 140, 164, 170, 180
 polar-optische Phononen, 201
 Polarisierung, 162, 202
 Polarisierbarkeit, 117
 Polaronen, 257
 Pole von $\chi(\omega)$, 114
 primitive Einheitszelle, 3
 Produktdarstellung, 18
 Pseudo-Potential Approximation (PSP), 80
 Pseudopotential, 86
 Punktgruppe, 4, 9

 Quasiteilchen, 125
 Quasiteilchenanregungsspektrum, 119

 Random-Phase-Approximation (RPA), 118, 181
 Ratengleichung, 134
 Raumgruppe, 4, 9
 reduzible Darstellung, 14
 reduzierte Brillouinzone, 41

 Schallgeschwindigkeit, 142
 Schallwellen, 139
 Schnitte in $\chi(\omega)$, 114
 semiempirische Pseudopotentiale, 88
 single particle relaxation time, 153

- Skineffekt, 175, 218
 statische Abschirmung, 163, 180
 statistischer Operator, 103
 Stern, 41
 Stossintegral, 135
 Streuterm, 214
 Stromdichte, 214, 216
 Strukturfaktor, 177, 181
 Summenregel, 177, 179
 supraleitendes Gap Δ , 245
 Suprastrom, 230
 Symmetriegruppe, 4
 symmorphe Gruppe, 39
 symmorphe Raumgruppe, 9
- Teilchen-Defekt-Streuung, 135, 138
 Teilchen-Loch Anregungsspektrum, 98
 Teilchen-Phonon-Streuung, 138
 Teilchen-Teilchen-Streuung, 136, 138
 Teilchenanregungsspektrum, 119
 Teilchenzahlerhaltung, 138, 139, 163
 Theorem von Hohenberg und Kohn, 73
 Tight Binding Approximation, 81
 Tight Binding Approximation (TBA), 80
 Transportzeit, 215
 transversaler Schall, 142
 treue Darstellung einer Gruppe, 14
 Tunneleffekt, 248
 Tunnelexperiment, 119
 Typ-I-Supraleiter, 254
 Typ-II-Supraleiter, 254
- Umklapp-Prozess, 199, 222
 Unordnung, 47
 Untergruppe, 11
- Verteilungsfunktion, 127
- Wigner-Seitz Cellular Method (WSCM), 81
 Wigner-Seitz-Einheitszelle, 3
- Zeile zu einer Darstellung, 20
 Zustandsdichte, 196
 Zustandsdichte N_s , 246
- Ultraschall, 249