

Festkörperphysik - Theorie

Frühlingssemester 2009

Manfred Sigrist
Institut für Theoretische Physik HIT K23.8
Tel.: 044-633-2584
Email: sigrist@itp.phys.ethz.ch

Literatur:

- N.W. Ashcroft and N.D. Mermin: *Solid State Physics*, HRW International Editions, 1976.
- C. Kittel: *Einführung in die Festkörperphysik*, R. Oldenburg Verlag, 1983.
- C. Kittel: *Quantentheorie der Festkörper*, R. Oldenburg, 1970.
- O. Madelung: *Introduction to solid-state theory*, Springer 1981; auch in Deutsch in drei Bänden Festkörperphysik I-III, Springer.
- J.M. Ziman: *Prinzipien der Festkörpertheorie*, Verlag Harri Deutsch, 1975.
- M.P. Marder: *Condensed Matter Physics*, John Wiley & Sons, 2000.
- G. Grosso & G.P. Parravicini: *Solid State Physics*, Academic Press, 2000.
- G. Czychol: *Theoretische Festkörperphysik*, Springer 2004.
- P.L. Taylor & O. Heinonen, *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*, Cambridge Press 2002.
- viele spezialisierte Bücher.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Elektronen im periodischen Kristall	8
1.1 Bloch-Zustände der Elektronen im Kristall	8
1.1.1 Kristall-Symmetrie	8
1.1.2 Bloch-Theorem	9
1.2 Näherung der fast freien Elektronen	10
1.3 Symmetrie-Eigenschaften der Bandstruktur	12
1.4 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Entwicklung - effektive Massen	16
1.5 Bandstrukturen - Näherungsmethoden	18
1.5.1 Pseudopotential	18
1.5.2 APW-Methode (augmented plane wave)	20
1.6 Starkgebundene Elektronen und die Wannier-Funktionen	22
1.7 Semiklassische Beschreibung der Bandelektronen	23
1.7.1 Semiklassische Bewegungsgleichungen	23
1.7.2 Stromdichten	24
1.8 Metalle und Halbleiter	25
2 Halbleiter	26
2.1 Bandstruktur der Elemente der Gruppe IV	27
2.1.1 Kristall- und Bandstruktur	27
2.1.2 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ - oder effektive Massen-Näherung	29
2.2 Eigenschaften der Elektronen und elementare Anregungen	30
2.2.1 Elektron-Loch-Anregung	30
2.2.2 Exzitonen	31
2.3 Optische Eigenschaften	34
2.4 Störstellen im Halbleiter	37
2.5 Halbleiter-Bauelemente	39
2.5.1 pn-Kontakte als Dioden	39
2.5.2 Halbleiter-Dioden und Licht	40
2.5.3 MOSFET	41
3 Metalle - Eigenschaften eines wechselwirkenden Elektronengases	43
3.1 Jellium-Modell des Metalls	43
3.2 Ladungsanregungen - Dielektrizitätsfunktion	46
3.2.1 Störungstheorie und Lindhard-Funktion	46
3.2.2 Kollektive Anregung - Plasma-Resonanz	48
3.2.3 Abschirmeffekte	50
3.3 Gitterschwingungen - Phononen im Metall	52
3.3.1 Schwingungen des isotropen elastischen Mediums	52
3.3.2 Phononen im Metall	54
3.3.3 Peierls-Instabilität in einer Dimension	55
3.3.4 Phononen und die Dielektrizitätsfunktion	58

3.4	Fermifläche - de Haas-van Alphen-Effekt	59
3.4.1	Landau-Niveaus	59
3.4.2	Oszillationen der Magnetisierung	60
3.4.3	Onsager-Gleichung	61
3.5	Quantum Hall Effect	63
3.5.1	Hall-Effekt des zweidimensionalen Elektronengases	64
3.5.2	Ganzzahliger Quanten-Hall-Effekt	65
3.5.3	Fraktioneller Quanten-Hall-Effekt	70
4	Landaus Theorie der Fermiflüssigkeiten	73
4.1	Lebensdauer eines Quasiteilchens	73
4.2	Landau'sche Theorie der Fermiflüssigkeiten	75
4.2.1	Spezifische Wärme und Zustanddichte	77
4.2.2	Kompressibilität	78
4.2.3	Spin-Suszeptibilität	78
4.2.4	Effektive Masse	79
4.2.5	Stabilität der Fermiflüssigkeit	80
4.3	Einfache mikroskopische Betrachtung	80
4.3.1	Landau-Parameter	81
4.3.2	Unstetigkeit in der Verteilungsfunktion	83
5	Transport in Metallen	85
5.1	Elektrische Leitfähigkeit	85
5.2	Transport-Gleichungen und Relaxationszeit	86
5.2.1	Boltzmann-Gleichung	86
5.2.2	Drude-Form	88
5.2.3	Relaxationszeit	90
5.3	Streuung an Verunreinigungen	90
5.3.1	Potentialstreuung	90
5.3.2	Resonante Streuung - Kondo-Effekt	92
5.4	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	93
5.5	Elektron-Elektron-Streuung	95
5.6	Matthiessen'sche Regel und der Ioffe-Regel-Limit	96
5.7	Allgemeine Transportkoeffizienten	97
5.7.1	Erweiterte Boltzmann-Gleichung und das Wiedemann-Franz-Gesetz	97
5.7.2	Thermoelektrischer Effekt	99
5.8	Transport in einer Dimension - Anderson Lokalisierung	100
5.8.1	Landauer Formel	100
5.8.2	Anderson Lokalisierung	103
6	Magnetismus in Metallen	104
6.1	Stoner-Instabilität	105
6.1.1	Stoner-Modell in der Molekularfeld-Näherung	105
6.1.2	Stoner-Kriterium	106
6.1.3	Spinsuszeptibilität für $T > T_C$	109
6.2	Allgemeine Spinsuszeptibilität und magnetische Instabilitäten	109
6.2.1	Allgemeine dynamische Spinsuszeptibilität	109
6.2.2	Instabilität bei endlichem Wellenvektor \vec{q}	111
6.2.3	Bandstruktur-Eigenschaften	112
6.3	Stoner-Anregungen	113

7	Mott-Isolatoren und Magnetismus lokalisierter Momente	116
7.1	Mott-Übergang	117
7.1.1	Hubbard-Modell	117
7.1.2	Isolierender Zustand	118
7.1.3	Metallischer Zustand	119
7.1.4	Fermiflüssigkeitseigenschaften des metallischen Zustandes	121
7.2	Mott-Isolator als Quanten-Spin-System	123
7.2.1	Effektive Hamilton-Operator	123
7.2.2	Molekularfeld-Näherung des Antiferromagneten	124
7.3	Kollektive Spinanregungen - Spinwellen des Antiferromagneten	125
8	Supraleitung	128
8.1	London-Theorie	129
8.1.1	Abschirmung - London-Gleichung	130
8.1.2	Persistente Ströme	131
8.2	Ginzburg-Landau-Theorie	132
8.2.1	Ordnungsparameter	132
8.2.2	Ginzburg-Landau-Gleichungen	133
8.2.3	Flussquantisierung	134
8.3	Zwei Typen von Supraleitern - die gemischte Phase	135
8.3.1	Oberes kritisches Feld	135
8.3.2	Der Wirbel und das untere kritische Feld	136

Einleitung

Die Festkörperphysik, auch Physik der kondensierten Materie genannt, gehört zu den aktivsten und vielfältigsten Gebieten der modernen Physik, die sich nach der Entdeckung der Quantenmechanik entwickelt haben. Sie befasst sich mit Themen, die von fundamentalen bis hin zu anwendungsbezogenen Problemen der Eigenschaften von Materialien oder Systemen mit sehr vielen Freiheitsgraden reichen. Entsprechend fazetenreich sind die Fragestellungen und machen die Festkörperphysik zum gegenwärtig grössten Bereich der Physik, der seit seiner Entstehung die wohl grössten technologischen Veränderungen in den industrialisierten Ländern hervorgebracht hat.

Kondensierte Materie oder feste Körper bestehen aus atomaren Kernen(Ionen), die sich meist in regulären (elastischen) Gittern anordnen und Elektronen. Die Beschreibung eines solchen Systems macht nur innerhalb der Quantenmechanik wirklich Sinn. Wir führen dazu den Hamilton-Operator für die Kerne und Elektronen ein.

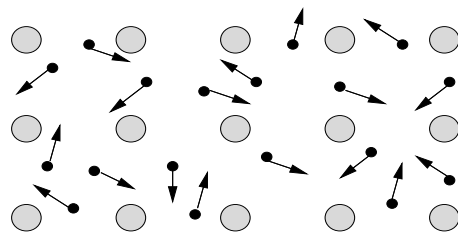


Abb. 0.1

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_K + \hat{H}_{K-e} \quad (1)$$

mit

$$\hat{H}_e = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{i'}|} \quad (2)$$

$$\hat{H}_K = \sum_j \frac{\hat{P}_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}|} \quad \text{und} \quad \hat{H}_{K-e} = - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}$$

wobei \hat{H}_e (\hat{H}_K) die Dynamik der Elektronen (Kerne) und ihre gegenseitige Wechselwirkung und \hat{H}_{K-e} die Wechselwirkung zwischen Kernen und Elektronen beschreibt. Ferner ist

m	freie Elektronenmasse	$9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$
e	Elementarladung	$1.6022 \times 10^{-19} \text{ As}$
M_j	Masse des j -ten Kerns	$\sim 10^3 - 10^4 \times m$
Z_j	Ladungszahl des j -ten Kerns	

Die charakterischen Skalen, die wir von atomaren oder molekularen Systemen her kennen, sind

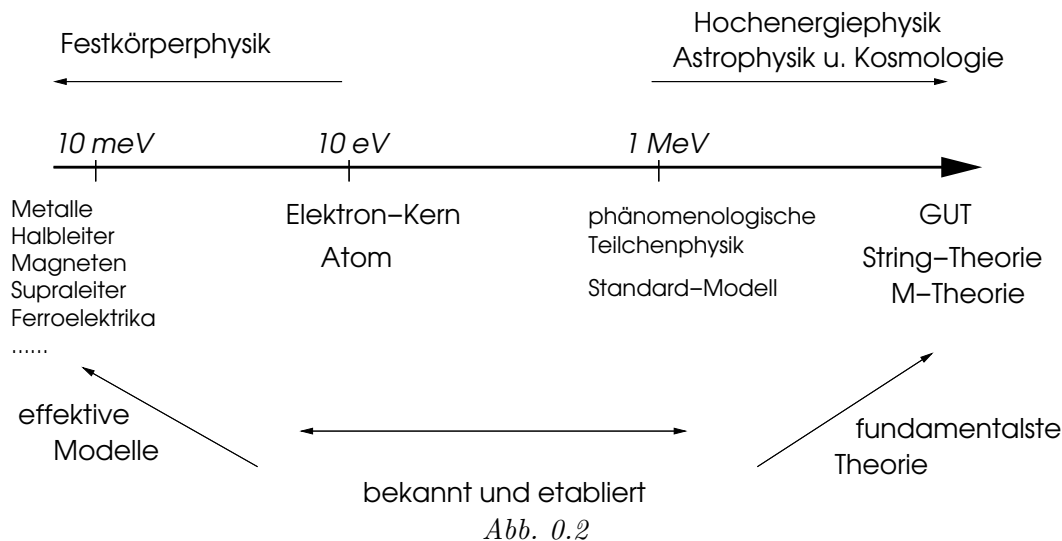
Länge: Bohr-Radius	$a_B = \hbar^2 / m e^2 \approx 0.5 \times 10^{-10} \text{ m}$
Energie: Hartree	$e^2 / a_B = m e^4 / \hbar^2 = m c^2 \alpha^2 \approx 27 \text{ eV} = 2 \text{ Ry}$

mit $\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$ als Feinstruktur-Konstante. Wir sehen, dass die Energieskala "Hartree" viel kleiner ist als die relativistische Ruheenergie des Elektrons ($\sim 0.5 \text{ MeV}$), die jedoch in der Teilchenphysik als klein angesehen wird. In den höchsten Höhen der modernen Hochenergie-Physik stösst man heutzutage wenigstens theoretisch zur Planck'schen-Skala vor, eine Energie-

bzw. Längenskala, bei der selbst die Gravitation nicht mehr ohne Quanteneffekte beschreibbar ist:

$$E_{\text{Planck}} = c^2 \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \sim 10^{19} \text{ GeV} \quad l_{\text{Planck}} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \sim 1.6 \times 10^{-35} \text{ m} \quad (3)$$

wobei $G = 6.673 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ die Gravitationskonstante ist. Hier setzt die GUT (Grand Unified Theory) und die String-Theorie an. Dabei geht es weder um die Beschreibung der Elektronen noch der Kerne, sondern um die Entdeckung der fundamentalsten Theorie.



Im Gegensatz dazu steht die Festkörperphysik. Hier suchen wir nach der Physik, die sich bei der Energieskala der Raumtemperatur oder tiefer ergibt. Dies bedeutet

$$E = k_B T \Rightarrow 300 \text{ K} \rightarrow 0.03 \text{ eV} = 30 \text{ meV} \quad (4)$$

und die Längenskalen werden durch die physischen Ausdehnung der Materialien oder der Wellenfunktionen der Elektronen gegeben. Die Blickrichtung ist folglich anders als in der Hochenergiephysik.

Die Hochenergie-Physik besitzt mit dem Standard-Modell eine sehr erfolgreiche Phänomenologie für ihren "Niederenergiebereich" und sucht folglich die fundamentale Hochenergie-Theorie. Dagegen ist die Situation in der Festkörperphysik gerade umgekehrt. Der Hamilton-Operator (1,2) stellt hier gerade die Hochenergie-Theorie dar, während wir die Niederenergie-Eigenschaften mittels geeignet reduzierter, sogenannten effektiver Theorien (Phänomenologien) suchen. Der Schritt in beide Richtungen ist absolut nicht trivial.

Die Festkörperphysik stellt sich die Aufgabe eine Vielzahl von sehr unterschiedlichen Zuständen der Kondensierten Materie zu verstehen und zu beschreiben. Dies beinhalten verschiedene Metalle, Halbleiter oder Isolatoren. Phänomene wie Magnetismus, Supraleitung, Ferroelektrizität, Ladungsordnungsübergänge oder der Quanten-Hall-Effekt gehören auch dazu. All diese Zustände und Phänomene haben einen gemeinsamen Ursprung: Elektronen, die untereinander und mit den Kernen Coulomb-wechselwirken. Die Hamilton-Formulierung (1) erlaubt es jedoch in den meisten Fällen nicht, mit vernünftigem Aufwand bis zu diesen Phänomenen vorzustossen. Die Reduktion zu effektiven Theorien ist daher ein wichtiger Weg.

Einerseits ist das Ziel den Grundzustand eines Systems zu charakterisieren. Messbare Eigenschaften werden jedoch durch die angeregten Zustände bestimmt. Dabei taucht immer wieder das Konzept der Elementaranregungen auf. Berühmte Beispiele sind die Landau'schen Quasiteilchen einer Fermiflüssigkeit, die Phononen der Ionengitterschwingungen oder die Magnonen eines Ferromagneten. Damit wird der Grundzustand zu einem effektiven Vakuum in Sinne der zweiten

Quantisierung, in dem Anregungen mit Teilchen-Charakter erzeugt werden können. Dieses Vakuum entspricht z.B. einem Fermi-See oder einem Zustand mit spontan gebrochener Symmetrie, wie etwa der Ferromagnet oder der Supraleiter.

Die Beschreibung dieser Materialeigenschaften beruht gemäss Anderson¹ auf zwei grundlegenden Prinzipien: das Prinzip der *adiabatischen Kontinuität* und das Prinzip der *spontan gebrochenen Symmetrie*. Die adiabatische Kontinuität entspricht der Aussage, dass wir uns für ein kompliziertes System auf ein einfacheres System beziehen können, das alle wesentlichen Eigenschaften beinhaltet. Das eindrucklichste Beispiel ist wohl die oben erwähnte Landau'sche Beschreibung der Fermifüssigkeit. Stark wechselwirkende Fermionen können im Niederenergiebereich wie unabhängig Fermionen mit renormierten Parametern betrachtet werden. Die Phasenübergänge in neue Zustände eines Materials können in den meisten Fällen durch gebrochene Symmetrien charakterisiert werden. In magnetisch geordneten Zuständen wird zum Beispiel die Rotationssymmetrie und die Zeitumkehrsymmetrie gebrochen, im Supraleitungszustand ist die Eichsymmetrie verletzt.

In dieser Vorlesung geht es darum einige wesentliche Konzepte dieser Art einzuführen. Dabei wollen wir ein möglichst breites Feld von Grundzuständen abdecken. Angefangen mit der Theorie von Metallen und Halbleitern, gehen wir über zu den Magneten und Mott-Isolatoren und schliesslich zu den Supraleitern.

¹P.W. Anderson: *Basic Notions of Condensed Matter Physics*, Frontiers in Physics Lecture Notes Series, Addison-Wesley (1984).

Kapitel 1

Elektronen im periodischen Kristall

In diesem ersten Kapitel beschäftigen wir uns mit den ausgedehnten Elektronen in einem regulären Gitter der Ionenrümpfe. Dies führt auf Energiebänder, die bestimmend für die qualitativen Eigenschaften eines Festkörpers sind. Insbesondere lassen sich damit Metalle, Isolatoren oder Halbleiter unterscheiden.

Bei unseren folgenden Betrachtungen wollen wir zunächst sowohl die Wechselwirkung der Elektronen untereinander als auch die Bewegung der Ionen ausser Acht lassen. Diese Vereinfachung führt auf eine Einteilchenbeschreibung, für die wir das Bloch'sche Theorem anwenden können.

1.1 Bloch-Zustände der Elektronen im Kristall

1.1.1 Kristall-Symmetrie

Wir gehen also von einem perfekten Kristall von Ionen aus. Die Kristallstrukturen werden durch ihre *Raumgruppe* \mathcal{R} charakterisiert, deren es 230 verschiedene gibt. Die Elemente der Raumgruppe beinhalten Translationen, Drehungen, Inversionen und deren Kombinationen. Die Translationen können durch ein Basis-Set von primitiven Translationsvektoren dargestellt werden, $\{\vec{a}_i\}$, die das Gitter invariant lassen. Eine Verschiebung um einen dieser Vektoren bringt uns zu einer benachbarten Einheitszelle des Gitters. Eine beliebige Translation, die das Gitter auf sich abbildet, ist als eine Linearkombination dieser Basis darstellbar:

$$\vec{a} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (1.1)$$

Eine allgemeine Symmetrietransformation, inklusive der anderen Elemente der Raumgruppe, kann in der Wigner'schen Notation geschrieben werden:

$$\vec{r}' = g \vec{r} + \vec{a} = \{g | \vec{a}\} \vec{r} \quad \text{mit } g : \text{Drehung, Spiegelung oder Inversion} . \quad (1.2)$$

Die Elemente g bilden die sogenannten erzeugenden *Punktgruppe* \mathcal{P} , wovon es 32 gibt. Damit gibt es:

$$\begin{aligned} \text{einfache Translationen:} & \quad \{E | \vec{a}\} \\ \text{Drehung, Spiegelung, Inversion} & \quad \{g | \vec{0}\} \\ \text{Schraubung, Gleitspiegelung} & \quad \{g | \vec{a}\} \end{aligned} \quad (1.3)$$

wobei E das Einheitselement von \mathcal{P} ist. Diese Symmetrie-Operationen bilden eine Gruppe mit:

$$\begin{aligned} \{E | \vec{0}\} : & \quad \text{Einheitselement} \\ \{g | \vec{a}\}^{-1} = \{g^{-1} | -g^{-1} \vec{a}\} & \quad \text{Inverses} \\ \{g | \vec{a}\} \{g' | \vec{a}'\} = \{gg' | g \vec{a}' + \vec{a}\} & \quad \text{Multiplikation} \end{aligned} \quad (1.4)$$

und die Multiplikation ist assoziativ. Diese Gruppe ist im allgemeinen nicht abel'sch, d.h. die Gruppenelemente kommutieren nicht. Die Translationsgruppe $\{E|\vec{a}\}$ ist aber eine abel'sche Untergruppe. Die Elemente $g \in \mathcal{P}$ bilden nicht zwangsläufig eine Untergruppe der Raumgruppe, da gewisse Elemente nur zusammen mit Translationen eine Symmetrie-Operation bilden (Schraubung oder Gleitspiegelung). Dennoch gilt:

$$\{g|\vec{a}\}\{E|\vec{a}'\}\{g|\vec{a}\}^{-1} = \{E|g\vec{a}'\} \quad \text{und} \quad \{g|\vec{a}\}^{-1}\{E|\vec{a}'\}\{g|\vec{a}\} = \{E|g^{-1}\vec{a}'\} \quad (1.5)$$

Falls \mathcal{P} eine Untergruppe von \mathcal{R} ist, dann nennt man \mathcal{R} *symmorph*. Diese Raumgruppe enthält nur primitive Translationen $\{E|\vec{a}\}$. Die 14 Bravais-Gitter sind symmorph.

1.1.2 Bloch-Theorem

Wir betrachten die Gitter-Translationen $\{E|\vec{a}\}$, unter denen der Hamilton-Operator invariant bleibt. Das bedeutet, dass der entsprechende Operator im Hilbertraum, $\hat{T}_{\vec{a}}$ mit $\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ie}$ kommutiert, weil das Ionen-Potential diese (diskrete) Translationssymmetrie induziert:

$$[\hat{T}_{\vec{a}}, \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ie}] = 0 \quad (1.6)$$

wobei

$$\mathcal{H}_{ie} = \sum_s \int d^3r V(\vec{r}) \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_s(\vec{r}) \quad (1.7)$$

und

$$V(\vec{r}) = \sum_j V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (1.8)$$

mit \vec{R}_j als Ionen-Positionen auf dem regulären Gitter und $V_{ion}(\vec{r})$ das Potential der individuellen Ionen. $\hat{\Psi}_s(\vec{r})$ ist der Feldoperator des Elektrons in der Formulierung der zweiten Quantisierung. Es gilt $V(\vec{r} + \vec{a}) = V(\vec{r})$ für alle Gittertranslationen \vec{a} .

Wir vernachlässigen die Wechselwirkung der Elektronen untereinander, wie sie im allgemeinen in \mathcal{H}_e enthalten ist und untersuchen das Einteilchenproblem, d.h.:

$$\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ie} \quad \rightarrow \quad \mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (1.9)$$

Auch \mathcal{H}_0 kommutiert mit $\hat{T}_{\vec{a}}$. Das Bloch-Theorem sagt aus, dass die stationären Elektronenzustände von \mathcal{H}_0 auch Eigenzustände von $\hat{T}_{\vec{a}}$ sind mit Eigenwerten auf dem Einheitskreis der komplexen Ebene. Wir machen den Bloch'schen Ansatz

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \hat{T}_{\vec{a}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} - \vec{a}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.10)$$

was bedeutet, dass die Blochfunktion $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a})$ periodisch ist (Ω : Volumen). Die Energieeigenwerte ergeben sich aus

$$\mathcal{H}_0 \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{n,\vec{k}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.11)$$

wobei n ein Bandindex ist und \vec{k} als Pseudoimpuls (Wellenvektor) bezeichnet wird. Man beachte, dass der Eigenwert von $\hat{T}_{\vec{a}}$, $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}}$, eine Periodizität im \vec{k} -Raum impliziert. Es gibt die reziproken Gittervektoren \vec{G} , für die gilt $e^{i(\vec{k} + \vec{G})\cdot\vec{a}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}$. Eine mögliche Basis der reziproken Gittervektoren folgt aus der Beziehung:

$$e^{i\vec{G}_j \cdot \vec{a}_i} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{G}_j \cdot \vec{a}_i = 2\pi\delta_{ij} \quad (1.12)$$

Damit definiert man die Brillouin-Zone: ausgehend von $\vec{k} = 0$ legt man senkrechte Ebenen durch den Mittelpunkt der Verbindungslinien zu den nächsten (und übernächsten) reziproken

Gitterpunkten (durch $\{\vec{G}_i\}$ aufgespannt). Die so begrenzte Zelle ist die erste Brillouin-Zone. In einer Dimension entspricht das ganz einfach dem Bereich zwischen $\vec{k} = -\pi/a$ und $+\pi/a$ (a : Gitterkonstante).

Die Bloch'sche Gleichung ist die Wellengleichung für die periodische Funktion $u_{\vec{k}}$ und lautet

$$\left\{ \frac{(\hat{\vec{p}} + \hbar \vec{k})^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.13)$$

wobei wir den Bandindex unterdrückt haben. Diese Gleichung folgt aus der Beziehung

$$\hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (\hat{\vec{p}} + \hbar \vec{k}) \quad (1.14)$$

Wir können \mathcal{H}_0 um die Spin-Bahn-Kopplung erweitern. Diese relativistische Korrektur führt einfach zu einem zusätzlichen Term

$$\mathcal{H}'_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \left\{ \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \right\} \cdot \hat{\vec{p}} \quad (1.15)$$

wobei $\vec{\sigma}$ die Pauli-Spin-Matrizen bezeichnet:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Die Bloch-Gleichung ist

$$\left\{ \frac{(\hat{\vec{p}} + \hbar \vec{k})^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})) \cdot (\hat{\vec{p}} + \hbar \vec{k}) \right\} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.17)$$

Die Zustände sind nicht mehr Eigenzustände des Spins, sondern haben eine Pseudospinorform

$$u_{\vec{k},\pm}(\vec{r}) = \chi_{\vec{k},\pm\uparrow}(\vec{r}) |\uparrow\rangle + \chi_{\vec{k},\pm\downarrow}(\vec{r}) |\downarrow\rangle \quad (1.18)$$

wobei $\sigma_z |\uparrow\rangle = +|\uparrow\rangle$ und $\sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$. Der Index $+$ und $-$ kann zum Beispiel mit Hilfe der adiabatisches Einschalten der Spin-Bahn-Kopplung verstanden werden, so dass $+$ aus $|\uparrow\rangle$ und $-$ aus $|\downarrow\rangle$ entsteht.

1.2 Näherung der fast freien Elektronen

Die konkrete Berechnung von $\epsilon_{n,\vec{k}}$ kann numerisch sehr effizient durchgeführt werden. Wir wollen zunächst eine vereinfachte Methode betrachten, durch die wir einige Aspekte der Bandstruktur eines Kristalls verstehen können. Für den Augenblick vernachlässigen wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Das periodische Potential lässt sich in folgender Weise entwickeln:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad \text{mit} \quad V_{\vec{G}} = \frac{1}{\Omega_{EZ}} \int_{EZ} d^3r V(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (1.19)$$

wobei die Summe über alle reziproken Gittervektoren und das Integral über eine Gitter-Einheitszelle (EZ) des Volumens Ω_{EZ} führt. Wir nehmen an, dass das Gitter Inversionsymmetrie besitzt, d.h. $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$ so dass $V_{\vec{G}} = V_{-\vec{G}}$. Beachte, dass man die uniforme Komponente V_0 Null setzen kann, da diese in die Energie der Elektronen eingerechnet werden kann und als konstante Energie-Nullpunktverschiebung keine Bedeutung hat.

In analoger Weise entwickeln wir die Blochfunktion:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}, \quad (1.20)$$

wobei $c_{\vec{G}}$ auch eine Funktion von \vec{k} ist. Mit diesem Ansatz und (1.19) gehen wir in die Blochgleichung (1.13) und erhalten das folgende System von Gleichungen

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \epsilon_{\vec{k}} \right) c_{\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} V_{\vec{G}-\vec{G}'} c_{\vec{G}'} = 0 \quad (1.21)$$

Dies erfordert die Suche der Eigenwerte einer unendlich dimensionalen Matrix. Wir machen eine Vereinfachung, indem wir annehmen, dass die periodische Modulation des Potentials schwach ist. Dann gehen wir davon aus, dass $c_{\vec{0}} \approx 1$ und

$$c_{\vec{G}} = O(2mV_{\vec{G}}/\hbar^2|\vec{G}|^2) \ll 1. \quad (1.22)$$

Damit finden wir sofort die approximative Lösung

$$c_{\vec{G}} \approx - \frac{2mV_{\vec{G}}}{\hbar^2\{(\vec{k} + \vec{G})^2 - \vec{k}^2\}} \quad (1.23)$$

Die Struktur ist ähnlich wie die Störungskorrektur zweiter Ordnung in der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie. Diese einfache Näherung geht solange gut als der Nenner nicht allzu klein wird. Im Bereich $(\vec{k} + \vec{G})^2 \approx \vec{k}^2$ müssen wir entartete Störungsrechnung durchführen. Exakte Entartung finden wir für $\vec{k} = -\vec{G}/2$. Falls \vec{G} ein primitiver reziproker Gittervektor ist, dann liegt $\pm\vec{G}/2$ auf der Brillouin-Zonengrenze. Allgemein gilt, dass wenn $\vec{G}/2$ auch ein reziproker Gittervektor ist, dann identifizieren wir ihn mit dem Zentrum der Brillouin-Zone. Andernfalls liegt er auf der Zonengrenze. In der Nähe dieser Punkte müssen wir die Störungstheorie für (fast) entartete Niveaus durchführen. Dies bedeutet, dass wir alle (fast) entarteten Komponenten in der Entwicklung von $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ gleichwertig mitnehmen müssen $\{c_{\vec{G}}\}$. Im einfachsten Fall sind dies nur zwei Komponenten (z.B. wenn \vec{G} ein primitiver reziproker Gittervektor ist):

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \epsilon_{\vec{k}} \right\} c_0 + V_{-\vec{G}} c_{\vec{G}} &= 0, \\ \left\{ \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m} - \epsilon_{\vec{k}} \right\} c_{\vec{G}} + V_{\vec{G}} c_0 &= 0. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Beachte, dass $V_{\vec{G}} = V_{-\vec{G}}^*$. Aus dieser Gleichung leitet sich die folgende Säkulargleichung ab:

$$\text{Det} \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \epsilon_{\vec{k}} & V_{\vec{G}}^* \\ V_{\vec{G}} & \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m} - \epsilon_{\vec{k}} \end{bmatrix} = 0 \quad (1.25)$$

Für die Bandenergie erhält man dann

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2 + (\vec{k} + \vec{G})^2) \pm \sqrt{[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2 - (\vec{k} + \vec{G})^2)]^2 + 4|V_{\vec{G}}|^2} \right\} \quad (1.26)$$

Für $\vec{k} = -\vec{G}/2$ und $V_{\vec{G}} < 0$ gilt dann

$$\epsilon_{-\vec{G}/2, \pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\vec{G}^2}{4} \pm |V_{\vec{G}}| \quad \text{mit} \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\frac{\vec{G} \cdot \vec{r}}{2}} \begin{cases} \sin \frac{\vec{G} \cdot \vec{r}}{2} & + \text{ anti-bonding} \\ \cos \frac{\vec{G} \cdot \vec{r}}{2} & - \text{ bonding} \end{cases} \quad (1.27)$$

Am einfachsten kann man dieses Verhalten im eindimensionalen regulären Gitter illustrieren. Jedoch lässt sich diese Näherung in jedem Gitter durchführen. In Abb. 1.1 stellt die schattierte Region die 1. Brillouin-Zone dar. Das parabolische Band (gestrichelte Linie) der freien Elektronen repetiert sich um jeden weiteren reziproken Gitterpunkt, so dass Bandüberschneidungen zustandekommen.

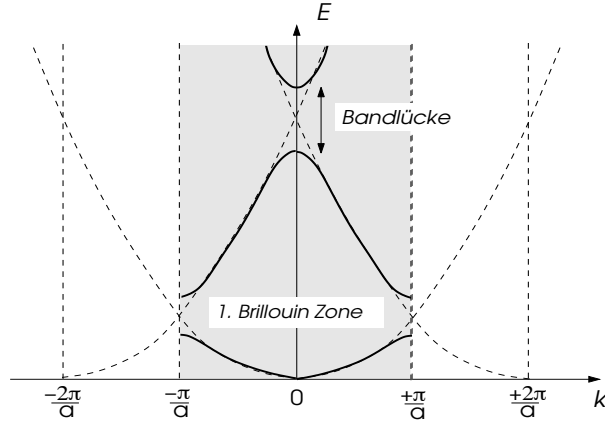


Abb. 1.1

Das periodische Potential führt zu einer *Hybridisierung* der Zustände der verschiedenen parabolischen Bänder und zu deren Aufspaltung im Zonenzentrum und an der Grenze, was schliesslich zu Energielücken führt, d.h. zu verbotenen Energiebereichen. Die beiden Zustände haben für den oberen(unteren) Rand des unteren (oberen) Bandes bonding-(antibonding-) Charakter und unterscheiden sich daher in ihrer Parität. Innerhalb der 1. Brillouin-Zone können wir für jeden \vec{k} -Punkt die Energiewerte unabhängig ermitteln und erhalten ein diskretes Set von Energiewerten, die zu je einem unterschiedlichen Band angehören.

1.3 Symmetrie-Eigenschaften der Bandstruktur

Es gibt gewisse Eigenschaften der Energiebänder in der Brillouin-Zone, die sich aus den Symmetrien der Raumgruppe ergeben. Betrachten wir zunächst die Funktionsweise eines Raumgruppenelements $\{g|\vec{a}\}$ auf eine Bloch-Wellenfunktion. Den entsprechenden Operator bezeichnen wir mit $\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}$ mit $[\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}, \mathcal{H}_0] = 0$. Wir definieren diese Operation in folgender Weise:¹

$$\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\{g|\vec{a}\}^{-1}\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r} - g^{-1}\vec{a}) \quad (1.31)$$

Wie verhält sich diese Funktion unter der Translation $\hat{T}_{\vec{a}'} = \hat{S}_{\{E|\vec{a}'\}}$?

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{a}'}\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}\hat{T}_{g^{-1}\vec{a}'}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}e^{-i\vec{k}\cdot g^{-1}\vec{a}'}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}e^{-ig\vec{k}\cdot\vec{a}'}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-ig\vec{k}\cdot\vec{a}'}\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (1.32)$$

Das bedeutet, dass

$$\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \lambda_{\{g|\vec{a}\}}\psi_{g\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad |\lambda_{\{g|\vec{a}\}}|^2 = 1 \quad (1.33)$$

oder in Dirac-Notation

$$\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}|\vec{k}\rangle = \lambda_{\{g|\vec{a}\}}|g\vec{k}\rangle \quad (1.34)$$

¹In Dirac-Notation schreiben wir

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi_{\vec{k}} \rangle, \quad (1.28)$$

der Blochzustand zum Pseudoimpuls \vec{k} . Der Operator $\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}$ wirkt in folgender Weise:

$$\hat{S}_{\{g|\vec{a}\}}|\vec{r}\rangle = |g\vec{r} + \vec{a}\rangle \quad \text{und} \quad \langle \vec{r} | \hat{S}_{\{g|\vec{a}\}} = \langle g^{-1}\vec{r} - g^{-1}\vec{a} |, \quad (1.29)$$

woraus folgt

$$\langle \vec{r} | \hat{S}_{\{g|\vec{a}\}} | \psi_{\vec{k}} \rangle = \psi_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r} - g^{-1}\vec{a}). \quad (1.30)$$

Dies gilt auch für die reinen Translationen.

bis auf einen Phasenfaktor entspricht die Operation von $\{g|\vec{a}\}$ der Rotation von \vec{k} nach $g^{-1}\vec{k}$. Es ist damit leicht zu sehen, dass

$$\epsilon_{g\vec{k}} = \langle g\vec{k} | \mathcal{H}_0 | g\vec{k} \rangle = \langle \vec{k} | \widehat{S}_{\{g|\vec{a}\}}^{-1} \mathcal{H}_0 \widehat{S}_{\{g|\vec{a}\}} | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k} | \mathcal{H}_0 | \vec{k} \rangle = \epsilon_{\vec{k}} \quad (1.35)$$

Daher gibt es in der Brillouin-Zone zu einem gegebenen \vec{k} einen *Stern* von äquivalenten $g\vec{k}$ mit derselben Bandenergie.

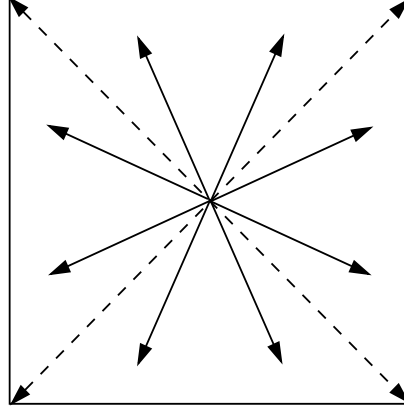


Abb. 1.2

Für einen allgemeinen Punkt \vec{k} ist die Zahl der Sternzacken gleich der Anzahl Punktgruppenelemente (exklusive Inversion). Wenn wir uns aber auf eine Symmetrielinie befinden oder auf dem Brillouinzonrand, dann gibt es nur noch eine Untergruppe von Elementen, die den Vektor \vec{k} verändern und die Zahl der Zacken ist entsprechend kleiner. Falls die Punktgruppe die Inversion enthält, gilt auch immer, dass $-\vec{k}$ im Stern enthalten ist. Damit finden wir folgenden einfachen Relationen:

$$\epsilon_{n\vec{k}} = \epsilon_{n,g\vec{k}}, \quad \epsilon_{n\vec{k}} = \epsilon_{n,-\vec{k}}, \quad \epsilon_{n\vec{k}} = \epsilon_{n,\vec{k}+\vec{G}}. \quad (1.36)$$

Wir betrachten nun die Bänder auf Symmetrie-Punkten oder entlang Symmetrie-Linien.

Γ -Punkt: Als erstes Beispiel nehmen wir das Zentrum der Brillouin-Zone, normalerweise Γ -Punkt genannt. Der Einfachheit halber betrachten wir ein einfach kubisches Gitter. Das unterste Band am Γ -Punkt (mit Energie $E(\vec{k} = 0) = 0$) gehört zur Parabel, die in der ersten Brillouin-Zone zentriert ist, ist daher nicht entartet.

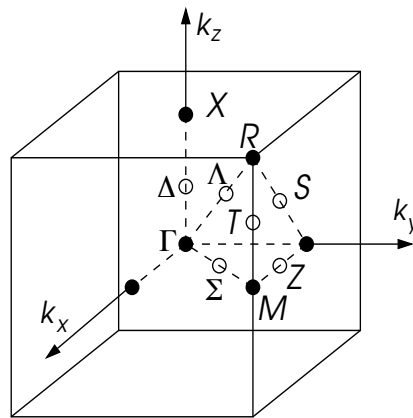


Abb. 1.3

Die nächst höhere Energie für freie Elektronen ist

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \quad (1.37)$$

und ergibt sich aus den Energieparabeln der nächsten Nachbar-Punkten des reziproken Gitters, d.h. die involvierten reziproken Gittervektoren mit Basisfunktionen haben die Form:

$$\begin{aligned}
\vec{G}_1 &= \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0) & \rightarrow & f_1(\vec{r}) = e^{iGx} \\
\vec{G}_2 &= \frac{2\pi}{a}(-1, 0, 0) & \rightarrow & f_2(\vec{r}) = e^{-iGx} \\
\vec{G}_3 &= \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0) & \rightarrow & f_3(\vec{r}) = e^{iGy} \\
\vec{G}_4 &= \frac{2\pi}{a}(0, -1, 0) & \rightarrow & f_4(\vec{r}) = e^{-iGy} \\
\vec{G}_5 &= \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1) & \rightarrow & f_5(\vec{r}) = e^{iGz} \\
\vec{G}_6 &= \frac{2\pi}{a}(0, 0, -1) & \rightarrow & f_6(\vec{r}) = e^{-iGz}
\end{aligned} \tag{1.38}$$

mit $G = 2\pi/a$. Es gibt 6 davon, wobei wir die entsprechende Basisfunktionen definieren als

$$f_n(\vec{r}) = e^{i\vec{r} \cdot \vec{G}_n} \tag{1.39}$$

so dass die Wellenfunktion

$$u_{\vec{k}=0}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^6 c_n f_n(\vec{r}). \tag{1.40}$$

Die Säkulargleichung ist daher gegeben durch:

$$\text{Det} \begin{bmatrix} E_1 - E & v & u & u & u & u \\ v & E_1 - E & u & u & u & u \\ u & u & E_1 - E & v & u & u \\ u & u & v & E_1 - E & u & u \\ u & u & u & u & E_1 - E & v \\ u & u & u & u & v & E_1 - E \end{bmatrix} = 0 \tag{1.41}$$

mit $v = V_2 \vec{G}_n$ und $u = V_{\vec{G}_n + \vec{G}_{n'}}$ ($n \neq n'$). Es gibt drei Eigenwerte und die entsprechenden Eigenvektoren:

Γ	E	$(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6)$	$u_{\vec{k}=0}(\vec{r})$	d_Γ
Γ_1^+	$E_1 + v + 4u$	$(1, 1, 1, 1, 1, 1)/\sqrt{(6)}$	$\phi_0 = \cos Gx + \cos Gy + \cos Gz$	1
Γ_3^+	$E_1 + v - 2u$	$(-1, -1, -1, -1, 2, 2)/2\sqrt{3}$ $(1, 1, -1, -1, 0, 0)/2$	$\phi_{3z^2-r^2} = 2 \cos Gz - \cos Gx - \cos Gy$, $\phi_{\sqrt{3}(x^2-y^2)} = \sqrt{3}(\cos Gx - \cos Gy)$	2
Γ_4^-	$E_1 - v$	$(1, -1, 0, 0, 0, 0)/\sqrt{2}$ $(0, 0, 1, -1, 0, 0)/\sqrt{2}$ $(0, 0, 0, 0, 1, -1)/\sqrt{2}$	$\phi_x = \sin Gx$ $\phi_y = \sin Gy$ $\phi_z = \sin Gz$	3

wobei Γ die irreduziblen Darstellung der Punktgruppe um den Γ -Punkt bezeichnet mit der Dimension d_Γ (Entartung). Der Γ -Punkt besitzt die Symmetrie der Punktgruppe des Kristalls, in diesem Fall O_h , die volle kubische Gruppe. Diese Gruppe besitzt je ein Set von geraden und ungeraden irreduziblen Darstellungen. Eine irreduzible Darstellung entspricht einem Vektorraum von Funktionen des Vektors (x, y, z) oder Pseudovektors (s_x, s_y, s_z) , die unter der Anwendung der Symmetrie-Operationen der Gruppe in Linearkombinationen innerhalb dieses Vektorraums transformieren, ohne diesen zu verlassen. Die Darstellungen lassen sich daher durch Basisfunktionen charakterisieren.

gerade	Basisfunktion	ungerade	Basisfunktion
Γ_1^+	$1, x^2 + y^2 + z^2$	Γ_1^-	$xyz(x^2 - y^2)(y^2 - z^2)(z^2 - x^2)$
Γ_2^+	$(x^2 - y^2)(y^2 - z^2)(z^2 - x^2)$	Γ_2^-	xyz
Γ_3^+	$\{2z^2 - x^2 - y^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2)\}$	Γ_3^-	$xyz\{2z^2 - x^2 - y^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2)\}$
Γ_4^+	$\{s_x, s_y, s_x\}$	Γ_4^-	$\{x, y, z\}$
Γ_5^+	$\{yz, zx, xy\}$	Γ_5^-	$xyz(x^2 - y^2)(y^2 - z^2)(z^2 - x^2)\{yz, zx, xy\}$

Jeder Eigenwert der obigen Säkulargleichung gehört zu einer der irreduziblen Darstellungen. Die zugehörigen Wellenfunktionen der Eigenzustände bilden einen Vektorraum, der entsprechend der Eigenschaften der Darstellung unter Symmetrie-Operationen transformieren.

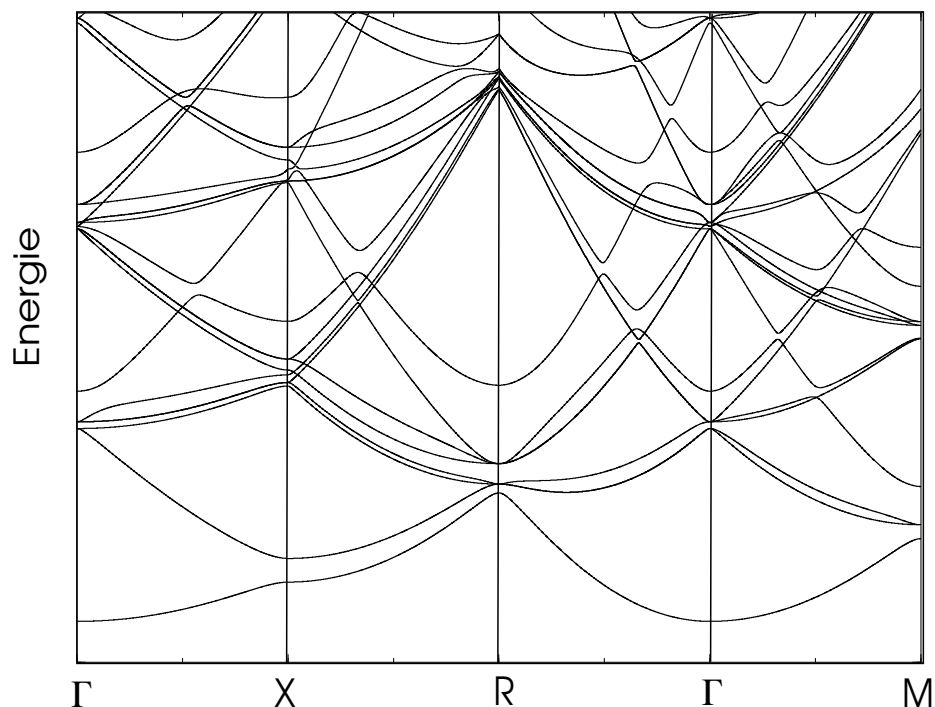


Abb. 1.4

Δ -Linie: Als nächstes verfolgen wir die Bänder für Wellenvektoren $\vec{k} \parallel (0, 0, 1)$. Dabei werden einige Entartungen des Γ -Punktes aufgespalten. Dies geschieht aufgrund der Tatsache, dass die erlaubten Symmetrie-Operation nur noch aus einer Untergruppe der Punktgruppe O_h bestehen. Zulässig sind nur noch Elemente, die den \vec{k} -Vektor invariant lassen. Wir sprechen von der *kleinen Gruppe von \vec{k}* . Diese Gruppe ist im gegebenen Fall isomorph zu C_{4v} . Beachte, dass auch die Inversion verloren gegangen ist, da $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ nicht erlaubt ist. Die Gruppe C_{4v} besitzt 5 irreduzible Darstellungen, 4 ein- und 1 zwei-dimensionale. Da wir die Punkte entlang der Achse $(0, 0, 1)$ Δ nennen, werden auch die Darstellungen entsprechend als $\Delta_1, \dots, \Delta_5$ bezeichnet.

Darstellung	Basisfunktion
Δ_1	$1, z$
Δ_2	$xy(x^2 - y^2)$
Δ_3	$x^2 - y^2$
Δ_4	xy
Δ_5	$\{x, y\}$

Die Entartung der betrachteten Zustände beim Γ -Punkt spaltet auf der Linie Δ auf:

O_h	C_{4v}
Γ_1^+	Δ_1
Γ_3^+	$\Delta_1 \oplus \Delta_3$
Γ_4^-	$\Delta_1 \oplus \Delta_5$

Damit gehen aus den drei Energien am Γ -Punkt auf der Δ -Linie 5 Bänder hervor. Eines der Bänder ist zweifach entartet (Abb.1.4).

X -Punkt: Am Rand der Brillouin-Zone wird die Symmetrie wieder grösser. Am Punkt X erhalten wir die Symmetriegruppe D_{4h} , d.h. die volle tetragonale Punktgruppe mit je fünf irreduziblen Darstellungen gerader bzw. ungerader Parität (4 ein- und 1 zwei-dimensionalen).

gerade	Basisfunktion	ungerade	Basisfunktion
X_1^+	1	X_1^-	$xyz(x^2 - y^2)$
X_2^+	$xy(x^2 - y^2)$	X_2^-	z
X_3^+	$x^2 - y^2$	X_3^-	xyz
X_4^+	xy	X_4^-	$z(x^2 - y^2)$
X_5^+	$\{zx, zy\}$	X_5^-	$\{x, y\}$

Das Set der Zustände niedrigster Energie ist vollkommen äquivalent zum Problem, das wir oben in (1.24,1.25,1.27) diskutiert hatten. Wir betrachten $\vec{G}_1 = 0$ und $\vec{G}_2 = 2\pi(0, 0, 1)/a$ mit der Energie $(\hbar^2/2m)(\pi/a)^2$ am X-Punkt. Es ergibt sich eine Aufspaltung in einen (geraden) bonding- und einen (ungeraden) antibonding-Zustand mit ihren zugehörigen

$$\begin{aligned} X_1^+ : E &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - |V_{\vec{G}_2}| e^{iG_2z/2} \cos\left(\frac{G_2z}{2}\right) \\ X_2^- : E &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + |V_{\vec{G}_2}| e^{iG_2z/2} \sin\left(\frac{G_2z}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.42)$$

Die nächst höheren Energiezustände zentrieren sich um $E = (\hbar^2/2m)(\sqrt{5}\pi/a)^2$ und gehören zu den zum X-Punkt nächstliegenden reziproken Gitterpunkten:

$$\begin{aligned} \vec{G}_1 &= \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0) & \vec{G}_2 &= \frac{2\pi}{a}(1, 0, 1) & \vec{G}_3 &= \frac{2\pi}{a}(-1, 0, 0) & \vec{G}_4 &= \frac{2\pi}{a}(-1, 0, 1) \\ \vec{G}_5 &= \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0) & \vec{G}_6 &= \frac{2\pi}{a}(0, 1, 1) & \vec{G}_7 &= \frac{2\pi}{a}(0, -1, 0) & \vec{G}_8 &= \frac{2\pi}{a}(0, -1, 1) \end{aligned} \quad (1.43)$$

Das periodische Potential spaltet die Energien folgendermassen auf. Wir projizieren die Basisfunktionen von (1.43) auf diejenigen der irreduziblen Darstellungen und finden ($G = 2\pi/a$):

Darstellung	$u_{\vec{k}=\pi(0,0,1)/a}(\vec{r})$	Entartung
X_1^+	$(\cos(Gx) + \cos(Gy))e^{iGz/2} \cos(Gz/2)$	1
X_3^+	$(\cos(Gx) - \cos(Gy))e^{iGz/2} \cos(Gz/2)$	1
X_5^+	$\{\sin(Gx)e^{-iGz/2} \sin(Gz/2), \sin(Gy)e^{iGz/2} \sin(Gz/2)\}$	2
X_2^-	$(\cos(Gx) + \cos(Gy))e^{iGz/2} \sin(Gz/2)$	1
X_4^-	$(\cos(Gx) - \cos(Gy))e^{iGz/2} \sin(Gz/2)$	1
X_5^-	$\{\sin(Gx)e^{iGz/2} \cos(Gz/2), \sin(Gy)e^{iGz/2} \cos(Gz/2)\}$	2

Diese Art der Analyse kann mit allen Symmetrielinien durchgeführt werden. Auf diese Weise erhält man ein gutes Bild der Symmetrien der Bänder. Natürlich spielt die spezifische Form des periodischen Potentials eine wichtige Rolle in der Aufspaltung der Entartung auf den Symmetriepunkten und -Linien.

1.4 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Entwicklung - effektive Massen

Um Symmetriepunkte, wie etwa um den Γ -Punkt herum, lassen sich die Bänder quadratisch in k_μ approximieren:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mu,\nu} \left(\frac{m}{m^*}\right)_{\mu\nu} k_\mu k_\nu + \dots \quad (1.44)$$

Wir betrachten diese Entwicklung in einer störungstheoretischen Formulierung. In Gleichung (1.17) betrachten wir eine Entwicklung um $\vec{k} = 0$. Damit ist

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V} + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} \widehat{V}) \cdot \widehat{p} \\ \mathcal{H}_1 &= \frac{\hbar}{m} \left(\widehat{p} + \frac{\hbar}{4mc^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} \widehat{V} \right) \cdot \vec{k} = \frac{\hbar}{m} \widehat{\pi} \cdot \vec{k} \\ \mathcal{H}_2 &= \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\end{aligned}\tag{1.45}$$

Der Hamilton-Operator \mathcal{H}_0 nehmen wir als "exakt" lösbar an und \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 sind die Störungen, wobei letztere nur aus einer reellen Konstante besteht. Für \mathcal{H}_0 gilt:

$$\mathcal{H}_0 |n0\rangle = \epsilon_n |n0\rangle\tag{1.46}$$

mit $|n0\rangle$ als Zustand bei $\vec{k} = 0$ und mit Bandindex n . Wir gehen von einem nicht entarteten Zustand $|n0\rangle$ aus. Dann ergibt sich aus der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie für die Energie,

$$E_{\vec{k}} = \epsilon_n + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n' \neq n} \sum_{\mu, \nu} \frac{\langle n0, | \widehat{\pi}_\mu | n'0 \rangle \langle n'0 | \widehat{\pi}_\nu | n0 \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} k_\mu k_\nu\tag{1.47}$$

was auf den Massentensor

$$\left(\frac{m}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \frac{2}{m} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n0 | \widehat{\pi}_\mu | n'0 \rangle \langle n'0 | \widehat{\pi}_\nu | n0 \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}}\tag{1.48}$$

führt. Damit lässt sich die Bandstruktur der Elektronen in der Nähe des Γ -Punktes durch einen Massentensor beschreiben. Diese Näherung gilt auch für andere Symmetriepunkte. Wir werden später sehen, dass diese Näherung sehr nützlich ist, wenn Elektronenzuständen in der Nähe von unteren oder oberen Rändern von Bändern wichtig sind. Beachte, dass an unteren (oberen) Bandrändern alle Eigenwerte des Massentensors $(m/m^*)_{\mu\nu}$ positiv (negativ) sind. Es gibt aber Symmetriepunkte (vorwiegend am Brillouin-Zonenrand), deren Massentensor Eigenwerte beider Vorzeichen haben. Man spricht hier von Sattelpunkten, die keine Extrema sind, aber im Zusammenhang mit van Hove-Singularitäten in der Zustandsdichte eine wichtige Rolle spielen.

Man beachte, dass es im Symmetriepunkt keine Korrektur zur Energie linear in \mathcal{H}_1 gibt, denn

$$\langle n0 | \widehat{\pi} | n0 \rangle = 0\tag{1.49}$$

wegen der Parität, da $\widehat{\pi}$ ein Tensor-Operator erster Ordnung ist.² Die resultierenden Auswahlregeln sind natürlich auch wesentlich für die Zustände $|n'0\rangle$, die in den Matrixelementen der Terme zweiter Ordnung auftreten. Die Eigenzustände lassen sich ebenfalls durch die Rayleigh-Schrödinger-Methode nähern:

$$|n\vec{k}\rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left\{ |n0\rangle + \frac{\hbar}{m} \sum_{n' \neq n} |n'0\rangle \frac{\langle n'0 | \widehat{\pi} \cdot \vec{k} | n0 \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} \right\}\tag{1.51}$$

Nun wenden wir uns noch dem Fall eines entarteten Niveaus am Γ -Punkt zu, wobei wir die Spin-Bahn-Kopplung hier vernachlässigen wollen. Wir betrachten den Fall des dreifach entarteten

²Es gilt für die Parität \hat{P} , dass $\hat{P} \widehat{\pi} \hat{P} = -\widehat{\pi}$ und $\hat{P}|n0\rangle = \pm|n\rangle$ ($|n0\rangle$ ist ein Zustand bestimmter Parität, falls das System die Inversionssymmetrie hat, was dann für die kleine Gruppe von $\vec{k} = 0$ auch gilt). Daraus folgt:

$$\langle n0 | \widehat{\pi} | n0 \rangle = -\langle n0 | \hat{P} \widehat{\pi} \hat{P} | n0 \rangle = -\langle n0 | \widehat{\pi} | n0 \rangle\tag{1.50}$$

so dass das Matrixelement verschwindet.

Niveaus Γ_4^- mit $|n_\mu 0\rangle$ ($\mu = x, y, z$). Die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie führt in diesem Fall auf die Diagonalisierung der 3×3 -Matrix:

$$H_{\mu\nu} = \frac{1}{m^2 \Delta E} \langle n_\mu 0 | \hat{p} \cdot \vec{k} | n 0 \rangle \langle n 0 | \hat{p} \cdot \vec{k} | n_\nu 0 \rangle \quad (1.52)$$

Dabei führen wir nur einen virtuellen Zustand $|n 0\rangle$ ein, der zu Γ_1 gehört. Es ist leicht zu sehen, dass diese Matrix die Form hat $H_{\mu\nu} = A k_\mu k_\nu$. Die Lösung der Säkuargleichung

$$\text{Det}(H_{\mu\nu} - E \delta_{\mu\nu}) = 0 \quad (1.53)$$

ergibt $E = 0$ (zweifach) $E = A \vec{k}^2$ (einfach)

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_0 + \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 + A \vec{k}^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \end{cases} \quad (1.54)$$

Aus dem dreifach entarteten Niveau ergeben sich Bänder verschiedener effektiver Masse, wobei zwei entartet sind. Durch diese einfache Betrachtung können wir die effektiven Massen an Bandrändern bestimmen und zudem sehen, wie Entartungen für eine gegebene \vec{k} -Richtung aufgehoben werden.

1.5 Bandstrukturen - Näherungsmethoden

Die Näherung der fast freien Elektronen gibt zwar ein qualitativ vernünftiges Bild der Bandstruktur. Aber sie beruht auf der Annahme, dass das periodische Potential schwach ist und als Störung betrachtet werden kann. Dies ist aber mit Sicherheit nicht so, denn die Kerne stellen eine sehr starkes Potential dar und die Näherung der Elektronen-Wellenfunktionen durch ebene Wellen mit kleinen Wellenvektoren wird der Tatsache nicht gerecht, dass diese Wellenfunktionen um die Kernpositionen herum starke Modulation erfahren.

1.5.1 Pseudopotential

Um diese Schwäche innerhalb der ebenen Wellenlösung zu vermindern, müssten wir sehr viele ebene Wellen überlagern, was in der Praxis für Berechnungen zu aufwendig ist. Eine alternative Methode geht davon aus, dass wir die Elektronenzustände in solche aufteilen, die tiefliegenden (gefüllten) Bändern entsprechen und den sogenannten Ionenrümpfen zugeordnet werden können, und solche, die den Valenz- und Leitungsbändern zugeordnet werden können, deren Wellenfunktionen ausgedehnt (und schwächer moduliert) sind. Die Rumpfelektronen liegen also eng am Kern und können näherungsweise durch die Atomorbitale eines isolierten Atomes beschrieben werden. Für ein Metall wie Aluminium (Al : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$) sind dies die $1s$ -, $2s$ - und $2p$ -Orbitale, während die $3s$ - und $3p$ -Orbitale eher zu den ausgedehnten Zuständen der Valenz- und Leitungsbänder gehören. Es sind die letzteren, die uns interessieren, da diese die Niederenergiephysik bestimmen.

Die Rumpfelektronen haben die Eigenzustände $|\phi_j\rangle$ mit $\mathcal{H}|\phi_j\rangle = E_j|\phi_j\rangle$. Die übrigen Zustände müssen orthogonal dazu sein, d.h. wir machen den Ansatz:

$$|\phi_{n,\vec{k}}\rangle = |\chi_{n,\vec{k}}\rangle - \sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \chi_{n,\vec{k}} \rangle \quad (1.55)$$

mit $|\chi_{n,\vec{k}}\rangle$ als orthonormales Set von Zuständen. Damit gilt $\langle \phi_{n,\vec{k}} | \phi_j \rangle = 0$ für alle j . Wir können für $|\chi_{n,\vec{k}}\rangle$ ebene Wellen nehmen. Dann nennt man $|\phi_{n,\vec{k}}\rangle$ orthogonalisierte ebene Welle

(OPW: orthogonalized plane waves). Die eigentlichen Blochfunktionen sind Superpositionen dieser OPW,

$$|\psi_{n,\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{G}} b_{\vec{k}+\vec{G}} |\phi_{n,\vec{k}+\vec{G}}\rangle \quad (1.56)$$

wobei die Koeffizienten $b_{\vec{k}+\vec{G}}$ schnell konvergieren, und nur eine kleine Zahl von OPW wird für eine gute Beschreibung notwendig sein.

Wir nehmen vorderhand $|\chi_{n\vec{k}}\rangle$ als beliebig an und betrachten die folgende Eigenwertgleichung:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}|\phi_{n\vec{k}}\rangle &= E_{n\vec{k}}|\phi_{n\vec{k}}\rangle \\ \Rightarrow \mathcal{H}|\chi_{n\vec{k}}\rangle - \sum_j \mathcal{H}|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\chi_{n,\vec{k}}\rangle &= E_{n\vec{k}} \left\{ |\chi_{n\vec{k}}\rangle - \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\chi_{n,\vec{k}}\rangle \right\} \\ \Rightarrow \mathcal{H}|\chi_{n\vec{k}}\rangle + \sum_j [E_{n\vec{k}} - E_j]|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\chi_{n,\vec{k}}\rangle &= E_{n\vec{k}}|\chi_{n\vec{k}}\rangle \end{aligned} \quad (1.57)$$

Wir führen den Operator $\hat{V}' = \sum_j [E_{n\vec{k}} - E_j]|\phi_j\rangle\langle\phi_j|$ ein (im reellen Raum ein Integraloperator), der ein nicht-lokales Potential beschreibt und von der Energie abhängt. Mit diesem schreiben wir die Eigenwertgleichung neu als

$$(\mathcal{H} + \hat{V}_{ps})|\chi_{n,\vec{k}}\rangle = (\mathcal{H}_0 + \hat{V} + \hat{V}')|\chi_{n,\vec{k}}\rangle = E_{n\vec{k}}|\chi_{n\vec{k}}\rangle. \quad (1.58)$$

Dies ist eine neue Eigenwertgleichung für die sogenannte Pseudo-Wellenfunktion (oder den Pseudo-Zustand) $|\chi_{n\vec{k}}\rangle$ anstelle des Bloch-Zustandes $|\psi_{n\vec{k}}\rangle$ mit dem modifizierten Potential

$$\hat{V}_{ps} = \hat{V} + \hat{V}' \quad (1.59)$$

das man Pseudopotential nennt. Nun ist $\hat{V} = V(\hat{r})$ als attraktive Kernpotential immer negativ. Andererseits ist $E_{n\vec{k}} > E_j$, so dass \hat{V}' immer positive Beiträge liefert. Daraus folgt, dass \hat{V}_{ps} schwächer ist als die beiden \hat{V} und \hat{V}' .

Man kann zu $|\chi_{n\vec{k}}\rangle$ beliebige Linearkombinationen von Rumpfungszuständen addieren, $\sum_j a_j |\psi_j\rangle$, ohne die Orthogonalität (1.55) zu verletzen. Daraus folgt, dass das Pseudopotential und die Pseudozustände nicht eindeutig festgelegt sind und im Prinzip so optimiert werden können (variationell bezüglich $\{a_j\}$), dass das Pseudopotential oder die Wellenfunktion eine möglichst geringe räumliche Modulation aufweist.

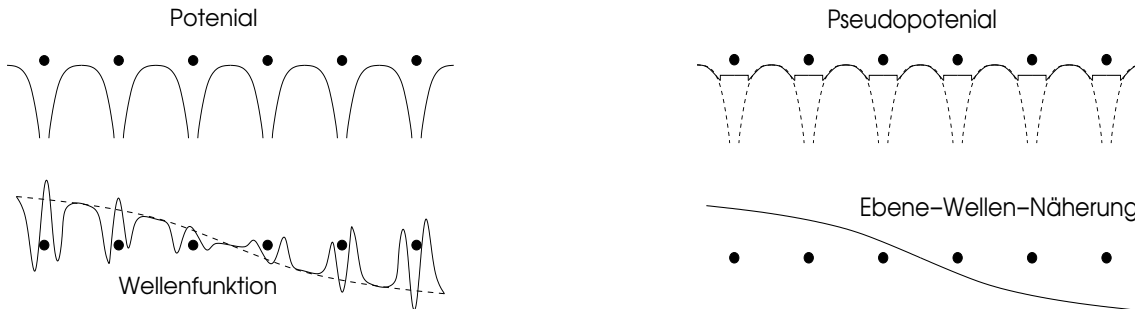


Abb. 1.5

Wenn wir nur an den Zuständen in einem beschränkten Energiebereich interessiert sind, können wir die Energieabhängigkeit des Pseudopotential vernachlässigen und V_{ps} einfach durch ein Standardpotential annähern (Fig. 1.4). Ein einfacher Ansatz ist das Beispiel eines atomaren Pseudopotentials, das von Ashcroft, Heine und Abarenkov (AHA) vorgeschlagen wurde. Hier wird für

das Potential des einzelnen Ions die Form

$$v_{ps}(r) = \begin{cases} V_0 & r < R_c \\ -\frac{Z_{ion}e^2}{r} & r > R_c \end{cases} \quad (1.60)$$

angenommen, wobei Z_{ion} als die Ladungszahl des Ionenrumpfes und R_c als effektiver Ionenradius, in dem sich die Rumpfelektronen aufhalten. Die Wahl von R_c und V_0 erfolgt durch Vergleich der atomaren Energieniveaus der äusseren Elektronen. Zum Beispiel für das Na-Atom bilden die $1s$ -, $2s$ - und $2p$ -Elektronen den Ionenrumpf. Durch Anpassung von R_c und V_0 ergibt sich aus dem Einteilchenproblem $\vec{p}^2/2m + v_{ps}(r)$ die korrekte Ionisierungsenergie des $3s$ -Elektrons. Andere flexiblere Ansätze erlauben es auch noch andere Messdaten in das Pseudopotential zu verarbeiten. Das Pseudopotential lässt sich aus den Beiträgen der einzelnen Atome zusammensetzen,

$$V_{ps}(\vec{r}) = \sum_n v_{ps}(\vec{r} - \vec{R}_n) \quad (1.61)$$

mit \vec{R}_n als Gittervektor. In der Methode fast freier Elektronen benötigen wir das Fouriertransformierte Potential für die reziproken Gittervektoren:

$$V_{ps, \vec{G}} = \frac{1}{\Omega} \int d^3r V_{ps}(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} = \frac{N}{\Omega} \int d^3r v_{ps}(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} . \quad (1.62)$$

Dies ist für die AHA-Form

$$V_{ps, \vec{G}} = -\frac{4\pi Z_{ion}e^2}{G^2} \left[\cos(GR_c) + \frac{V_0}{Z_{ion}e^2 G} \{ (R_c^2 G^2 - 2) \cos(GR_c) + 2 - 2R_c G \sin(GR_c) \} \right] \quad (1.63)$$

Für kurze reziproke Gittervektoren reduzieren die Nullstellen der trigonometrischen Funktionen auf der rechten Seite von (1.63) $V_{ps, \vec{G}}$. Für grosse G nimmt das Pseudopotential sowieso ab. Daher ist klar, dass damit das Pseudopotential schwächer wird als das reine Potential. Für komplexe Einheitszellen lässt sich das Pseudopotential auch schreiben als

$$V_{ps}(\vec{r}) = \sum_{n\alpha} v_\alpha(\vec{r} - (\vec{R}_n + \vec{R}_\alpha)) \quad (1.64)$$

wobei \vec{R}_α die Position des α -ten Basisatoms in der Einheitszelle bezeichnet. v_α ist das Pseudopotential des α -ten Ions. Im reziproken Raum gilt:

$$\begin{aligned} V_{ps, \vec{G}} &= \frac{N}{\Omega} \sum_\alpha e^{-i\vec{G} \cdot \vec{R}_\alpha} \int d^3r v_\alpha(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \\ &= \sum_\alpha e^{-i\vec{G} \cdot \vec{R}_\alpha} F_{\alpha, \vec{G}} \end{aligned} \quad (1.65)$$

Der Formfaktor $F_{\alpha, \vec{G}}$ enthält die Information der Basisatome. Man kann sie im Prinzip berechnen oder aus dem Experiment fitten.

1.5.2 APW-Methode (augmented plane wave)

Nun betrachten wir eine Methode, die 1937 von Slater eingeführt wurde. Sie stellt eine Weiterentwicklung der sogenannten Wigner-Seitz-Zellen-Methode (1933) dar. Es geht darum, dass Kristallpotential durch ein sogenanntes Muffin-Tin-Potential beschrieben wird. Dies ist ein periodisches Potential, das um jedes Atom bis zu einem Radius r_s als sphärisch symmetrisch ortsabhängig und ausserhalb dieser Zone als konstant angenommen wird. Diese Kugeln des Radius r_s im Gitter sind nicht überlappend und befinden sich vollständig innerhalb der Wigner-Seitz-Zelle

(Abb. 1.3).³ Die Idee ist nun, das Problem zellulär anzugehen. Innerhalb des Muffin-Tin-Radius wird das sphärische Problem gelöst und ausserhalb ist die Lösung eine ebene Welle. Die beiden müssen dann entsprechend zusammengesetzt werden.

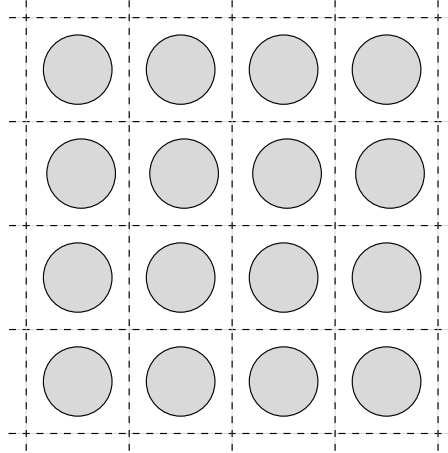


Abb. 1.6 Muffin-tin-Struktur

Wir können das sphärische Problem für $|\vec{r}| < r_s$ durch den Ansatz lösen:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.66)$$

wobei der radiale Teil die Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] u_l(r, E) = 0 \quad (1.67)$$

Wir definieren eine verbesserte ebene Welle (APW: augmented plane wave) $A(\vec{k}, \vec{r}, E)$ an, die eine reine ebene Welle mit Wellenvektor \vec{k} für \vec{r} ausserhalb der Muffin-Tin-Kugeln ist. Wir verwenden dafür die Darstellung der ebenen Welle durch Kugelfunktionen,

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}}) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) \quad (1.68)$$

wobei $j_l(x)$ die l -te sphärische Besselfunktion ist. Dann parametrisieren wir

$$A(\vec{k}, \vec{r}, E) = \begin{cases} \frac{4\pi}{\sqrt{\Omega_{EZ}}} \sum_{l,m} i^l j_l(kr_s) \frac{r_s u_l(r, E)}{r u_l(r_s, E)} Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}}) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) & \text{innerhalb der Muffin-Tin-Kugeln} \\ \frac{4\pi}{\sqrt{\Omega_{EZ}}} \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}}) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) & \text{ausserhalb der Muffin-Tin-Kugeln} \end{cases} \quad (1.69)$$

mit Ω_{EZ} als Volumen der Einheitszelle. Beachte, dass diese Wellenfunktion bei $r = r_s$ stetig ist, aber im allgemeinen keine stetige Ableitung hat. Wir können analog zur fast-freien Elektronen-Methode folgende Entwicklung vornehmen:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} a_{\vec{G}}(\vec{k}) A(\vec{k} + \vec{G}, \vec{r}, E) \quad (1.70)$$

³Die Wigner-Seitz-Zelle ist das Analoge zur Brillouin-Zone im reellen Raum. Jede Verbindungsstrecke zwischen Atomen (einfacher Einheitszelle) wird durch eine senkrechte Ebene halbiert. Die kleinste Zelle um ein Atom, die durch solche Ebenen eingeschlossen heisst Wigner-Seitz-Zelle.

mit \vec{G} als reziproke Gittervektoren. Die unbekanntenen Koeffizienten werden in einer variationellen Art bestimmt, indem wir folgendes Gleichungssystem ansetzen

$$\sum_{\vec{G}} \langle A_{\vec{k}}(E) | \mathcal{H} - E | A_{\vec{k}+\vec{G}}(E) \rangle a_{\vec{G}}(\vec{k}) = 0 \quad (1.71)$$

wobei

$$\langle A_{\vec{k}}(E) | \mathcal{H} - E | A_{\vec{k}'}(E) \rangle = \left(\frac{\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{k}'}{2m} - E \right) \Omega_{EZ} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} + V_{\vec{k}, \vec{k}'}, \quad (1.72)$$

mit

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = 4\pi r_s^2 \left\{ - \left(\frac{\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{k}'}{2m} - E \right) \frac{j_1(|\vec{k} - \vec{k}'| r_s)}{|\vec{k} - \vec{k}'|} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} (2l+1) P_l(\hat{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{k}'}) j_l(k r_s) j_l(k' r_s) \frac{u'_l(r_s, E)}{u_l(r_s, E)} \right\}. \quad (1.73)$$

Hier $P_l(z)$ ist das l -te Legendre-Polynom und $u' = du/dr$. Diese Gleichung (1.71) wird gelöst und liefert die Energiebänder. Die Schwierigkeit liegt in der guten Approximation des Kristallpotentials durch das Muffin-Tin-Potential und der Berechnung der Matrixelemente in (1.71). Der grosse Vorteil ergibt sich durch die schnelle Konvergenz. Nur einige Dutzend \vec{G} -Vektoren sind notwendig und der grösste Drehimpuls liegt bei $l \approx 5$. Ein weiterer positiver Aspekt hat mit dem Anwendungsbereich zu tun. Die APW-Methode erlaubt es zwischen den Situationen sehr ausgedehnter, schwach gebundener Elektronenzustände und eher stark gebundenen Zuständen zu interpolieren.

1.6 Starkgebundene Elektronen und die Wannier-Funktionen

Falls die Elektronen der Valenz- und Leitungsbänder sehr stark an die Ionen gebunden sind, gibt es eine weitere sehr effiziente Näherung. Es ist dann besser vom reziproken Raum zu einer Darstellung im reellen Raum überzugehen. Dies führt auf das sogenannte Modell starker Bindung (tight-binding model).

Wir führen die Wannier-Funktionen als "Fourier-transformierte" der Bloch'schen Wellenfunktionen ein:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} w(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (1.74)$$

wobei $w(\vec{r} - \vec{R}_j)$ die Wannier-Funktion für das Atom j ist. Natürlich hat jedes atomare Orbital eine Wannier-Funktion. Wir beschränken uns hier jedoch auf den Fall eines einzelnen Orbitals. Die Wannier-Funktionen sind orthogonal im Sinne:

$$\int d^3r w^*(\vec{r} - \vec{R}_j) w(\vec{r} - \vec{R}_l) = \delta_{jl} \quad (1.75)$$

Wir können nun den Hamilton-Operator des Systems für ein Teilchen annehmen als $\mathcal{H} = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 / 2m + V(\vec{r})$, wobei das Potential periodisch ist. Dann gilt

$$\epsilon_{\vec{k}} = \int d^3r \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \mathcal{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{j,l} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_l)} \int d^3r w^*(\vec{r} - \vec{R}_j) \mathcal{H} w(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad (1.76)$$

mit

$$\epsilon_0 = \int d^3r w^*(\vec{r} - \vec{R}_j) \mathcal{H} w(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (1.77)$$

$$t_{jl} = \int d^3r w^*(\vec{r} - \vec{R}_j) \mathcal{H} w(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad \text{für } j \neq l.$$

Daraus folgt unmittelbar, dass die Bandenergie durch folgende diskrete Summe geschrieben werden kann

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_0 + \frac{1}{N} \sum_{j,l} t_{jl} e^{-i\vec{k}c(\vec{R}_j - \vec{R}_l)} = \epsilon_0 + \sum_l t_{0l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l}, \quad (1.78)$$

wobei $\vec{R}_0 = 0$ angenommen wird. Es ist klar, dass $\epsilon_{\vec{k} + \vec{G}} = \epsilon_{\vec{k}}$. Die Grössen t_{jl} werden *Hüpfmatrixelemente* genannt. Es ist nämlich möglich daraus einen effektiven Hamilton-Operator zu formulieren, der die Bandstruktur der unabhängigen Elektronen beschreibt:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \sum_s t_{ij} c_{is}^\dagger c_{js} \quad (1.79)$$

wobei c_{is} (c_{is}^\dagger) ein Elektron mit Spin s am Gitterpunkt i vernichtet (erzeugt). Damit beschreibt dieser Hamilton-Operator das Hüpfen von Elektronen vom Punkt j zum Punkt i .

Betrachten wir ein einfach-kubisches Gitter und nehmen an, dass $t_{jl} = -t$ für nächste Nachbarn und 0 für alle anderen, dann erhalten wir

$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_0 - 2t\{\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\} \quad (1.80)$$

wobei a die Gitterkonstante ist. Für andere Gitter können wir analoge Bandstrukturen erhalten. Die Hüpfmatrixelemente können oft aus einfachen Überlegungen für spezifische Ionengitter auch im Falle mehrerer relevanter Orbitale hergeleitet werden.

1.7 Semiklassische Beschreibung der Bandelektronen

Das Ehrenfest Theorem der Quantenmechanik zeigt, dass die Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators Gleichungen erfüllen, die der Newton'schen Mechanik ähnlich sind. Eine analoge Formulierung gilt auch für die Elektronen im periodischen Potential, wobei wir davon ausgehen, dass ein Elektron als Teilchen durch ein Wellenpaket beschrieben wird, dessen Wellenfunktion die Form hat

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}'} g_{\vec{k}}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r} - i\epsilon_{\vec{k}'} t}, \quad (1.81)$$

wobei $g_{\vec{k}}(\vec{k}')$ um \vec{k} mit einer Breite Δk zentriert ist. Um innerhalb des Bandbildes eine sinnvolle Näherung zu haben, sollte Δk viel kleiner als die Ausdehnung der Brillouin-Zone sein: $\Delta k \ll 2\pi/a$ was mit der Heisenberg'schen Unschärfe-Relation $\Delta k \Delta x > 1$ dazu führt, dass das Wellenpaket über viele Einheitszellen des Gitters ausgedehnt ist: $\Delta x \gg a/2\pi$. Ferner sollen die angelegten elektrischen und magnetischen Felder klein genug sein, um nicht Übergänge zwischen verschiedenen Bändern zu induzieren. Diese Bedingung ist in der Praxis nicht sehr restriktiv.

1.7.1 Semiklassische Bewegungsgleichungen

Ohne einen Beweis führen wir die Regeln der semiklassischen Formulierung der Elektronenbewegung ein, wenn ein elektrisches und ein magnetisches Feld angelegt wird:

- Der Bandindex eines Elektrons ist eine Erhaltungsgrösse. Es gibt keine Übergänge zwischen verschiedenen Bändern.
- Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \quad (1.82)$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e\vec{E}(\vec{r}, t) - \frac{e}{c} \vec{v}_n(\vec{k}) \times \vec{H}(\vec{r}, t)$$

- Alle Elektronenzustände haben ihren Wellenvektor innerhalb der ersten Brillouin-Zone, da \vec{k} und $\vec{k} + \vec{K}$ demselben Zustand entsprechen (\vec{K} : reziproker Gittervektor).
- Im thermischen Gleichgewicht ist die Dichte der Elektronen im n -ten Band im Volumenelement d^3k bei \vec{k} gegeben durch

$$n_F(\epsilon_n(\vec{k})) \frac{d^3k}{4\pi^3} = \frac{1}{e^{(\epsilon_n(\vec{k}) - \mu)/k_B T} + 1} \frac{d^3k}{4\pi^3}, \quad (1.83)$$

wobei $d^3k/4\pi^3 = 2d^3k/(2\pi)^3$ entspricht mit der "2" für die beiden möglichen Spinzustände des Elektrons.

Beachte, dass $\hbar\vec{k}$ nicht den Impuls des Elektrons darstellt, sondern den sogenannten Gitterimpuls der Bloch'schen Band-Theorie und daher mit dem Eigenwert des Zustandes bei der Gitter-Translationsoperation zusammenhängt. Daher entspricht die rechte Seite der zweiten Gleichung in (1.82) nicht der Kraft, die auf das Elektron wirkt, denn wir haben hier das periodische Potential des Ionengitters nicht miteingeschlossen. Dessen Effekt kommt in der Form der Bandenergie $\epsilon_n(\vec{k})$ ins Spiel (Das Wellenpaket ist viel grösser als die Gitterkonstante).⁴

Ein Plausibilitätsargument führt auf die zweite Gleichung in (1.82), indem wir nämlich die Energieerhaltung heranziehen. Die zeitliche Ableitung von

$$E = \epsilon_n(\vec{k}(t)) - e\phi(\vec{r}(t)) \quad (1.86)$$

muss verschwinden:

$$0 = \frac{dE}{dt} = \frac{\partial \epsilon_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \cdot \dot{\vec{k}} - e\vec{\nabla}\phi \cdot \dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) \cdot \left\{ \hbar\dot{\vec{k}} - e\vec{\nabla}\phi \right\}. \quad (1.87)$$

Daraus folgt (1.82) wobei der Anteil der Lorentzkraft dadurch erlaubt ist, dass er senkrecht auf der Geschwindigkeit \vec{v}_n steht.

1.7.2 Stromdichten

Wir werden später sehen, dass der stationäre Zustand eines homogenen elektronischen Zustandes durch die Impulsverteilung $n(\vec{k})$ beschrieben werden kann. Damit lässt sich die Stromdichte ausrechnen.

$$\vec{j} = -2e \int_{BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{v}(\vec{k}) n(\vec{k}) = -2e \int_{BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n(\vec{k}) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (1.88)$$

wobei das Integral über alle \vec{k} in der Brillouinzone läuft und der Faktor 2 für die beiden Spinzustände des Elektrons steht, die beide zu gleichen Teilen beitragen.

Es ist offensichtlich, dass ein leeres Band keine Stromdichte liefert. Dass dies auch so ist für ein komplett gefülltes Band, wird klar wenn wir betrachten, dass für $n(\vec{k}) = 1$ folgt:

$$\vec{j} = -2e \int_{BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = 0 \quad (1.89)$$

⁴*Bloch-Oszillation:* Die Tatsache, dass die Bandenergie $\epsilon(\vec{k})$ eine periodische Funktion von \vec{k} ist führt auf ein seltsames Oszillationsverhalten. Im eindimensionalen Fall betrachten wir als Beispiel die Bandenergie $\epsilon_k = -2 \cos ka$, die in einem homogenen elektrischen Feld E auf die folgende Lösung der semiklassischen Gleichungen (1.82) führt:

$$\hbar\dot{k} = -eE \quad \Rightarrow \quad k = -\frac{eEt}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \dot{x} = -\frac{2a}{\hbar} \sin\left(\frac{eEa t}{\hbar}\right), \quad (1.84)$$

woraus folgt, dass die Position x des Elektrons oszilliert,

$$x(t) = \frac{1}{eE} \cos\left(\frac{eEa t}{\hbar}\right). \quad (1.85)$$

Dies nennt man Bloch-Oszillation und bedeutet, dass das Elektron im elektrischen Feld sich nicht in eine Richtung bewegt, sondern um eine Position herum oszilliert. Dieses Verhalten kann nur unter sehr speziellen Bedingungen beobachtet werden. Normalerweise zerstört Dämpfung oder Streuung die Oszillation.

weil $\epsilon(\vec{k})$ periodisch in der Brillouinzone ist, d.h. $\epsilon(\vec{k} + \vec{K}) = \epsilon(\vec{k})$ mit \vec{K} als reziprokem Gittervektor. Daher können leere und ganz gefüllte Bänder keinen elektrischen Strom tragen.

Ein interessanter Aspekt der Bandtheorie ist das Bild der Löcher. Wir berechnen wieder die Stromdichte für ein partiell gefülltes Band innerhalb der semiklassischen Näherung:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -e \int_{BZ} \frac{d^3k}{4\pi^3} n(\vec{k}) \vec{v}_n(\vec{k}) = -e \left\{ \int_{BZ} \frac{d^3k}{4\pi^3} \vec{v}(\vec{k}) - \int_{BZ} \frac{d^3k}{4\pi^3} [1 - n(\vec{k})] \vec{v}(\vec{k}) \right\} \\ &= +e \int_{BZ} \frac{d^3k}{4\pi^3} [1 - n(\vec{k})] \vec{v}(\vec{k}). \end{aligned} \tag{1.90}$$

Dies bedeutet, dass wir die Stromdichte über die Elektronen in den besetzten Zuständen mit Ladung $-e$ bestimmen können, oder aber über die "Löcher" (positive Ladung), die fehlenden Elektronen, in den unbesetzten Zuständen. Beide Beschreibungen sind in der Bandtheorie äquivalent. Es ist jedoch üblicherweise einfacher mit Löchern zu arbeiten, wenn ein Band fast gefüllt ist. Umgekehrt eignet sich das Elektronbild sicher besser für eine schwach gefülltes Band.

1.8 Metalle und Halbleiter

Jeder Zustand $|\psi_{n,\vec{k}}\rangle$ kann mit zwei Elektronen besetzt sein, je eines mit $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$. Die Zahl der Elektronen pro Einheitszelle bestimmt den Grundzustand, bei dem alle Zustände bis zur Fermienergie gefüllt werden. Da diese Zahl normalerweise ganzzahlig ist, ergibt sich, dass im einfachsten Fall der Bandstruktur zwei unterschiedliche Situationen auftreten können. Einerseits können die Bänder entweder ganz leer oder ganz gefüllt sein. Dies ist der Fall, wenn wir eine gerade Anzahl Elektronen pro Einheitszelle haben. Dann liegt die "Fermienergie" in einer Bandlücke, und man benötigt eine endliche Energie, Elektronen hinzuzufügen oder zu entnehmen, oder eine Ladungsanregung zu erzeugen. Falls die Bandlücke $\Delta \ll$ Bandbreite ist, dann sprechen wir von einem *Halbleiter*. Für $\Delta \sim$ Bandbreite handelt es sich eher um einen *Isolator*. Dies impliziert natürlich auch, dass bei Temperaturen $k_B T \ll \Delta$ keine Bewegung der Elektronen möglich ist. Das oberste gefüllte Band wird *Valenzband* und das unterste leere Band *Leitungsband* genannt.

Für eine ungerade Anzahl Elektronen hingegen, gibt es ein halbgefülltes Band. Dann ist das System ein *Metall*, da hier Ladungsanregungen ohne die Überwindung einer Energielücke möglich ist. Hier bleiben die Elektronen auch bei beliebig tiefer Temperatur beweglich. Das Paradebeispiel für solche Metalle sind die Alkali-Metalle in der ersten Kolonne der Periodentable (Li, Na, K, Rb, Cs), da diese eine Konfiguration [Edelgas] $(ns)^1$ besitzen und so ein bewegliches Elektron pro Ion besitzen.

Im allgemeinen sind die Bandstrukturen aber komplexer. Verschiedene Bänder müssen nicht durch Energielücken getrennt sein, sondern können überlappen. Dies geschieht insbesondere, wenn verschiedene Orbital m Aufbau der Bandstruktur involviert sind. In diesen Systemen können die Bänder auch fraktionell (nicht ganz oder halb) gefüllt sein. So kommt zum Beispiel der metallische Charakter der Erdalkali-Metalle zustande (zweite Kolonne der Periodentabelle (Be, Mg, Ca, Sr, Ba)), die zwei *s*-Elektronen pro Einheitszelle besitzen.

Es gibt Situationen in der Bandstruktur in denen eine Lücke zwischen zwei Bändern verschwindet, da sich zwei Bänder überlappen. Dies kann passieren, wenn mehrere elektronische Orbitale im Aufbau der Bandstruktur involviert sind. Wenn die Zahl der Elektronen pro Orbital gerade ist, dann wird durch den Bandüberlapp das untere Band eine gewisse Zahl von Elektronen verlieren, da diese ins obere Band gehen. Die Bänder sind fraktionell gefüllt. In dieser Weise kommt zum Beispiel das metallische Verhalten der Erdalkali-Metalle (Be, Mg, Ca, Sr, ...) zustande. Falls der Überlapp zwischen zwei Bändern sehr klein ist, sprechen wir von einem Halbmatal. Graphit ist ein Beispiel, wo sich die Bänder nur berühren und Zahl der Elektronen an der Fermienergie verschwindet, obwohl keine Energielücke vorhanden ist.

Kapitel 2

Halbleiter

Halbleiter haben eine immense technologische Bedeutung. Wir wollen hier einen Überblick über einige der einfachsten Eigenschaften geben. Halbleiter unterscheiden sich von Metallen und Isolatoren durch die elektrische Leitfähigkeit. Gewöhnliche Metalle besitzen bei allen Temperaturen eine endliche (gute) Leitfähigkeit, die im allgemeinen ansteigt, wenn wir die Temperatur senken. Im Gegensatz dazu sinkt die Leitfähigkeit in Halbleitern und Isolatoren bei Abkühlung (Abb. 2.1).

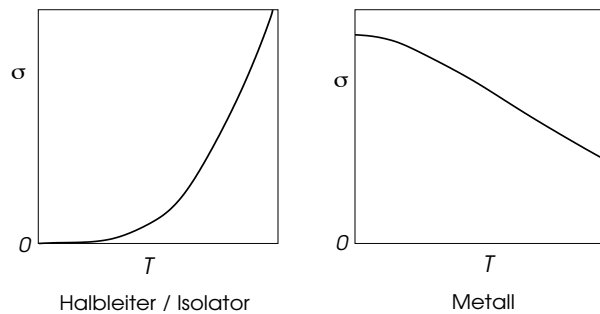


Abb. 2.1: Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit für Halbleiter und Metalle.

Wie wir später sehen werden, können wir die Leitfähigkeit schreiben als

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}, \quad (2.1)$$

wobei n die Dichte der mobilen Elektronen ist, τ die mittlere Stosszeit der Elektronen, m und e sind die Elektronen-Masse bzw. -Ladung. In Metallen kann n als temperaturunabhängig betrachtet werden, während τ mit steigender Temperatur abnimmt und so die Temperaturabhängigkeit bestimmt. Bei Isolatoren und Halbleitern hingegen gibt es bei $T = 0$ keine mobilen Ladungen. Bewegliche Ladungen kommen nur durch thermische Anregung zustande, indem Elektronen aus dem Valenz- ins Leitungsband überführt werden:

$$n \sim 10^{20} \text{cm}^{-3} \left(\frac{T}{300\text{K}} \right) e^{-\Delta/k_B T} \quad (2.2)$$

wobei Δ die Energielücke ist.¹ Für Isolatoren sind die Energielücken gross, z.B. 5.5 eV bei Diamant. Dies ergibt bei Raumtemperatur ($T = 300\text{K}$) eine Ladungsdichte $n \sim 10^{-73} \text{cm}^{-3}$.

¹Eigentlich müssen wir dabei sowohl die thermisch angeregten Elektronen in Leitungsband als auch die Löcher im Valenzband mit zählen, da der elektrische Strom aus beiden besteht:

$$\vec{j} = (\sigma_+ + \sigma_-) \vec{E} \quad \text{mit} \quad \sigma_{\pm} = \frac{n_{\pm} e^2 \tau_{\pm}}{m_{\pm}}; \quad (2.3)$$

+ und - stehen für Löcher bzw. Elektronen ($n_+ = n_-$). Beachte, dass Valenz- und Leitungsband im Allgemeinen nicht dieselben effektiven Massen und Stosszeiten haben.

Hingegen liegt diese Grösse bei Halbleitern mit einer Energielücke von 0.5 - 1 eV bei $n \sim 10^{11} - 10^3 \text{ cm}^{-3}$. Dies ergibt einen gigantischen Unterschied in der Leitfähigkeit. In beiden Fällen ist die Leitfähigkeit im Vergleich zu Metallen ($n \sim 10^{23} - 10^{24} \text{ cm}^{-3}$) jedoch gering. Eine geringe Menge von Verunreinigungen (sogenannte Akzeptoren und Donatoren) lässt sich die Leitfähigkeit der Halbleiter bei Raumtemperatur in einer ganz bestimmten Weise ändern, die für ihre Anwendungen als Bauelemente sehr wichtig ist.

2.1 Bandstruktur der Elemente der Gruppe IV

2.1.1 Kristall- und Bandstruktur

Der wichtigste Halbleiter für Anwendungen ist Silizium Si, das zusammen mit Kohlenstoff C, Germanium Ge und Zinn Sn zur Gruppe IV gehört. In der äussersten Schale besitzen diese Elemente 4 Elektronen in der $(ns)^2(np)^2$ ($C n = 2$, $Si n = 3$, $Ge n = 4$ und $Sn n = 5$). Der Kristall hat die Diamantstruktur, d.h. ein kubisch flächenzentriertes Gitter mit einer zweiatomigen Basis bei (000) und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ (bei Sn ist dies der sogenannte α -Sn). Diese Kristallstruktur wird dadurch stabilisiert, dass die 4 Valenzelektronen durch Hybridisierung gerichtete Orbitale für kovalente Bindungen erzeugen können:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |ns\rangle + |np_x\rangle + |np_y\rangle + |np_z\rangle, & |\psi_2\rangle &= |ns\rangle + |np_x\rangle - |np_y\rangle - |np_z\rangle, \\ |\psi_3\rangle &= |ns\rangle - |np_x\rangle + |np_y\rangle - |np_z\rangle, & |\psi_4\rangle &= |ns\rangle - |np_x\rangle - |np_y\rangle + |np_z\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dadurch bilden sie einen Tetraheder, welcher optimal zur Diamantstruktur passt.

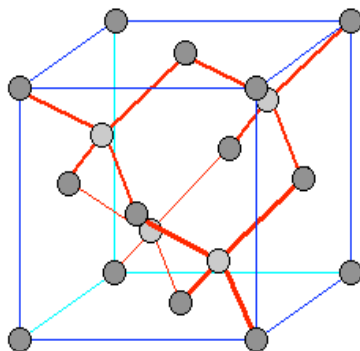


Abb. 2.2: Kristallstruktur des Diamanten (kubisch flächenzentriert).

Eine einfache Ansicht der Bandstruktur um den Γ -Punkt erhalten wir wie im letzten Kapitel durch die freie Elektronen Näherung. Es gibt ein parabolisches Band, dass in der Brillouin-Zone bei (000) zentriert ist. Dieses gehört zur Darstellung Γ_1 . Das nächste Multiplet bei der Energie $\epsilon = 6\pi^2\hbar^2/ma^2$ ergibt sich aus parabolischen Bändern der Nachbar-Brillouin-Zonen mit $\vec{G} = (2\pi/a)(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$. Beachte, dass das reziproke Gitter des kubisch flächenzentrierten Gitters kubisch raumzentriert ist. Diese 8 Zustände spalten dann auf in $\Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$. Die Ordnung der resultierenden Energien erfordert Bandstrukturrechnung: $\epsilon_{\Gamma_5} < \epsilon_{\Gamma_4} < \epsilon_{\Gamma_2} < \epsilon_{\Gamma_1}$. Die folgende Graphik gibt die wesentlichen Elemente der niederenergetischen Bandstruktur für C und Si wieder.

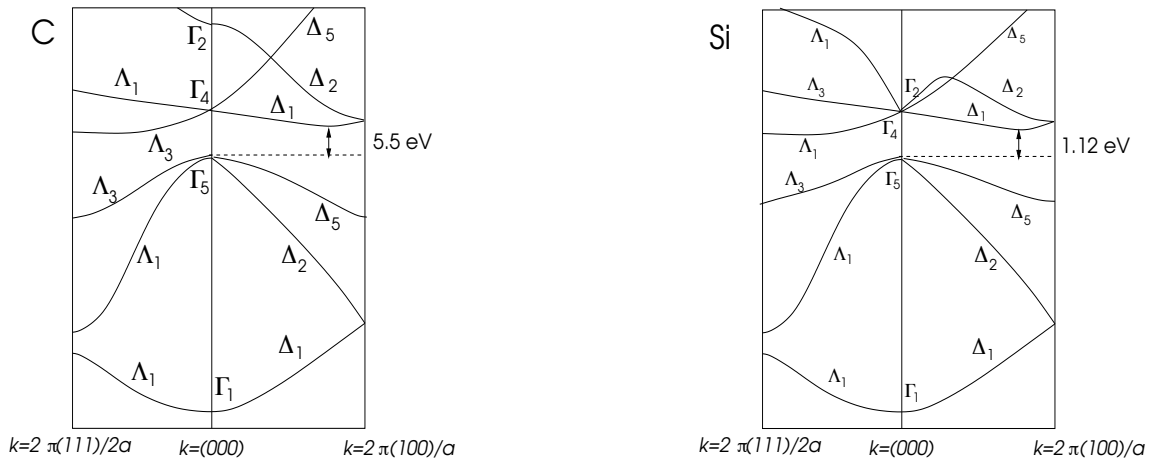


Abb. 2.3: Bandstruktur von Diamant (C) und Silizium.

Die Zahl der Elektronen pro Einheitszelle ist 8. Daraus ergibt sich, dass die Bänder, die zu Γ_1 (einfach entartet) und Γ_5 (dreifach entartet) gehören, ganz gefüllt sind. Die obere Kante des Valenzbandes liegt am Γ -Punkt in der Brillouinzone und entspricht Γ_5 . Damit haben wir die Situation eines Halbleiters, denn zum Leitungsband existiert eine Energielücke. Diese ist *indirekt*, d.h. der kleinste Energiewert der Lücke ergibt sich zwischen dem Γ -Punkt des Valenzbandes und einem endlichen Impuls $\hbar \vec{k}_0$ entlang der $[100]$ -Richtung.²

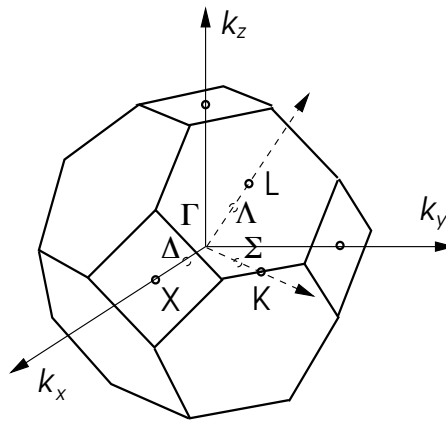
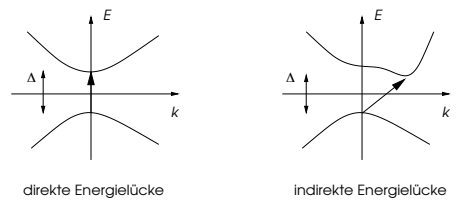


Abb. 2.4: Brillouin-Zone des kubisch flächenzentrierten Gitters (reziprokes Gitter ist kubisch raumzentriert).

²Wir bezeichnen Energielücken in Halbleiter und Isolatoren als *direkt* und *indirekt*, wenn der Wellenvektor, der in der Brillouinzone den höchsten Punkt des Valenzbandes mit dem tiefsten Punkt des Leitungsbandes verbindet, verschwindet bzw. endlich ist.



Einige Fakten zu den wichtigen Halbleitern:

- Kohlenstoff hat eine Energielücke von ca. 5.5 eV und entspricht Diamant. Die grosse Energielücke ist dafür verantwortlich, dass Diamanten für sichtbares Licht ($\sim 1.5 - 3.5$ eV) transparent ist, da in diesem Energiebereich keine optische Absorption möglich ist.
- Silizium hat eine wesentlich kleinere indirekte Energielücke von 1.12 eV.
- Germanium hat eine indirekte Lücke von 0.67 eV.
- GaAs ist ein weiterer wichtiger Halbleiter der sich aus einem III- und einem V-Element zusammensetzt. Im Gegensatz zu C, Si und Ge ist hier die Energielücke direkt.

Die Tatsache, dass C, Si oder Ge Halbleiter sind lässt sich auch in einem einfachen Bild plausibel machen. Alle gerichteten Bindungen in der Diamantstruktur sind kovalent und schliessen zwei Elektronen ein. Die Bindungen entsprechen sogenannten Bonding-Konfigurationen. Wir können die Bindung durch die Molekülorbitale (Hund-Mullikan) beschreiben, d.h. als Überlagerung von zwei Orbitalen, die je einem der beiden benachbarten Atomen (A und B) zugeordnete werden kann: $\psi_A(\vec{r})$ und $\psi_B(\vec{r})$, die den gerichteten Orbitalen (2.4) entsprechen und im wesentlichen Wannier-Wellenfunktionen sind. Dann ergeben sich für die Molekülorbitale:

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_A(\vec{r}) \pm \psi_B(\vec{r}) \} \quad (2.5)$$

Die beiden Elektronen, die für die Bindung zur Verfügung stehen, gehen als Spin-Singulett in den Zustand $\Psi_+(\vec{r})$, den energetisch günstigen Bonding-Zustand, während der energetische viel höhere Antibonding-Zustand $\Psi_-(\vec{r})$ leer bleibt. Die Elektronen im Bonding-Zustand bleiben lokalisiert. Würde ein Elektron sich aus dem Bonding-Zustand loslösen und sich im Kristall herumbewegen, dann müsste es sich in die Antibonding-Zustände begeben, die noch unbesetzt sind. Dies ist jedoch mit einem Energieaufwand verbunden, der schliesslich eine Energielücke ergibt. Abhängig von der Energiedifferenz zwischen Bonding- und Antibonding-Zustand und der kinetischen Energie, die ein bewegliches Elektron gewinnen kann, wird die Lücke gross oder klein sein, oder sogar verschwinden.

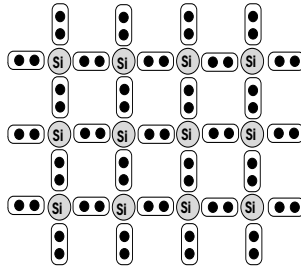


Abb. 2.5: Schematische elektronische des Halbleiters mit kovalenten Bindungen.

2.1.2 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ - oder effektive Massen-Näherung

Die Bandstruktur in der Nähe der Bandränder kann sehr gut durch die $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Methode beschrieben werden. Wir zeigen dies hier für den Fall von Silizium. Betrachten wir zuerst das Valenzband mit Maximum bei $\vec{k} = 0$ (Γ -Punkt), wo die die Elektronenzustände zur Darstellung Γ_5^+ gehören:

$$\{ |yz\rangle, |zx\rangle, |xy\rangle \}. \quad (2.6)$$

Innerhalb dieser entarteten Basis erhalten wir folgende Säkulargleichung (2. Ordnung Störungsrechnung):

$$\det \begin{bmatrix} ak_x^2 + b(k_y^2 + k_z^2) - E & ck_x k_y & ck_x k_z \\ ck_x k_y & ak_y^2 + b(k_x^2 + k_z^2) - E & ck_y k_z \\ ck_x k_z & ck_y k_z & ak_z^2 + b(k_x^2 + k_y^2) - E \end{bmatrix} = 0 \quad (2.7)$$

Die allgemeinen Eigenwerte sind kompliziert und es zeigt sich, dass es die dreifache Entartung aufgehoben wird, wenn wir uns vom Γ -Punkt entfernen. Für die Symmetrie-Achsen Δ (C_{4v}) und Λ (C_{3v}) jedoch gibt es immer noch ein zweifach entartetes neben einem nicht entarteten Band (siehe Abb. 2.3):

$$\begin{aligned} \Delta\text{-Linie } \vec{k} = k(1, 0, 0) \quad E_1(\Delta_2) = ak^2, \quad E_{2,3}(\Delta_5) = bk^2 \\ \Lambda\text{-Linie } \vec{k} = \frac{k}{\sqrt{3}}(1, 1, 1) \quad E_1(\Lambda_1) = (a + 2b + 2c)k^2, \quad E_{2,3}(\Lambda_3) = (a + 2b - c)k^2 \end{aligned} \quad (2.8)$$

Wir haben Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt. Diese würde (inklusive Spin) zu einer Aufspaltung bei $k = 0$ zu einem zweifach entarteten Niveau (Γ_6^+) und einem vierfach entarteten Niveau (Γ_8^+) führen.

Für das Leitungsband liegt der untere Bandrand entlang der Δ -Achsen bei $\vec{k}_0 = k_0(100)$ mit $k_0 \approx 0.8\overline{\Gamma X}$. Das entsprechende Band ist nichtentartet bis auf den Spin. Damit ist die $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Näherung aufgrund der Symmetrie um $\vec{k}_0 = k_0(100)$ gegeben durch

$$E_{\vec{k}} = a'(k_x - k_0)^2 + b'(k_y^2 + k_z^2). \quad (2.9)$$

Die elektronischen Eigenschaften werden durch die Zustände an diesen Bandrändern bestimmt, so dass diese Näherungen eine wichtige Rolle spielen.

2.2 Eigenschaften der Elektronen und elementare Anregungen

Wir betrachten hier ein einfaches Zweiband-Modell, das uns die wesentlichen Eigenschaften des Anregungsspektrums eines Halbleiters zeigt. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}, s} \epsilon_{V, \vec{k}} \hat{c}_{V, \vec{k} s}^\dagger \hat{c}_{V, \vec{k} s} + \sum_{\vec{k}, s} \epsilon_{L, \vec{k}} \hat{c}_{L, \vec{k} s}^\dagger \hat{c}_{L, \vec{k} s} \quad (2.10)$$

mit $\epsilon_{V, \vec{k}}$ und $\epsilon_{L, \vec{k}}$ als Bandenergien für das Valenz- bzw. Leitungsband. Ferner erzeugt (vernichtet) der Operator $c_{n \vec{k} s}^\dagger$ ($c_{n \vec{k} s}$) ein Elektron mit (Pseudo-)Impuls \vec{k} und Spin s im Band n ($n = V, L$). Der Grundzustand entspricht dem komplett gefüllten Valenzband:

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\vec{k}, s} \hat{c}_{V, \vec{k} s}^\dagger |0\rangle \quad (2.11)$$

wobei das Produkt über alle Wellenvektoren der ersten Brillouinzone führt und $|0\rangle$ das Vakuum darstellt. Die Energie ist

$$E_0 = 2 \sum_{\vec{k}} \epsilon_{V, \vec{k}}. \quad (2.12)$$

Dieser Grundzustand hat verschwindenden totalen Impuls und totalen Spin.

2.2.1 Elektron-Loch-Anregung

Eine einfache Anregung des Systems ergibt sich dadurch, dass man ein Elektron aus dem Valenzband entfernt (d.h. ein Loch erzeugt) und es in einen Zustand des Leitungsbandes einsetzt:

$$|L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s'\rangle = c_{L, \vec{k} + \vec{q}, s}^\dagger c_{V, \vec{k}, s'} |\Phi_0\rangle \quad (2.13)$$

wobei der Spin von s in s' umgewandelt und der Wellenvektor um \vec{q} verschoben wird ($|L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s'\rangle$ ist normiert). Falls $s = s'$, dann ändert sich der Spin nicht und wir sprechen von einer Spin-Singulett-Anregung. Ändert sich jedoch der Spin, z.B. $s = -s'$, dann handelt es sich

um eine Spin-Triplett-Anregung. Der Zustand wird also durch die Wellenvektoren \vec{k} und \vec{q} charakterisiert. Die Anregungsenergie ist einfach:

$$E = \epsilon_{L, \vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{V, \vec{k}} \quad (2.14)$$

Das Spektrum für eine solche Anregung mit gegebenem \vec{q} wird durch die Spektralfunktion gegeben:

$$I(\vec{q}, E) = \sum_{\vec{k}} |\langle L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s' | c_{L, \vec{k} + \vec{q}, s}^\dagger c_{V, \vec{k}, s'} | \Phi_0 \rangle|^2 \delta(E - (\epsilon_L(\vec{k} + \vec{q}) - \epsilon_V(\vec{k}))) \quad (2.15)$$

Anregungen dieser Art existieren für ω und \vec{q} in dem Bereich, wo $I(\vec{q}, \omega)$ nicht verschwindet. Das Anregungsspektrum hat einen unteren Rand, der ein Minimum bei $\vec{q} = \vec{k}_0$ hat, wobei $\vec{k}_0 = 0$ für eine direkte Energielücke und $\vec{k}_0 \neq 0$ für eine indirekte Lücke. Da \vec{k} nicht festgelegt wird, ergibt sich oberhalb einer Schranke für jede \vec{q} ein Kontinuum von angeregten Zuständen.

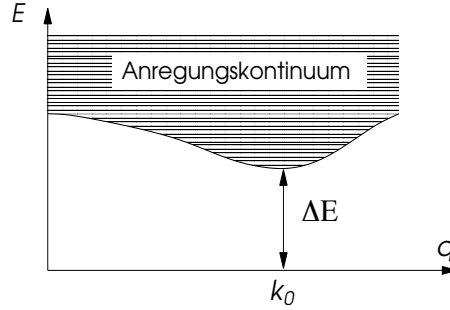


Abb. 2.6: Anregungsspektrum: Schraffierter Bereich zeigt an wo Anregungen vorhanden sind: $I(q, E) \neq 0$.

Für diese Elektron-Loch-Anregungen ist die Wechselwirkung zwischen den Teilchen nicht wichtig. Die Elektronen, die hier involviert sind, werden als unabhängige Teilchen betrachtet. Beachte die Ähnlichkeit des Halbleiters mit dem Dirac-See. Elektron-Loch-Anregungen sind das Analog zur Elektron-Positron-Erzeugung in der Dirac-Theorie.

2.2.2 Exzitonen

Wenn wir die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Teilchen mitberücksichtigen, finden wir eine weitere Klasse von Anregungen, sogenannte Exzitonen. Wir ergänzen daher den Hamilton-Operator in (2.10) um die Coulombenergie

$$\hat{V} = \sum_{s, s'} \int d^3r d^3r' \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_{s'}^\dagger(\vec{r}') \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \hat{\Psi}_{s'}(\vec{r}') \hat{\Psi}_s(\vec{r}) \quad (2.16)$$

wobei die Feldoperatoren definiert werden durch

$$\hat{\Psi}_s(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{n=L, V} \sum_{\vec{k}} u_{n, \vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{c}_{n, \vec{k}, s} \quad (2.17)$$

mit $u_{n, \vec{k}}(\vec{r})$ als Blochfunktion des Bandes $n = L, V$.

Nun setzen wir einen Zustand aus einem Teilchen-Loch-Paar an:

$$|\Phi_{\vec{q}}\rangle = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \hat{c}_{L, \vec{k} + \vec{q}, s}^\dagger \hat{c}_{V, \vec{k}, s'} |\Phi_0\rangle = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) |L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s'\rangle \quad (2.18)$$

der die stationäre Schrödinger-Gleichung $(\mathcal{H} + \hat{V})|\Phi_{\vec{q}}\rangle = E|\Phi_{\vec{q}}\rangle$ erfüllen soll. Dieses Zweiteilchen-Problem lässt sich ausdrücken als

$$\sum_{\vec{k}'} \langle L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s' | \mathcal{H} + \hat{V} | L, \vec{k}' + \vec{q}, s; V, \vec{k}', s' \rangle A(\vec{k}') = EA(\vec{k}). \quad (2.19)$$

Die Matrixelemente sind gegeben durch

$$\langle L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s' | \mathcal{H} | L, \vec{k}' + \vec{q}, s; V, \vec{k}', s' \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \{ \epsilon_{L, \vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{V, \vec{k}} \} \quad (2.20)$$

und

$$\begin{aligned} \langle L, \vec{k} + \vec{q}, s; V, \vec{k}, s' | \widehat{V} | L, \vec{k}' + \vec{q}, s; V, \vec{k}', s' \rangle = \\ 2\delta_{S,0} \int d^3r d^3r' u_{L, \vec{k} + \vec{q}}^*(\vec{r}) u_{V, \vec{k}}(\vec{r}) u_{L, \vec{k}' + \vec{q}}(\vec{r}') u_{V, \vec{k}'}^*(\vec{r}') e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ - \int d^3r d^3r' u_{L, \vec{k} + \vec{q}}^*(\vec{r}) u_{V, \vec{k}}(\vec{r}') u_{L, \vec{k}' + \vec{q}}(\vec{r}) u_{V, \vec{k}'}^*(\vec{r}') e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

wobei $\delta_{S,0} = 1$ wenn die Anregung ein Singulett ist und 0 sonst. Der erste Term ist der Austausch- und der zweite der direkte Term in der Coulomb-Wechselwirkung. Wir betrachten nun einen Halbleiter mit einer direkten Energielücke am Γ -Punkt. Damit sind vor allem die Wellenvektoren um $\vec{k} = 0$ herum wichtig. Wir machen folgende Näherung:

$$u_{n, \vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\Omega} \int d^3r u_{n, \vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \langle u_{n, \vec{k}'} | u_{n, \vec{k}} \rangle \approx \frac{1}{\Omega} \quad (2.22)$$

welche vernünftig ist, falls \vec{k} und \vec{k}' nicht allzu verschieden voneinander sind. Analog nähern wir

$$u_{L, \vec{k} + \vec{q}}^*(\vec{r}) u_{V, \vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\Omega} \langle u_{L, \vec{k} + \vec{q}} | u_{V, \vec{k}} \rangle \quad (2.23)$$

Falls \vec{q} klein ist, dann gilt

$$u_{L, \vec{k} + \vec{q}} \approx u_{L, \vec{k}} + \vec{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} u_{L, \vec{k}} \quad \Rightarrow \quad \langle u_{L, \vec{k} + \vec{q}} | u_{V, \vec{k}} \rangle = \vec{q} \cdot \langle \partial_{\vec{k}} u_{L, \vec{k}} | u_{V, \vec{k}} \rangle = i\vec{q} \cdot \langle u_{L, \vec{k}} | \widehat{\vec{r}} | u_{V, \vec{k}} \rangle \quad (2.24)$$

wobei wegen der Orthogonalität gilt $\langle u_{L, \vec{k}} | u_{V, \vec{k}} \rangle = 0$. Daraus folgt

$$u_{L, \vec{k} + \vec{q}}^*(\vec{r}) u_{V, \vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\Omega} i\vec{q} \cdot \vec{r}_{LV} \quad \text{mit} \quad \vec{r}_{LV} = \int d^3r u_{L, \vec{k}}^*(\vec{r}) \vec{r} u_{V, \vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.25)$$

Dies hat die Bedeutung eines Dipolmoments: $\vec{d}_{LV} = e\vec{r}_{LV}$. Wir vernachlässigen die \vec{k} -Abhängigkeit von \vec{d}_{LV} .

Bevor wir das Matrixelement hinschreiben, möchten wir darauf hinweisen, dass der Halbleiter ein Dielektrikum mit einer Dielektrizitätskonstante ϵ ($\vec{D} = \epsilon \vec{E}$) ist. Es gilt in der klassischen Elektrodynamik,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{4\pi\rho}{\epsilon} \quad (2.26)$$

so dass das Coulomb-Potential eine gewisse Schwächung durch die Polarization erleidet. Das Matrixelement (2.21) hat die Form

$$-\frac{4\pi e^2}{\Omega \epsilon |\vec{k} - \vec{k}'|^2} + \delta_{S,0} \frac{8\pi}{\Omega \epsilon \vec{q}^2} |\vec{q} \cdot \vec{d}_{LV}|^2 \quad (2.27)$$

Der zweite Term entspricht einer Dipol-Dipol-Wechselwirkung und ist unabhängig von \vec{k} und \vec{k}' ($\vec{k}, \vec{k}' \approx 0$). Damit schreiben wir die stationäre Gleichung (2.19) als

$$\left(\epsilon_{L, \vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{V, \vec{k}} - E \right) A(\vec{k}) - \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} \frac{4\pi e^2}{\epsilon |\vec{k} - \vec{k}'|^2} A(\vec{k}') + \delta_{S,0} \frac{8\pi}{\epsilon} |\vec{q} \cdot \vec{d}_{LV}|^2 \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} A(\vec{k}') = 0. \quad (2.28)$$

mit $\hat{q} = \vec{q}/|\vec{q}|$. Wir führen die Bänder in der $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Näherung ein, unter der Annahme einer direkten Energielücke:

$$\epsilon_{L,\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_L} \quad \text{und} \quad \epsilon_{V,\vec{k}} = E_0 - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_V} \quad (2.29)$$

Wir definieren eine sogenannte Envelope-Funktion $F(\vec{r})$ durch

$$F(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (2.30)$$

Für diese Funktion gilt folgende Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2\mu_{ex}} + \frac{\hbar^2}{2i} \left(\frac{1}{m_V} - \frac{1}{m_L} \right) \vec{q} \cdot \vec{\nabla} - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}|} + \delta_{S,0} \frac{8\pi}{\varepsilon} |\hat{q} \cdot \vec{d}_{LV}|^2 \delta(\vec{r}) \right] F(\vec{r}) = \left\{ E + E_0 - \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2\mu_{ex}} \right\} F(\vec{r}) \quad (2.31)$$

wobei μ_{ex} der reduzierten Masse entspricht, d.h.: $\mu_{ex}^{-1} = m_V^{-1} + m_L^{-1}$. Wir können den Term linear in $\vec{\nabla}$ durch die Transformation

$$F(\vec{r}) = F'(\vec{r}) \exp\left(\frac{i}{2} \frac{m_V - m_L}{m_V + m_L} \vec{q} \cdot \vec{r} \right) \quad (2.32)$$

eliminieren und erhalten nach einiger Umformung

$$\left[-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2\mu_{ex}} - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}|} + \delta_{S,0} \frac{8\pi}{\varepsilon} |\hat{q} \cdot \vec{d}_{LV}|^2 \delta(\vec{r}) \right] F'(\vec{r}) = \left\{ E + E_0 - \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2M_{ex}} \right\} F'(\vec{r}) \quad (2.33)$$

mit $M_{ex} = m_V + m_L$. Beachte, dass der zweite Term der Wechselwirkung, die Dipol-Dipol-Wechselwirkung eine Kontaktwechselwirkung ist.

Wir betrachten zunächst den Fall, dass Teilchen und Loch schwach aneinander gebunden sind, so dass die Wellenfunktion ausgedehnt und für $\vec{r} = 0$ klein ist. Dann können wir den Kontaktwechselwirkungsterm vernachlässigen. Damit reduziert sich die stationäre Gleichung auf eine Form, die analog zum Wasserstoffatom ist mit den Energieniveaus:

$$E_{\vec{q}} = -E_0 - \frac{\mu_{ex} e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2 n^2} + \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2M_{ex}}. \quad (2.34)$$

Das bedeutet, dass wir Anregungen unterhalb des Kontinuums der Teilchen-Loch-Anregungen gefunden haben, die einem gebundenen Zustand des Teilchens und des Loches entsprechen. Diese Anregungen gehören nicht zu einem Kontinuum, sondern entsprechen diskreten Niveaus mit klaren Impuls-Energie-Beziehungen. \vec{q} ist der Wellenvektor der Schwerpunktsbewegung von Loch und Teilchen. Damit haben wir ein nicht-triviales Quasiteilchen gefunden, das man *Exzitation* nennt. Dies hat zwar die Form eines Zweiteilchenzustands, kann aber auch als kollektive Anregung betrachtet werden, da die Dielektrizitätskonstante die Polarisation aller Elektronen einschliesst. Ohne diese Abschirmung würden die Exzitionzustände nicht in der Energielücke liegen, sondern viel tiefer. Für die Situation der schwachen Bindung, wie wir sie hier betrachten, bezeichnet man diese Anregung als *Wannier-Exziton*. Die typische Bindungsenergie ist

$$E_b \sim \frac{\mu_{ex}}{m\varepsilon^2} Ry \quad (2.35)$$

welche mit typischen Werten für Halbleiter, $\varepsilon \sim 10$ und $\mu_{ex} \sim m/10$, von einigen meV ergibt. Diese Bindungsenergie ist also viel kleiner als die Energielücke, so dass die Exziton-Anregungen innerhalb der Energielücke zu liegen kommen (schematisch dargestellt in Abb. 2.7).

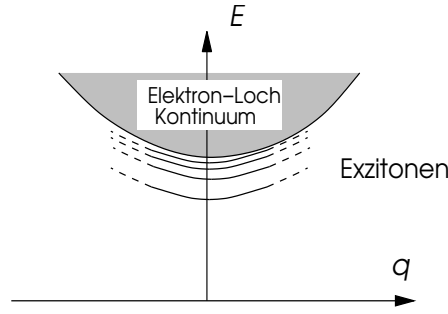


Abb. 2.7: Exzitonspektrum (schematisch).

Die Exziton-Niveaus haben eine Dispersion und werden für höhere Energien immer dichter, wie beim Wasserstoff-Atom. Die Verschmelzung mit dem Kontinuum entspricht der "Ionisierung", d.h. das Elektron und das Loch dissoziieren und werden unabhängige Teilchen.

Der umgekehrte Grenzfall sehr starker Bindung führt zur Korrektur

$$\Delta E \approx \frac{8\pi}{\epsilon} |\hat{q} \cdot \vec{d}_{LV}|^2 |F'(0)|^2 \quad (2.36)$$

wegen der Dipol-Dipol-Kontaktwechselwirkung. Dies ist natürlich nur endlich für Zustände mit verschwindendem Drehimpuls. Diese Exzitonen werden *Frenkel-Exzitonen* genannt. Im Extremfall handelt es sich dabei eher um die Anregungen eines einzelnen Atoms im Gitter als um einen Zustand in der Halbleiterbandstruktur. Dabei ist auch wichtig, ob der Wellenvektor \vec{q} parallel oder senkrecht zum Dipolmoment \vec{d}_{LV} steht. Im letzteren Fall verschwindet der Beitrag dieses Terms zur Energie.

Die Exzitonen können sich durch das Gitter bewegen, führen aber keine Ladung mit sich, da sie aus einem Elektron und einem Loch mit umgekehrter Ladung bestehen. Sie gehorchen Bose-Einstein-Statistik, da sie aus zwei Fermionen aufgebaut sind. Man kann sogar Bose-Einstein-Kondensation von Exzitonen in speziellen Halbleiterstrukturen studieren.

2.3 Optische Eigenschaften

Wir betrachten optisch induzierte Übergänge von Elektronen zwischen verschiedenen Energiezuständen. Dabei ist für uns vor allem der Interband-Übergang wichtig, wenn wir die Absorption vom Grundzustand ausgehend betrachten. Optische Messungen, d.h. das Spektrum der Reflexion und der Absorption, erlaubt es uns, die optischen Konstanten zu bestimmen, insbesondere die komplexen Brechungsindizes $N = n + ik$ und die Dielektrizitätskonstante $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$,

$$\epsilon = N^2 \quad \Rightarrow \quad \epsilon_1 = n^2 - k^2 \quad \text{und} \quad \epsilon_2 = 2nk \quad (2.37)$$

Real- und Imaginärteil von ϵ sind mittels der Kramers-Kronig-Beziehung miteinander verbunden, so dass wenn wir eine Komponente kennen, die andere auch bekannt ist.

$$\epsilon_1(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \omega' \frac{\epsilon_2(\vec{q}, \omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad \epsilon_2(\vec{q}, \omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\epsilon_1(\vec{q}, \omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2.38)$$

Wir können uns daher auf ϵ_2 konzentrieren, das mit dem optischen Absorptionskoeffizienten K verknüpft ist,

$$K = \frac{2\omega k}{c} = \frac{\omega}{nc} \epsilon_2. \quad (2.39)$$

Wir werden hier daher die Photonabsorption für einen Halbleiter mit direkter Energielücke betrachten. Die Absorption eines Photons ergibt den Übertrag der Energie $\hbar\omega$ und des Impulses $q = \hbar\omega/c$. Der Impuls des Photons ist jedoch sehr klein verglichen mit dem Impuls der Elektronen in der Brillouinzone, so dass man ihn vernachlässigen kann.

Wir können die Absorptionsrate aus der zeitabhängigen Störungstheorie herleiten (QM II). Für die Kopplung zwischen elektromagnetischer Strahlung und der Materie verwenden wir

$$\widehat{V}_{es} = \frac{e}{mc} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{A}(\widehat{\vec{r}}, t) \quad (2.40)$$

Beachte \vec{A} folgt der Coulomb-Eichung: $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$. Das Störpotential \widehat{V}_{es} ist der paramagnetische Teil der Kopplung. Den diamagnetischen Teil proportional zu \vec{A}^2 vernachlässigen wir. Die elektromagnetische Strahlung wird durch die Überlagerung freier ebener Wellen dargestellt:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{q}, \lambda} \left\{ A_{\vec{q}\lambda} \vec{e}_{\vec{q}\lambda} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\omega t} + A_{\vec{q}\lambda}^* \vec{e}_{\vec{q}\lambda}^* e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r} + i\omega t} \right\} \quad (2.41)$$

mit $\vec{e}_{\vec{q}\lambda}$ der Polarizationsvektor (λ : Index der beiden Polarisationsrichtungen), der aufgrund der Eichung transversal ist ($\vec{q} \cdot \vec{e}_{\vec{q}\lambda} = 0$). Die Übergangsrate zwischen einem Elektronenzustand $|V, \vec{k}\rangle$ im Valenzband und einem Zustand $|L, \vec{k}'\rangle$ berechnet sich gemäss Fermis Goldener Regel.

$$\Gamma(V, \vec{k}; L, \vec{k}', \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle L, \vec{k}' | V, \vec{k} | \widehat{V}_{es} | \Phi_0 \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_{L, \vec{k}'} - \epsilon_{V, \vec{k}} - \hbar\omega) \quad (2.42)$$

wobei $\vec{k} \approx \vec{k}'$. Das Matrixelement für eine gegebene Mode der elektromagnetischen Strahlung berechnet sich aus

$$\begin{aligned} \langle L, \vec{k}', V, \vec{k} | \vec{e}_{\vec{q}\lambda} \cdot \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \Phi_0 \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int d^3r \psi_{L, \vec{k}'}(\vec{r})^* \vec{e}_{\vec{q}\lambda} \cdot \vec{\nabla} \psi_{V, \vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{\hbar}{i} \int d^3r u_{L, \vec{k}'}(\vec{r})^* e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \vec{e}_{\vec{q}\lambda} \cdot \vec{\nabla} u_{V, \vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &\approx \frac{\hbar}{i} \int d^3r u_{L, \vec{k}'}(\vec{r})^* \vec{e}_{\vec{q}\lambda} \cdot \vec{\nabla} u_{V, \vec{k}}(\vec{r}) + \hbar \vec{e}_{\vec{q}\lambda} \cdot \vec{k} \int d^3r u_{L, \vec{k}'}(\vec{r})^* u_{V, \vec{k}}(\vec{r}) \\ &= M_{L,V} + i \vec{e}_{\vec{q}\lambda} \cdot \vec{q} \widetilde{M}_{L,V} \end{aligned} \quad (2.43)$$

wobei wir verwendet haben, dass $\vec{q} \approx 0$ und $\vec{k} \approx \vec{k}'$, um die Fourier-Faktoren zu vernachlässigen. Das zweite Glied ist klein, da es wegen der Orthogonalität der Bloch'schen Funktionen, nur aufgrund des kleinen Unterschiedes zwischen \vec{k} und \vec{k}' nicht verschwindet. Damit kommt es nur zum Zuge, falls das erste (dominante) Matrixelement nicht verschwindet (unerlaubte Übergänge, Auswahlregeln).

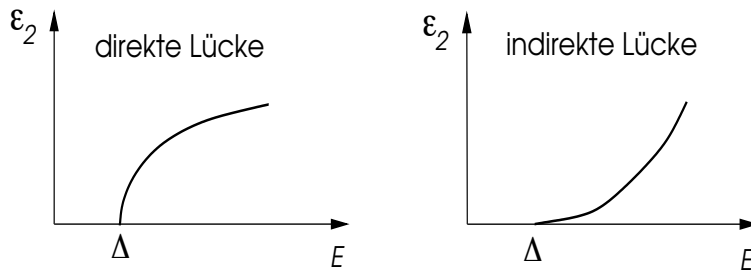


Abb. 2.8: Optische Absorption für Halbleiter mit direkter und indirekter Energielücke.

Dies führt uns zu ε_2 ³

³Zusammenhang zwischen Übergangsrate und ε_2 : Wir definieren die Energiestromdichte für eine Mode (\vec{q}, λ) als

$$I_{\vec{q}, \lambda} = \frac{|A_{\vec{q}, \lambda}|^2 \omega^2}{2\pi c^2} n c \quad (2.44)$$

$$\varepsilon_2(\omega) \propto \omega^{-2} \sum_{\vec{k}} |M_{L,V} + i \vec{e} \vec{q}_\lambda \cdot \vec{k} \tilde{M}_{L,V}|^2 \delta(\epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} - \hbar\omega). \quad (2.48)$$

Wir betrachten die Absorption in der Nähe der Bandkanten, wobei wir die Bandstruktur dort parabolische annähern.

$$\hbar\omega = \epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} \approx \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_V} = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{ex}} \quad (2.49)$$

($\mu_{ex}^{-1} = m_V^{-1} + m_L^{-1}$). Wir nehmen an, dass das Matrixelement $M_{L,V}$ nur sehr schwach vom Impuls abhängt. Für erlaubte Übergänge können wir das zweite Matrixelement vernachlässigen. Dann folgt die Frequenzabhängigkeit aus der kombinierten Zustandsdichte:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} - \hbar\omega) = N(\hbar\omega) = \frac{4\pi}{\hbar^3} (2\mu_{ex})^{3/2} \{\hbar\omega - \Delta\}^{1/2} \quad (2.50)$$

Dies ergibt für erlaubte Übergänge an der Absorptionskante, d.h. für $\hbar\omega$ unmittelbar oberhalb der Energielücke

$$\varepsilon_2 \propto \omega^{-2} \{\hbar\omega - \Delta\}^{1/2}. \quad (2.51)$$

Wenn der Übergang unerlaubt ist, dann muss das zweite Matrixelement mit seiner zusätzlichen k^2 -Abhängigkeit betrachtet werden:

$$\varepsilon_2 \propto \omega^{-2} \{\hbar\omega - \Delta\}^{3/2}. \quad (2.52)$$

Hier ist die Frequenzabhängigkeit nahe bei der Absorptionskante schwächer.

Indirekte Übergänge in Halbleitern mit einer indirekten Energielücke benötigen einen Impulsübertrag. Dieser kann vom Kristallgitter kommen, indem im Absorptionsprozess zusätzlich ein Phonon, eine Gitterschwingung, involviert ist. Dies führt zu einem Prozess höherer Ordnung, da zunächst ein Photon absorbiert und dann auch noch ein Phonon absorbiert oder emittiert wird. Das heisst, dass der Prozess über einen virtuellen Zwischenzustand verläuft. Wenn wir wiederum davon ausgehen, dass die dominanten Matrixelemente nicht vom Impuls abhängen, lässt sich die Frequenzabhängigkeit von ε_2 nähern durch

$$\varepsilon_2 \approx \omega^{-2} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left\{ C_+ \delta(\epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} - \hbar\omega + \hbar\omega_{\vec{q}_+}) + C_- \delta(\epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} - \hbar\omega - \hbar\omega_{\vec{q}_-}) \right\} \quad (2.53)$$

wobei $\hbar\omega_{\vec{q}}$ die Phonondispersion ist mit $\vec{q}_\pm \approx \pm(\vec{k}' - \vec{k})$. Daraus erhalten wir

$$\varepsilon_2 \propto C_+ \omega^{-2} \{\hbar\omega - \hbar\omega_{\vec{q}_+} - \Delta\}^2 + C_- \omega^{-2} \{\hbar\omega + \hbar\omega_{\vec{q}_-} - \Delta\}^2 \quad (2.54)$$

Hier steigt $\varepsilon_2(\omega)$ an der Absorptionskante wesentlich langsamer an als beim direkten Übergang für eine direkte Energielücke.

(n : Brechungsindex) so dass wir die Übergangsrate für diese Mode auch schreiben können als

$$\Gamma_{\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k},\lambda} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar m^2 \omega^2 n c} I_{\vec{q},\lambda} |M|^2 \delta(\epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} - \hbar\omega). \quad (2.45)$$

Damit können wir den Absorptionskoeffizienten K ausdrücken als Energieabsorptionsrate / Energiestromdichte:

$$K = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \lambda} \frac{\hbar\omega \Gamma_{\vec{q},\lambda}}{I_{\vec{q},\lambda}} = \frac{\omega}{nc} \varepsilon_2 \quad (2.46)$$

und

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \lambda} |M|^2 \delta(\epsilon_{L,\vec{k}'} - \epsilon_{V,\vec{k}} - \hbar\omega) \quad (2.47)$$

$\varepsilon_2(\omega)$ ergibt sich aus allen Absorptionsprozessen zu gegebener Frequenz.

Nun bleibt uns noch die Absorption durch einen Übergang aus dem Leitungsband in einen Exzitonenzustand. Dabei beschränken wir uns auf direkte Übergänge. Es kommt noch hinzu, dass das Loch im Valenzband und das Elektron im Leitungsband nicht mehr unkorreliert sind. Die Berechnung dieses Überganges ist wesentlich komplizierter, da der Effekt der Coulombwechselwirkung zusätzlich mitberücksichtigt werden muss.

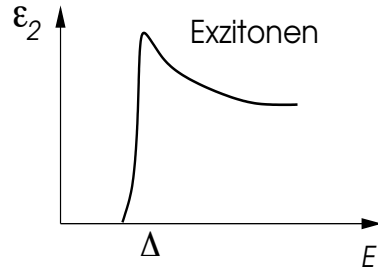


Abb. 2.9: Optische Absorption mit Exzitonen.

Vor der Kontinuumsabsorptionskante erscheint ein Set von diskreten Absorptionslinien, die den Exzitonenzuständen mit Impuls 0 entsprechen. Die Korrelationseffekt beeinflussen jedoch auch das Kontinuum sehr nahe bei der Absorptionskante:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2^{(0)} \gamma \frac{e^\gamma}{\sinh \gamma} \quad \text{mit} \quad \gamma = \pi \sqrt{\frac{\mu_{ex} e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2}} (\hbar\omega - \Delta)^{-1/2} \quad \hbar\omega > \Delta, \quad (2.55)$$

wobei $\varepsilon_2^{(0)}$ der Form (2.52) entspricht (ε^2 : statische Dielektrizitätskonstante).

Natürlich ist auch der umgekehrte Prozess des Zerfalls eines angeregten Zustandes unter Abgabe eines Photons möglich. Da das Elektron des Leitungsbands dazu das Loch im Valenzband eliminieren muss, nennt man diesen Prozess auch Rekombination.

2.4 Störstellen im Halbleiter

Wenn wir im Si-Halbleiter ein Si-Atome durch Al (Gruppe III) oder P (Gruppe V) ersetzen, dann ergibt sich daraus eine spezielle Störstelle im Kristallgitter. Beide Al und P sind in der gleichen Reihe der Periodentabelle und unterscheiden sich durch die Elektronenzahl:

$$\text{Al: } \{(1s)^2(2s)^2(2p)^6\}\underline{(3s)^2(3p)} \quad \text{P: } \{(1s)^2(2s)^2(2p)^6\}\underline{(3s)^2(3p)^3} \quad (2.56)$$

Aluminium hat ein Elektron weniger und Phosphor eines mehr als Silizium. Betrachten wir zuerst die Situation einer P-Störstelle, die ein zusätzliches Elektron liefert. Die Dynamik dieses Elektrons wird durch das Leitungsband beschrieben. Einfachheitshalber drücken wir das Leitungsband durch ein einzelnes Band mit isotropen effektiven Massen aus:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \quad (2.57)$$

Die P-Störstelle hat eine positive Ionenladung, die das zusätzliche Elektron zu binden versucht. Das einfachste Modell, um dies zu beschreiben, ist durch die Wannier-Gleichung gegeben:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}|} \right\} F(\vec{r}) = EF(\vec{r}) \quad (2.58)$$

wobei ε die Dielektrizitätskonstante ist, die die dielektrische Abschirmung des Potentials beschreibt. Diese Gleichung hat die Form der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoff-Atom, so

dass das zusätzliche Elektron an der Störstelle gebunden ist und mit einer gewissen "Ionisierungsenergie" in das Leitungsband übergehen kann. Die Bindungsenergie relativ zum unteren Rand des Leitungsbandes ist daher

$$E_n = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 n^2} = -\frac{m^*}{m \varepsilon^2 n^2} Ry \quad (2.59)$$

und der effektive Radius des tiefsten gebundenen Zustandes ist

$$r_1 = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m^* e^2} = \frac{\varepsilon m}{m^*} a_B \quad (2.60)$$

mit $a_B = 0.53 \text{ \AA}$ als Bohrscher Radius. Für Si gilt $m^* \approx 0.2m$ und $\varepsilon \approx 12$, so dass

$$E_1 \approx -20 \text{ meV} \quad \text{und} \quad r_1 \approx 30 \text{ \AA} \quad (2.61)$$

Damit haben wir schwach gebundene Zustände mit Energien innerhalb der Bandlücke.

Die Näherung, die wir für (2.58) verwendet haben, schliesst natürlich das periodische Potential des Kristallgitters nicht ein. Man kann jedoch zeigen, dass die obige Näherung zulässig ist. Dabei ist $F(\vec{r})$ eine effektive Wellenfunktion und die eigentliche Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ ist näherungsweise

$$\psi(\vec{r}) \approx u_{\vec{k}=0}(\vec{r})F(\vec{r}), \quad (2.62)$$

d.h. es kommt noch eine periodische Modulation dazu. Es zeigt sich also, dass es Zustände in der Bandlücke gibt. Diese erfüllen jedoch die Bedingung $\hat{T}_{\vec{a}}|\psi_{\vec{k}}\rangle = \lambda|\psi_{\vec{k}}\rangle$ mit $|\lambda|^2 = 1$ nicht, d.h. es handelt sich, wie $\psi(\vec{r})$ zeigt, um exponentiell zerfallende Zustände.

Mit den P-Störstellen führen wir also zusätzliche Elektronen ein, die durch thermische Anregungen leicht in das Leitungsband transferiert werden können. Wir sprechen dann von einem *n-dotierten* Halbleiter (n: negative Ladung). Analog können wir die Al-Störstelle betrachten, wobei hier ein Elektron fehlt, um eine kovalente Bindung abzuschliessen. Diese Loch (positive Ladung) ist analog zum vorhergehenden Fall des überzähligen Elektrons an die Al-Störstelle gebunden und führt auf ein Energieniveau unmittelbar oberhalb der oberen Bandkante des Valenzbandes. Solche Löcher können durch thermische Anregung ins Valenzband übergehen und so mobile positive Ladungen erzeugen. Man spricht dann von *p-dotierten* Halbleitern. Das chemische Potential liegt in diesen Fällen im Bereich der Störstellen-Niveaus.

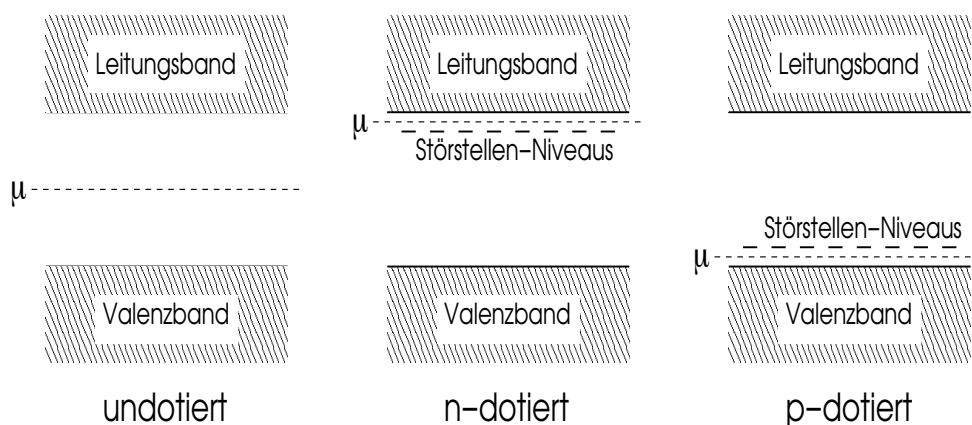


Abb. 2.10: Position des chemischen Potentials im Halbleiter.

Die Möglichkeit durch Dotierung von sogenannten "Donatoren" und "Akzeptoren" können die Leitungseigenschaften von Halbleitern, insbesondere bei Raumtemperatur, entscheidend beeinflusst werden. Durch Kombination von verschiedenen dotierten Halbleiter-Komponenten gewinnt man eine enorme Flexibilität, Bauelemente mit speziellen elektronischen Eigenschaften zu bauen - die Basis der Halbleitertechnologie.

2.5 Halbleiter-Bauelemente

Halbleiter sind eine der wichtigsten Komponenten der heutigen Spitzentechnologien. In diesem Abschnitt betrachten wir einige einfachere Beispiele von Bauelementen, die aus Halbleitern angefertigt werden können.

2.5.1 pn-Kontakte als Dioden

Die pn-Kontakte werden als Gleichrichter eingesetzt. Wir fügen eine n- und eine p-dotierte Version des gleichen Halbleiter zusammen. Wie wir oben gesehen haben, ist das chemische Potential an die Störstellen-Niveaus gekoppelt. Da das chemische Potential über den Kontakt hinweg konstant bleiben muss, kommt es zu einer "Verbiegung" der Bänder. An der Grenzschicht werden die Störstellen-Niveaus zusammen mit den Bändern verschoben, so dass sie ionisiert werden. Dies bedeutet, dass die elektrische Ladung der Störstellen-Atome nicht kompensiert wird und somit ein elektrischer Dipol entsteht mit negativer und positiver Ladung auf der p- bzw. n-Seite.

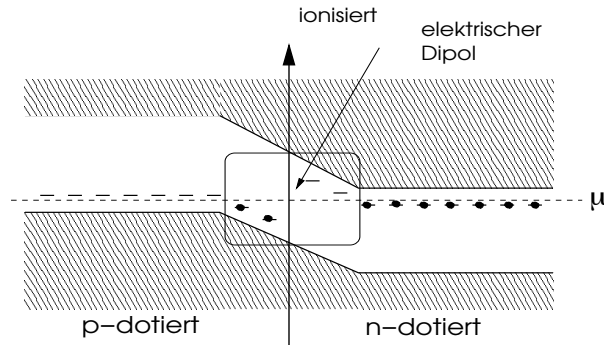


Abb. 2.11: Besetzung der Störstellen-Niveaus am pn-Kontakt.

Falls keine Spannung über den Kontakt angelegt wird, fließt kein Strom und der Dipol (Raumladungsschicht) bildet das statische Gleichgewicht. Dies kann auch als ein Gleichgewicht zwischen zwei gegenläufigen Strömen interpretiert werden, dem Driftstrom und dem Diffusionsstrom. Aus der Sicht der Elektronen betrachtet, erzeugt der Ladungsdipol ein elektrisches Feld, das Elektronen von der p-Seite auf die n-Seite herüberzieht, d.h. eine Kraft auf die Elektronen ausübt. Dies ergibt den Driftstrom J_{drift} . Hingegen führt das Konzentrationsgefälle für die Elektronen zu einem Diffusionsstrom J_{diff} von der n- zur p-Seite hin. Dieser läuft dem Potentialgefälle des Raumladungsdipols entgegen und entspricht dem Überwinden einer Potentialstufe. Im Gleichgewicht gilt

$$0 = J_{tot} = J_{diff} + J_{drift} \propto C_1(T)e^{-\Delta/k_B T} - C_2(T)e^{-\Delta/k_B T} = 0 \quad (2.63)$$

wobei $C_1 = C_2 = C$. Beide Ströme hängen im Wesentlichen vom Faktor $C(T)e^{-\Delta/k_B T}$. Der Ursprung liegt beim Driftstrom darin, dass die Konzentration der Minoritätsladungsträger, d.h. die Konzentration der Elektronen (Löcher) auf der p-Seite (n-Seite), die durch thermische Anregung entstehen. Die Größe des Driftstromes wird durch diese Konzentration bestimmt, da alle Elektronen, die auf der p-Seite in den Bereich des Dipols gelangen, auf die n-Seite hinübergesogen werden. Dieser Beitrag wird nicht stark verändert, wenn eine Spannung angelegt wird. Für den Diffusionsstrom beschreibt der Faktor $C(T)e^{-\Delta/k_B T}$ das Überschreiten der Dipolbarriere durch thermische Aktivierung. Dieser Beitrag ist nun stark von einer angelegten Spannung abhängig, die die Höhe der Barriere verändert. Bei verschwindender Spannung ist die Barriere im Wesentlichen identisch mit der Energielücke, $E_b \approx \Delta$. Mit einer Spannung ergibt sich $E_b \approx \Delta + eU$ wobei $\mu_n - \mu_p = eU$. Daraus ergibt sich die bekannte Strom-Spannungscharakteristik des pn-Kontaktes:

$$J_{tot}(U) = C(T)e^{-\Delta/k_B T} \left\{ e^{eU/k_B T} - 1 \right\}. \quad (2.64)$$

Mit einer positiven Spannung $U > 0$ fließt ein erhöhter Strom, der rasch mit der Spannung anwächst. Für die negative Spannung $U < 0$ gibt es einen schwachen Strom in die andere Richtung. Der Ladungstransport ist gehemmt.

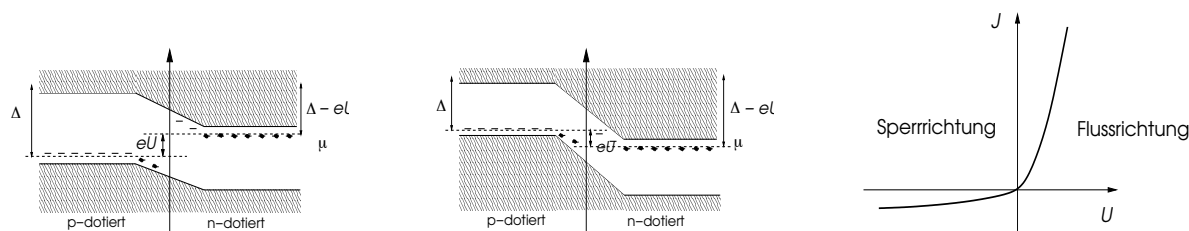


Abb. 2.12

Die Spannungskennlinie $J(U)$ zeigt eine klar asymmetrisches Verhalten, wobei wir für $U > 0$ von der Flussrichtung und für $U < 0$ von der Sperrrichtung sprechen. Diese Gleichrichter oder Dioden sind ein wichtiges Grundelement integrierter Schaltungen.

2.5.2 Halbleiter-Dioden und Licht

LED: Wie wir oben erwähnt hatten können Elektronen in einem Halbleiter mit direkter Energielücke wie GaAs photoninduzierte Übergänge zwischen dem oberer Rand des Valenz- und dem unteren Rand des Leitungsbandes ausführen. Dies gilt auch für die Emission eines Photons, das durch Rekombination eines Elektrons mit einem Loch geschieht. Solche Elektron-Loch-Paare können in einer Diode erzeugt werden, die dann als eine Lichtquelle funktioniert. Die Photonenergie wird dabei etwa der Bandlücke entsprechen, $\hbar\omega \approx \Delta$. Eine Diode, die für diesen Zwecke verwendet wird, nennt man LED (light emitting-diode). Halbleiter mit verschiedenen Energielücken geben Licht in verschiedenen Farben ab.

Halbleiter	GaAs	GaAs _{0,6} P _{0,4}	GaAs _{0,4} P _{0,6}	GaP	GaN
Wellenlänge (nm)	940	660	620	550	340
Farbe	infrarot	rot	gelb	grün	ultraviolett

Bei der Lichtemission aus dem Halbleiter gibt es jedoch Probleme. Insbesondere wegen der grossen Differenz des Lichtbrechungsindex zwischen Innen und Aussen, ist der reflektive Verlust gross ($n_{\text{HL}} \approx 3$ und $n_{\text{Luft}} \approx 1$). Daher ist die Effizienz ($n_{\text{emit-Photon}}/n_{\text{erzeugte E-L-Paare}}$) klein, jedoch immer noch besser als die herkömmliche Glühbirne. Durch spezielle Designs können sogar Halbleiterlaser produziert werden.

Solar-Zelle: Absorbiertes Licht kann die Population der Ladungsträger verändern. Nehmen wir an, dass die n-Seite dem Licht ausgesetzt wird. Dann führt dies auf einen zusätzlichen Strom J_L

$$J_{\text{tot}} = J_{\text{pn}} - J_L = J_s(e^{eU/K_B T} - 1) - J_L . \quad (2.65)$$

J_L kommt dadurch zustande, dass die durch Lichteinstrahlung erzeugten Elektronen (Minoritätsladungsträger) in den Bereich des Raumladungsdipols diffundieren und dort auf die n-Seite hinüberfließen. Wichtig ist hierbei, dass die Elektronen während der Diffusion nicht rekombinieren. Falls $J_{\text{tot}} = 0$, ergibt dies eine Spannung U_L über der Diode. Die maximale Effizienz wird durch Anlegen einer externen Spannung $U_c < U_L$ erreicht.

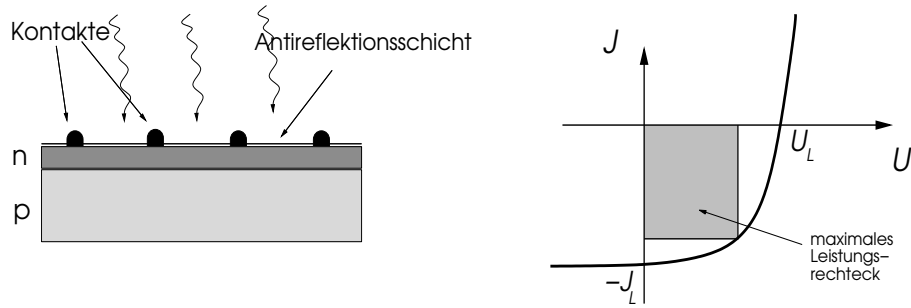


Abb. 2.13

2.5.3 MOSFET

Die wichtigste Anwendung der Halbleiter ist der Transistor, den es in verschiedensten Formen gibt. Wir betrachten hier den MOSFET (Metal-Oxide-Structure-Field-Effect-Transistor). Transistoren sind Schalter, die es ermöglichen den Strom durch eine Verbindungsleitung durch Ein-/Ausschalten einer Kontrollspannung zu variieren. Im MOSFET geschieht, dies durch die Änderung der Ladungskonzentration in einem p-dotierten Halbleiter durch ein metallisches Gate. Der Aufbau des MOSFET sieht folgendermassen aus. Auf der Oberfläche eines p-Typ-Halbleiters trägt man eine dünne Schicht SiO_2 auf. Dies ist ein sehr guter Isolator, der sich von der Gitterstruktur her optimal mit Si verträgt. Auf die isolierenden Schicht kommt noch eine metallische Schicht, die als Gate-Elektrode benutzt wird.

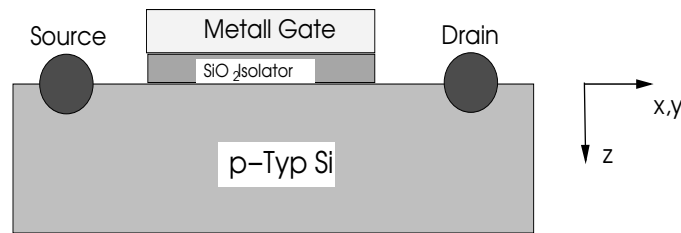


Abb. 2.14

Wir nennen die Spannung zwischen dem Si-Halbleiter und der Metall-Elektrode Gate-Spannung U_G . Die isolierende SiO_2 -Schicht stellt sicher, dass bei angelegter Gate-Spannung keine Ströme fließen. Die Ströme, die für den MOSFET relevant sind, fließen zwischen Source (Quelle) und Drain (Senke). Betrachten wir die beiden typischen Schaltkonfigurationen:

Schalter "aus": Die Gate-Spannung ist $U_G = 0$. Es fließt kein kaum Strom, da das Leitungsband praktisch leer ist.

Schalter "an": Die Gate-Spannung ist positiv $U_G > 0$. Damit wird die Energie der Bänder im Si erniedrigt. Dies führt dazu, dass in einer gewissen Schicht innerhalb des Si die Akzeptor-Niveaus mit Elektronen gefüllt oder von Löchern entleert werden. Wenn die Grenze zwischen SiO_2 und Si sehr wenig Defekte enthält, können sich die induzierten Ladungen bewegen und es fließt ein Strom. Die entleerte Schicht (depletion layer) hat die Dicke d . Die negative Ladung auf den Akzeptoren führt auf folgendes Potential $\Phi(z)$. Es gilt die Poisson-Gleichung

$$\frac{d^2}{dz^2}\Phi(z) = \frac{4\pi\rho(z)}{\epsilon} \quad (2.66)$$

wobei die Ladungsdichte von den mit Elektronen besetzten Akzeptoren herrührt,

$$\rho(z) = \begin{cases} -en_A & z < d \\ 0 & z > d \end{cases} \quad (2.67)$$

mit n_A Dichte der Akzeptor-Störstellen. Die Randbedingungen sind

$$\Phi(z = 0) = U_G \quad \text{und} \quad \Phi(z = d) = 0 \quad (2.68)$$

Daraus ergibt sich die Lösung

$$\Phi(z) = \frac{2\pi en_A}{\epsilon}(z - d)^2 \quad \text{mit} \quad d^2 = \frac{\epsilon U_G}{2\pi en_A} \quad (2.69)$$

für $z \leq d$. Je grösser die Gate-Spannung, desto tiefer ist die entleerte Schicht.

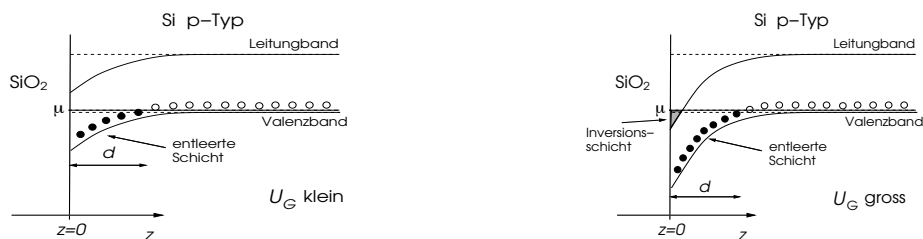


Abb. 2.15

Wenn die Gate-Spannung genügend hoch gewählt wird ($U_G > \Delta$), entsteht eine sogenannte Inversions-schicht. Das Leitungsband wird genügend stark nach unten gebogen, dass es an der Grenze das chemische Potential in unteren Rand des Leitungsbandes kreuzt. In der Inversions-schicht sammeln sich Elektronen, die sich wie ein zweidimensionales Elektronengas verhalten. Dieses System ist für den Quanten-Hall-Effekt (QHE) wichtig, bei dem die Transport- und Hall-Eigenschaften in einem Magnetfeld untersucht werden.

Kapitel 3

Metalle - Eigenschaften eines wechselwirkenden Elektronengases

Die Bandstrukturbetrachtungen haben gezeigt, dass es im Festkörper periodisch angeordneter Atome Energiebänder gibt, deren Elektronenzustände ausgedehnt sind. Im Grundzustand werden die Elektronenzustände sukzessive gefüllt bis alle Elektronen untergebracht sind. Wenn ein Band partiell gefüllt ist, sprechen wir von einem metallischen System. Ein solches System unterscheidet sich wesentlich von Isolatoren und Halbleitern. Im Metall finden wir Elektron-Loch-Anregungen, die keine Energielücke aufweisen und daher für beliebig kleine Energien vorhanden sind. Wie wir sehen werden hat dies wichtige Konsequenzen.

Wir betrachten hier ein einfaches Modell, das sich eignet die einfachsten Metalle, die Alkali-Metalle, wie Li, Na oder K, zu beschreiben, deren Elektronkonfiguration neben den Rumpfelektronen nur ein Valenzelektron in einem ns -Orbital hat. Wenn wir uns auf dieses eine Elektron beschränken und die fast freie Elektronentheorie anwenden, finden wir, dass das unterste Band um den Γ -Punkt zentriert halbgefüllt ist. Wir werden im Folgenden die periodische Modulation des Potential der Ionenrümpfe vernachlässigen und das einfache Metall durch ein Gas freier Elektronen, die einander via Coulomb-Wechselwirkung abstossen.

3.1 Jellium-Modell des Metalls

Das einfachst mögliche Modell eines Metalls ist das sogenannte Jellium-Modell, das sich für die qualitative und teilweise quantitative Beschreibung von einfachen Metallen eignet. Das Gitter der Ionen wird in diesem Modell durch kontinuierlichen, positiv geladenen Hintergrund (Jellium) ersetzt. Die uniforme Ladungsdichte en_{ion} der Ionen entspricht gerade der mittleren Dichte der Elektronen $-en$, um ein ladungsneutrales System zu erhalten ($n_{\text{ion}} = n$). Da dieses Modell bereits in der Vorlesung der Quantenmechanik II schon betrachtet wurde, werden wir uns hier kurz fassen und nur die wesentlichen Begriffe und Resultate wieder einführen.

Wir beginnen mit den freien Elektronen, deren Wellenfunktionen in diesem kontinuierlich translationsinvarianten Raum ebenen Wellen entsprechen:

$$\psi_{\vec{k},s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (3.1)$$

wobei Ω das Volumen des Systems ist (zur Normierung der Wellenfunktion), \vec{k} und s bezeichnen den Wellenvektor und den Spin (\uparrow, \downarrow). Wir betrachten sogenannte periodische Randbedingungen für die Wellenfunktion, indem wir das Volumen als Würfel der Kantenlänge L annehmen ($\Omega = L^3$) und festlegen, dass

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k},s}(\vec{r} + (L, 0, 0)) &= \psi_{\vec{k},s}(\vec{r} + (0, L, 0)) = \psi_{\vec{k},s}(\vec{r} + (0, 0, L)) = \psi_{\vec{k},s}(\vec{r}) \\ \Rightarrow \vec{k} &= \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad \text{mit} \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (3.2)$$

Die Energie eines solchen Einteilchenzustandes ist $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$. Den Grundzustand erhalten wir durch Auffüllen der untersten Energieniveaus mit je einem Spin \uparrow und \downarrow bis alle Elektronen untergebracht sind (Pauli-Ausschliessungsprinzip). In der Sprache der zweiten Quantisierung entspricht der Grundzustand also

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{|\vec{k}| \leq k_F, s} \hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger |0\rangle \quad (3.3)$$

wobei k_F der Fermiwellenvektor ist und mit der maximalen Einteilchenenergie (Fermi-Energie $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$) zusammenhängt. Aus der Zählung der Elektronenzustände ergibt sich, dass

$$n = \frac{1}{\Omega} \sum_{|\vec{k}| \leq k_F, s} 1 = 2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} 1 = 2 \frac{4\pi}{3} \frac{k_F^3}{(2\pi)^3} \quad \Rightarrow \quad k_F = \{3\pi^2 n\}^{1/3} \quad (3.4)$$

k_F ist der Radius der Fermi-Kugel im k -Raum um $\vec{k} = 0$. Die Operatoren $\hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger$ und $\hat{c}_{\vec{k}, s}$ erzeugen bzw. vernichten ein Elektron mit dem Wellenvektor \vec{k} und Spin s .

Wir berechnen die Grundzustandsenergie des Jellium-Systems variationell. Dabei lassen wir die Dichte n als einzigen Parameter zur Minimierung der Energie offen. Diese variationelle Freiheit entspricht der freien Wahl der Gitterkonstante der Ionen. Der Variationszustand sei $|\Psi_0\rangle$ mit gegebenem k_F . Der Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung geschrieben, hat hier die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{ee} + \mathcal{H}_{ei} + \mathcal{H}_{ii} \\ \mathcal{H}_{\text{kin}} &= \sum_{\vec{k}, s} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, s} \\ \mathcal{H}_{ee} &= \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \int d^3 r d^3 r' \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_{s'}^\dagger(\vec{r}') \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \hat{\Psi}_{s'}(\vec{r}') \hat{\Psi}_s(\vec{r}) \\ \mathcal{H}_{ei} &= - \sum_s \int d^3 r d^3 r' \frac{ne^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_s(\vec{r}') \\ \mathcal{H}_{ii} &= \frac{1}{2} \int d^3 r d^3 r' \frac{n^2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

wobei wir hier die Feldoperatoren der Elektronen verwendet haben mit der Definition

$$\hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \text{und} \quad \hat{\Psi}_s(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, s} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (3.6)$$

Die Variationsenergie berechnet sich als $E_g = \langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle$: die kinetische Energie

$$E_{\text{kin}} = \langle \Psi_0 | \mathcal{H}_{\text{kin}} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\vec{k}, s} \epsilon_{\vec{k}} \underbrace{\langle \Psi_0 | \hat{c}_{\vec{k}, s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, s} | \Psi_0 \rangle}_{= n_{\vec{k}, s}} = 2\Omega \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \epsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k}, s} = N \frac{3}{5} \epsilon_F \quad (3.7)$$

mit

$$n_{\vec{k}, s} = \begin{cases} 1 & |\vec{k}| \leq k_F \\ 0 & |\vec{k}| > k_F \end{cases} \quad (3.8)$$

und $N = \Omega n$ die Zahl der Valenzelektronen; die Coulomb-Abstossung zwischen Elektronen

$$\begin{aligned} E_{ee} &= \frac{1}{2} \int d^3 r d^3 r' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \underbrace{\sum_{s, s'} \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_{s'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\Psi}_{s'}(\vec{r}') \hat{\Psi}_s(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle}_{= n^2 - G(\vec{r} - \vec{r}')} \\ &= E_{\text{Hartree}} + E_{\text{Fock}}; \end{aligned} \quad (3.9)$$

die Coulomb-Anziehung zwischen Elektronen und Ionen

$$E_{ei} = - \int d^3r d^3r' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} n \underbrace{\sum_s \langle \Psi_0 | \widehat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \Psi_s(\vec{r}') | \Psi_0 \rangle}_{=n}; \quad (3.10)$$

die Coulomb-Abstossung der Ionen untereinander

$$E_{ii} = \langle \Psi_0 | \mathcal{H}_{ii} | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \frac{n^2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (3.11)$$

Die Coulomb-Abstossung zwischen den Elektronen führt auf zwei Terme, den *direkten* Term, der die Coulomb-Abstossung zwischen gleichmässig verteilten geladenen Teilchen beschreibt (Hartree: die Elektronen sehen einander nur als Mittelung), und den Fock-Term (Austauschterm) als Effekt des Austauschloches, welches aus der Fermi-Statistik folgt und dem Pauli-Ausschlussprinzip Rechnung trägt. Die Paarkorrelationsfunktion

$$\sum_{s,s'} \langle \Psi_0 | \widehat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \widehat{\Psi}_{s'}^\dagger(\vec{r}') \widehat{\Psi}_{s'}(\vec{r}') \widehat{\Psi}_s(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle = n^2 - G(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.12)$$

mit

$$G(\vec{r}) = \frac{9n^2}{2} \left(\frac{k_F |\vec{r}| \cos k_F |\vec{r}| - \sin k_F |\vec{r}|}{(k_F |\vec{r}|)^3} \right)^2 \quad (3.13)$$

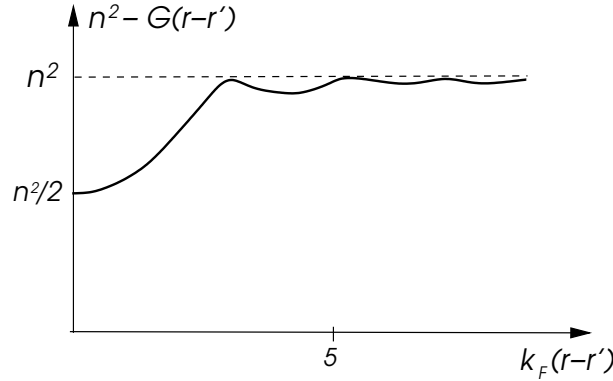


Abb. 3.1

Es ist leicht zu verifizieren, dass sich die Beiträge $E_{\text{Hartree}} + E_{ei} + E_{ii}$ wegheben. Übrigbleibt die kinetische Energie und der Fock-Term. Letzterer ist negativ:

$$E_{\text{Fock}} = -\Omega \frac{9n^2}{4} \int d^3r \frac{e^2}{|\vec{r}|} \left\{ \frac{\sin k_F |\vec{r}| - k_F |\vec{r}| \cos k_F |\vec{r}|}{(k_F |\vec{r}|)^3} \right\}^2 = -N \frac{3e^2}{4\pi} k_F. \quad (3.14)$$

Damit ist die gesamte Energie pro Elektron

$$\frac{E_g}{N} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{3e^2}{4\pi} k_F = \left\{ \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right\} \text{Ry} \quad (3.15)$$

wobei wir zuletzt eine dimensionslose Schreibweise eingeführt haben mit

$$n = \frac{3}{4\pi d^3} \Rightarrow r_s = \frac{d}{a_B} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{m e^2}{\hbar^2 k_F}, \quad (3.16)$$

d als mittlerer Radius des Volumens, das jedes Elektron einnimmt und r_s die entsprechende dimensionslose Grösse in Einheiten des Bohr-Radius ($1\text{Ry} = e^2/2a_B$). Die Energie E_g kann bezüglich r_s minimiert werden: $r_{s,\text{min}} = 4.83 \Rightarrow d \approx 2.41\text{\AA}$. Dies entspricht einer Gitterkonstante von $a = (4\pi/3)^{1/3} d \approx 3.9\text{\AA}$. Diese Abschätzung stimmt nicht schlecht mit den

Größen überein, die wir für die Alkali-Metalle (1. Kolonne in der Periodentabelle): $r_{s, Li} = 3.22$, $r_{s, Na} = 3.96$, $r_{s, K} = 4.86$, Offensichtlich ergeben die delokalisierten Elektronen eine Kohäsion für den positiv geladenen Hintergrund. Für Alkali-Metalle ist die Übereinstimmung deshalb so gut, weil hier nur ein Valenzelektron in einem s-Orbital der äusseren Schale sich bewegen kann, während alle anderen als Rumpfelektronen inaktiv sind (Edelgas-Konfiguration). Unsere variationelle Rechnung hat die Korrelationseffekte der Elektronen durch die Coulomb-Abstossung nicht berücksichtigt, d.h. die Tatsache, dass die Elektronen sich auch wegen der Wechselwirkung meiden. Dieser Effekt ist jedoch klein beim gegebenen Beispiel.

$$\frac{E_{\text{tot}}}{NRy} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \underbrace{0.062 \ln r_s - 0.096}_{\text{Korrelationskorrekturen}} + \dots \quad (3.17)$$

Es ist offensichtlich, dass im Bereich von $r_s \sim r_{s, \text{min}}$ diese Korrelationskorrekturen relativ klein sind.

3.2 Ladungsanregungen - Dielektrizitätsfunktion

Die elementaren Anregungen des metallischen Systemes ist analog zum Halbleiter durch Elektron-Loch-Anregungen gegeben. Im Gegensatz zum Halbleiter gibt es jedoch im Metall Anregungen beliebig kleiner Energie. Eine Eigenschaft, die diesen Effekt drastisch vor Augen führt, ist die Abschirmung des langreichweitigen Coulomb-Potentials. Eine negative Punktladung im Elektronengas führt zu einer Abnahme der Dichte der Elektronen in ihrer Umgebung (die negativ geladenen Elektronen werden abgestossen), so dass die Punktladung von einer bezüglich der uniformen Ladungsdichte der Elektronen positiv geladenen Wolke umgeben ist. Damit wird das Coulomb-Potential abgeschwächt:

$$V(r) = \frac{e^2}{r} \quad \rightarrow \quad V'(r) = e^2 \frac{e^{-r/l}}{r} \quad (3.18)$$

d.h. das Coulombpotential geht in das kurzreichweitige Yukawa-Potential über. Im Vergleich dazu können sich die Elektronen im Halbleiter nur wenig bewegen, so dass ihre Abschirmwirkung nicht so effektiv und dramatisch ist. Der Halbleiter wirkt als Dielektrikum, wie wir im vorhergehenden Kapitel gesehen haben, dessen Abschirmwirkung sich auf die Polarisierung lokalisierter elektrischer Dipolmomente beschränken:

$$V(r) = \frac{e^2}{r} \quad \rightarrow \quad V'(r) = \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (3.19)$$

d.h. das Coulombpotential wird durch eine Dielektrizitätskonstante ϵ renormiert.

3.2.1 Störungstheorie und Lindhard-Funktion

Wir untersuchen die Reaktion des Elektronengases auf ein zeitabhängiges äusseres Störpotential $V_a(\vec{r}, t)$ mit Hilfe zeitabhängiger Störungstheorie. Dabei wollen wir auch den Effekt der Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigen. Dies bedeutet, dass das effektive Potential, welches die Elektronen fühlen, aus V_a und einem induzierten Potential V_i zusammengesetzt ist, das sich aus der Ladungsverteilung der der Elektronen ergibt. Aufgrund Coulombwechselwirkung werden die Elektronen selbst zur Quelle eines Potentials. Die uniforme Dichte der Elektronen ist n_0 . Die Ladungsverteilung und das induzierte Potential hängen über die Poissongleichung zusammen:

$$n(\vec{r}, t) = n_0 + \delta n(\vec{r}, t) = \sum_s \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_s(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \vec{\nabla}^2 V_i = -4\pi e^2 \delta n(\vec{r}, t) \\ \vec{\nabla}^2 V_a = -4\pi e^2 n_a(\vec{r}, t) \end{cases} \quad (3.20)$$

Es geht darum $\delta n(\vec{r}, t)$ als Resultat der äusseren Störung zu bestimmen. Wir arbeiten mit den Einteilchen-Zuständen $|\vec{k}\rangle$ (freie ebene Wellen), für die gilt:

$$\mathcal{H}_{\text{kin}}|\vec{k}\rangle = \epsilon_{\vec{k}}|\vec{k}\rangle \quad \text{und} \quad \hat{n}_0|\vec{k}\rangle = n_{0,\vec{k}}|\vec{k}\rangle \quad (3.21)$$

wobei $\hat{n} = \hat{n}_0 + \delta\hat{n}$ der Dichte-Operator ist und $n_{0,\vec{k}}$ ist die Fermi-Dirac-Verteilung:

$$n_{0,\vec{k}} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)/k_B T} + 1} \quad (3.22)$$

Wir betrachten die Bewegungsgleichung des Dichteoperators mit dem Hamilton-Operator $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \hat{V}$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{n} = i\hbar \frac{d}{dt} \delta\hat{n} = [\mathcal{H}, \hat{n}] = \left\{ [\mathcal{H}_{\text{kin}}, \delta\hat{n}] + [\hat{V}, \hat{n}_0] \right\} + \text{höhere Ordnung in } V \quad (3.23)$$

wobei $\hat{V} = \hat{V}_a + \hat{V}_i \propto \hat{V}_a$ innerhalb dieser Näherung (lineare Antwort, linear response). Das Matrixelement $\langle \vec{k}' | \dots | \vec{k} \rangle$ dieser Gleichung ergibt

$$i\hbar \langle \vec{k}' | \frac{d}{dt} \delta\hat{n} | \vec{k} \rangle = (\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}}) \langle \vec{k}' | \delta\hat{n} | \vec{k} \rangle - (n_{0,\vec{k}'} - n_{0,\vec{k}}) \langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle \quad (3.24)$$

mit

$$\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int d^3r V(\vec{r}, t) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} = V_{\vec{q}}(t) \quad (3.25)$$

wobei $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$. Es ist nun möglich, eine einzelne Fourier-Komponente herauszunehmen, d.h. einen bestimmten Wellenvektor und eine bestimmte Frequenz:

$$V_a(\vec{r}, t) = V_a(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\omega t} e^{\eta t} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \delta n(\vec{r}, t) = \delta n(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\omega t} e^{\eta t} \\ V_i(\vec{r}, t) = V_i(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\omega t} e^{\eta t} \end{cases} \quad (3.26)$$

$\eta \rightarrow 0_+$ stellt das adiabatische Einschalten der Störung sicher. Aufgrund der linearen Beziehungen zwischen Potential und Dichte gilt

$$\delta n(\vec{q}, \omega) e^{-i\omega t} e^{\eta t} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, s} \langle \vec{k} + \vec{q} | \delta\hat{n} | \vec{k} \rangle \quad \text{und} \quad V_{\vec{q}}(t) = V(\vec{q}, \omega) e^{-i\omega t} e^{\eta t} \quad (3.27)$$

Die Poisson-Gleichung ist

$$-\vec{q}^2 V_i(\vec{q}, \omega) = -4\pi e^2 \delta n(\vec{q}, \omega) \quad (3.28)$$

Nun schreiben wir die Gleichung (3.24) um,

$$\begin{aligned} (\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta) \langle \vec{k} + \vec{q} | \delta\hat{n} | \vec{k} \rangle &= (n_{0,\vec{k}+\vec{q}} - n_{0,\vec{k}}) \langle \vec{k} + \vec{q} | \hat{V} | \vec{k} \rangle \\ \Rightarrow \delta n(\vec{q}, \omega) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, s} \frac{n_{0,\vec{k}+\vec{q}} - n_{0,\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta} V(\vec{q}, \omega) = \chi(\vec{q}, \omega) V(\vec{q}, \omega) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Daraus folgt mit (3.28), dass

$$V(\vec{q}, \omega) = V_a(\vec{q}, \omega) + V_i(\vec{q}, \omega) = V_a(\vec{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega) V(\vec{q}, \omega) \quad (3.30)$$

und

$$V(\vec{q}, \omega) = \frac{V_a(\vec{q}, \omega)}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \quad \text{mit} \quad \varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega) \quad (3.31)$$

Damit haben wir die dynamische Dielektrizitätsfunktion $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ definiert, mit

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, s} \frac{n_{0, \vec{k} + \vec{q}} - n_{0, \vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta} \quad (3.32)$$

wobei $\chi(\vec{q}, \omega)$, die Suszeptibilität durch die sogenannte *Lindhardt-Funktion* dargestellt wird.¹ Diese komplexe Funktion kann in Real- und Imaginärteil aufgespalten werden unter Zuhilfenahme der Beziehung:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{z - i\eta} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{z} \right) + i\pi\delta(z) \quad (3.34)$$

wobei der erste Term dem Hauptwert entspricht. Daher ist $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ mit

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\vec{q}, \omega) &= 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \sum_{\vec{k}, s} \mathcal{P} \left\{ \frac{n_{0, \vec{k} + \vec{q}} - n_{0, \vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega} \right\} \\ \varepsilon_2(\vec{q}, \omega) &= \frac{4\pi^2 e^2}{q^2 \Omega} \sum_{\vec{k}, s} (n_{0, \vec{k} + \vec{q}} - n_{0, \vec{k}}) \delta(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Der Imaginärteil hängt mit der Energieabsorption des Elektronensystems im zeitlich oszillierenden äusseren Potential zusammen und entspricht der Fermi Goldenen Regel der zeitabhängigen Störungstheorie, d.h. eine Rate für den Übergang des Systems vom Grundzustand in einen angeregten Zustand mit Impuls \vec{q} .

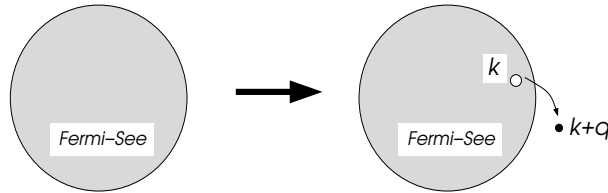


Abb. 3.2

Dabei handelt es sich um Teilchen-Loch-Paaranregungen, d.h. ein Elektron wird bei Impuls \vec{k} aus dem Fermi-See entnommen (hinterlässt ein Loch) und wird oberhalb des Fermi-Niveaus bei $\vec{k} + \vec{q}$ wieder eingesetzt. Die Energiedifferenz ist $\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} > 0$. Dies ist eine Form der Anregung des Elektronengases. Dabei spielt die Wechselwirkung zwischen den Elektronen nur eine untergeordnete oder gar keine Rolle. Analog zu den Halbleitern, ergeben diese Anregungen im Energie-Impuls-Grafen ein Kontinuum. In Abb.3.3 findet man, dass diese Anregungen im schraffierten Gebiet, wobei offensichtlich keine Energielücke vorhanden ist.

3.2.2 Kollektive Anregung - Plasma-Resonanz

Eine weitere Anregung ist die sogenannte Plasma-Resonanz. Diese ist eine *kollektive Anregung*, die nur vorkommt, falls es Wechselwirkung zwischen Elektronen gibt, insbesondere langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung. Diese Resonanz taucht bei endlicher Frequenz und kleinen \vec{q}

¹Die Gleichung (3.30) entpuppt sich bei genauerem Hinsehen als geometrische Reihe

$$V(\vec{q}, \omega) = V_a(\vec{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega) V_a(\vec{q}, \omega) + \left(\frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega) \right)^2 V_a(\vec{q}, \omega) + \dots \quad (3.33)$$

Störungstheoretisch entspricht dies einer Aufsummierung bis zu unendlicher Ordnung in Störungstheorie. Diese ist aber nicht eine exakte Lösung des Problems. Vielmehr wurde eine Selektion der Terme der Störungsreihe gemacht. Andere Terme wurden vernachlässigt mit der Begründung, dass ihr Beitrag sich aufgrund ihrer Phasenbeziehungen nahezu wegheben würde. Dies ist unter dem Namen "Random Phase Approximation" (RPA) bekannt, und stellt eine oft verwendete Näherung dar.

auf und erscheint als Pol in $1/\varepsilon(\vec{q}, \omega)$. Dies ist insbesondere für die optischen Eigenschaften des Metalls wichtig.

Zur Berechnung entwickeln wir die Grössen, die in $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ eingehen, für kleine \vec{q} :

$$\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} = \epsilon_{\vec{k}} + \vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} + \dots \quad \text{und} \quad n_{0, \vec{k}+\vec{q}} = n_{0, \vec{k}} + \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} + \dots \quad (3.36)$$

Beachte, dass $\partial n_0 / \partial \epsilon_{\vec{k}} = -\delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F)$ bei $T = 0$ und $\vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} = \hbar \vec{v}_F = \hbar v_F \vec{k} / k$ ist die Fermigeschwindigkeit. Dies erlaubt die folgende Näherung:

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}, \omega) &\approx -2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{v}_F \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}{\vec{q} \cdot \vec{v}_F - \omega - i\eta} \\ &\approx \frac{2}{(2\pi)^2} \int d \cos \theta \frac{k_F^2}{\hbar v_F} \left\{ \frac{q v_F \cos \theta}{\omega + i\eta} + \frac{q^2 v_F^2 \cos^2 \theta}{(\omega + i\eta)^2} + \dots \right\} \\ &= \frac{k_F^3}{3\pi^2 m (\omega + i\eta)^2} q^2 = \frac{n_0 q^2}{m (\omega + i\eta)^2} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Dies führt uns auf

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} = \frac{1}{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \quad \text{mit} \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n_0}{m} \quad (3.38)$$

wobei ω_p Plasmafrequenz genannt wird. Bei dieser Frequenz kann im Sinne linearer Response eine unendlich starke Reaktion des Systems durch beliebig kleine äussere Anregung erzeugt werden.

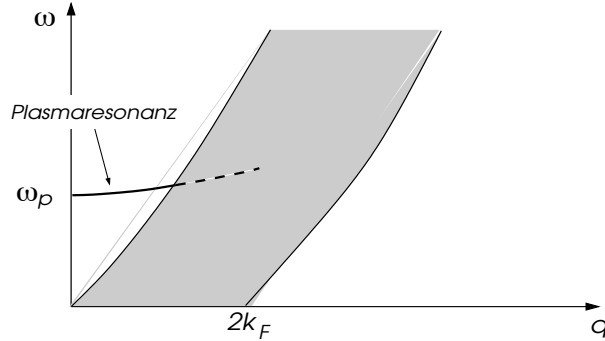


Abb. 3.3

Die \vec{q} -Abhängigkeit von ω_p kann durch Erweiterung der obigen Entwicklung in \vec{q} berechnet werden:

$$\omega_p(\vec{q}) = \omega_p \left(1 + \frac{3}{10} \frac{v_F^2 q^2}{\omega_p^2} + \dots \right) \quad (3.39)$$

Die Plasmaanregung hat also, ähnlich wie das Exziton, eine klare Energie-Impuls-Beziehung und kann daher als Quasiteilchen betrachtet werden. Auch dieses Quasiteilchen ist Bosonischer Natur und wird Plasmon genannt. Wenn das Plasmon jedoch mit dem Teilchen-Loch-Kontinuum verschmilzt, wird es gedämpft (Landau-Dämpfung). Dies bedeutet, es kann in Elektron-Loch-Anregungen zerfallen. Damit hat es eine endliche Lebensdauer, was sich in der Resonanzbreite der kollektiven Anregung ausdrückt.

Metall	ω_p (eV)
Li	7.1
Na	5.7
K	3.7
Mg	10.6
Al	15.3

Die Plasma-Anregung kann auch in einem klassischen Bild verstanden werden. Wir betrachten die negativ geladenen Elektronen und den positiv geladenen Ionenhintergrund. Wenn wir beide um die Strecke \vec{r} gegeneinander bewegen, erhalten wir die Polarization $\vec{P} = -n_0 e \vec{r}$ und das elektrische Feld $\vec{E} = 4\pi \vec{P}$, das eine Rückstellkraft bewirkt. Damit können wir für jedes Elektron die folgende Gleichung einer harmonischen Bewegung hinschreiben:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = -e \vec{E} = -4\pi e^2 n_0 \vec{r}. \quad (3.40)$$

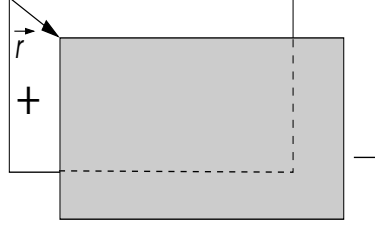


Abb. 3.4

Diese freie Oszillation hat die Frequenz

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n_0}{m} \quad (3.41)$$

wie in (3.38).

3.2.3 Abschirmeffekte

Als weiteren Grenzfall betrachten wir den statische Situation ($\omega = 0$). Aus der Entwicklung (3.36) erhalten wir

$$\chi(\vec{q}, 0) = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, s} \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F) = -\frac{1}{\pi^2} \frac{k_F^2}{\hbar v_F} = -\frac{3n_0}{2\epsilon_F} \Rightarrow \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, 0)} = \frac{1}{1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2}} \quad (3.42)$$

mit $k_{TF}^2 = 6\pi e^2 n_0 / \epsilon_F$ als der Thomas-Fermi-Wellenvektor. Daraus folgt, dass falls wir zum Beispiel für V_a eine Punktladung annehmen, das Potential in folgender Weise renormiert wird:

$$V(\vec{q}) = \frac{V_a(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q}, 0)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2} \Rightarrow V(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r}. \quad (3.43)$$

Wie oben erwähnt, wird das Potential durch die Umlagerung der Elektronen abgeschirmt und erhält die Form eines Yukawa-Potentials. Die Abschirmlänge ist k_{TF}^{-1} , die Thomas-Fermi-Abschirmlänge. In typischen Metallen ist k_{TF} vergleichbar mit k_F , d.h. die Abschirmlänge ist sehr kurz, $\sim 5 \text{ \AA}$.

Für ein freies Elektronensystem können wir die statische Dielektrizitätsfunktion berechnen. Man erhält nach einiger einfacher Rechnung

$$\epsilon(\vec{q}, 0) = 1 + \frac{4e^2 m k_F}{\pi q^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right\}. \quad (3.44)$$

Es fällt sofort auf, dass diese Funktion für kleine \vec{q} relativ schwach variiert, aber bei $q = \pm 2k_F$ eine logarithmische Singularität hat. Dies ist eine Konsequenz davon, dass die Fermifläche eine scharfe Struktur in k -Raum ist. Betrachten wir die induzierte Ladung, wenn wir eine Punktladung am Ursprung platzieren.²

$$\delta\rho(\vec{r}) = e \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right\} n_a(\vec{q}, 0) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = -\frac{e}{r} \int_0^\infty g(q) n_a(\vec{q}, 0) \sin qr \, dq \quad (3.46)$$

²Die Ladungsverteilung erhält man aus der Poissongleichung (3.28):

$$\delta n(\vec{q}) = \frac{q^2}{4\pi e^2} V_i(\vec{q}) = \chi(\vec{q}, 0) V(\vec{q}) = \chi(\vec{q}, 0) \frac{V_a(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q}, 0)} = \frac{1 - \epsilon(\vec{q}, 0)}{\epsilon(\vec{q}, 0)} n_a(\vec{q}, 0) \quad (3.45)$$

woraus wir durch Fourier-Transformation die Ladungsverteilung im reellen Raum erhalten.

mit

$$g(q) = \frac{q}{2\pi^2} \frac{\varepsilon(q) - 1}{\varepsilon(q)}. \quad (3.47)$$

Beachte, dass $g(q)$ sowohl für $q \rightarrow 0$ als auch $q \rightarrow \infty$ verschwindet. Das Integral kann nun zweifach partiell integriert werden

$$\delta n(\vec{r}) = \frac{e}{r^3} \int_0^\infty g''(q) \sin qrdq \quad (3.48)$$

wobei

$$g'(q) \approx A \ln|q - 2k_F| \quad \text{und} \quad g''(q) \approx \frac{A}{q - 2k_F} \quad (3.49)$$

in einem gewissen Bereich um $q \sim 2k_F$ dominant sind. Daher gilt

$$\delta n(r) \approx \frac{eA}{r^3} \int_{2k_F-\Lambda}^{2k_F+\Lambda} \frac{\sin[(q - 2k_F)r] \cos 2k_F r + \cos[(q - 2k_F)r] \sin 2k_F r}{q - 2k_F} dq \rightarrow \pi eA \frac{\cos 2k_F r}{r^3}. \quad (3.50)$$

mit einem Abschneideparameter, $\Lambda \rightarrow \infty$. Die induzierte Ladungsdichte besitzt sogenannte *Friedel-Oszillationen*.

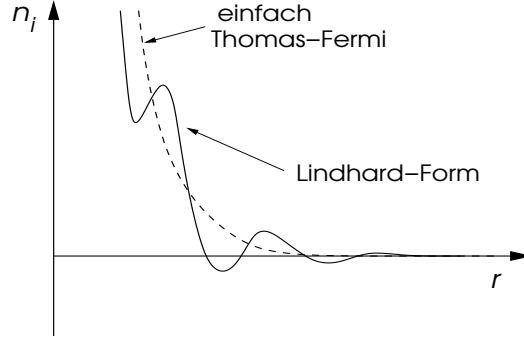


Abb. 3.5

Dielektrizitätsfunktion in verschiedenen Dimensionen: Wir haben oben die Dielektrizitätskonstante für die dreidimensionale parabolische Bandstruktur gesehen. Die analoge Rechnung ist auch für das ein- und zweidimensionale System möglich. Wir finden allgemein für die statische Suszeptibilität:

$$\chi(q, \omega = 0) = \begin{cases} -\frac{1}{2\pi q} \ln \left| \frac{s+2}{s-2} \right|, & 1D \\ -\frac{1}{2\pi} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{4}{s^2} \right) \theta(s-2) \right\}, & 2D \\ -\frac{k_F}{2\pi^2} \left\{ 1 - \frac{s}{4} \left(1 - \frac{4}{s^2} \right) \ln \left| \frac{s+2}{s-2} \right| \right\} & 3D \end{cases} \quad (3.51)$$

wobei $s = q/k_F$. Interessant ist die Tatsache, dass in allen Dimensionen $\chi(q, 0)$ eine Singularität bei $q = 2k_F$. Diese wird jedoch mit steigender Dimension schwächer. Ist es in einer Dimension eine logarithmische Divergenz, ist es in zwei Dimensionen noch ein Knick und in drei Dimensionen nur mehr eine Divergenz in der Ableitung. Es zeigt sich, dass solche Singularitäten verantwortlich sein können für Instabilitäten des metallischen Systems. Dies gilt insbesondere für das eindimensionale Metall.

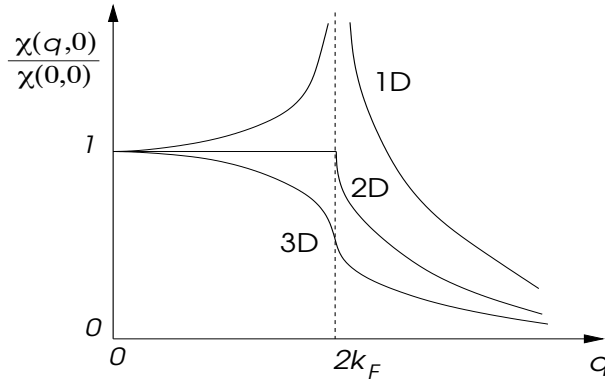


Abb. 3.6

3.3 Gitterschwingungen - Phononen im Metall

Das Ionengitter im Festkörper kann Schwingungen ausführen, die wir beschreiben, indem wir die Ionen einfach als ein kontinuierliches elastisches Medium betrachten. Dies reicht aus um einige wesentlichen Eigenschaften im Zusammenspiel zwischen Gitterschwingungen und Elektronen zu erhalten. Insbesondere werden wir auch Abschirmeffekte der Ionen beobachten können. Es ist klar, dass wir auf diesem Niveau nur Metalle mit einatomigen Einheitszellen beschreiben.

3.3.1 Schwingungen des isotropen elastischen Mediums

Die Deformation eines elastischen Mediums führt dazu, dass ein infinitesimales Raumelement d^3r , das sich im undeforinierten Zustand am Punkt \vec{r} befand neu bei $\vec{r}'(\vec{r})$ ist. Damit definieren wir das Auslenkungsfeld $\vec{u}(\vec{r}) = \vec{r}'(\vec{r}) - \vec{r}$ an jedem Punkt im Medium. Deformationen können auch zeitabhängig sein, so dass \vec{u} auch eine Funktion der Zeit ist. Die elastische Energie wird durch

$$E_{el} = \frac{\lambda}{2} \int d^3r \left\{ \vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t) \right\}^2 \quad (3.52)$$

gegeben, wobei λ das elastische Modul bezeichnet.³ Diese Form ist nur gültig, wenn die Wellenlänge der betrachteten Deformation gross im Vergleich zu den Gitterkonstanten ist, da sonst die diskrete Natur des Ionenhintergrundes eine Rolle spielt. Die kinetische Energie der Bewegung des Mediums ist gegeben durch

$$E_{kin} = \frac{\rho_0}{2} \int d^3r \left\{ \frac{\partial \vec{u}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right\}^2 \quad (3.54)$$

wobei $\rho_0 = M_i n_i$ die Massendichte darstellt (n_i : Dichte der Ionen). Das Lagrange-Funktional $L[\vec{u}] = E_{kin} - E_{el}$ ergibt durch Variation die Bewegungsgleichung

$$\frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{u}(\vec{r}, t) - \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}, t)) = 0 \quad (3.55)$$

³Beachte, dass die elastische Energie eines isotropen Mediums komplett folgende Form hat:

$$E_{el} = \int d^3r \sum_{\alpha, \beta=x,y,z} \left[\frac{\lambda}{2} (\partial_\alpha u_\alpha) (\partial_\beta u_\beta) + \mu (\partial_\alpha u_\beta) (\partial_\alpha u_\beta) \right] \quad (3.53)$$

wobei $\partial_\alpha = \partial/\partial r_\alpha$. Die Lamé-Koeffizienten λ und μ beschreiben die elastischen Eigenschaften. Der zweite Term führt zu transversen Wellen. Falls $\mu = 0$ gewählt wird, dann gibt es nur longitudinale Wellen.

mit $c_s^2 = \lambda/\rho_0$. Das Auslenkungsfeld kann in Normalmoden entwickelt werden,

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} \vec{e}_{\vec{k}} \left\{ q_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + q_{\vec{k}}^*(t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right\} \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dt^2} q_{\vec{k}} + \omega_{\vec{k}}^2 q_{\vec{k}} = 0 \quad (3.56)$$

wobei $\omega_{\vec{k}} = c_s |\vec{k}| = c_s k$. Beachte, dass die Moden longitudinal polarisiert sind, d.h. $\vec{\nabla} \times \vec{u}(\vec{r}, t) = 0$ with $\vec{e}_{\vec{k}} \parallel \vec{k}$. Die Energie lässt sich dann ausdrücken als

$$E = \sum_{\vec{k}} \rho_0 \omega_{\vec{k}}^2 \left\{ q_{\vec{k}}(t) q_{\vec{k}}^*(t) + q_{\vec{k}}^*(t) q_{\vec{k}}(t) \right\}. \quad (3.57)$$

Wir führen neue Variablen ein:

$$Q_{\vec{k}} = \sqrt{\rho_0} (q_{\vec{k}} + q_{\vec{k}}^*) \quad \text{und} \quad P_{\vec{k}} = \frac{d}{dt} Q_{\vec{k}} = -i\omega_{\vec{k}} \sqrt{\rho_0} (q_{\vec{k}} - q_{\vec{k}}^*) \quad (3.58)$$

woraus sich für die Energie die einfache Form ergibt:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \left\{ P_{\vec{k}}^2 + \omega_{\vec{k}}^2 Q_{\vec{k}}^2 \right\} \quad (3.59)$$

Dies entspricht einem unabhängigen harmonischen Oszillator für jede einzelne Mode \vec{k} . Wir können diese quantisieren, indem wir Operatoren $P_{\vec{k}} \rightarrow \hat{P}_{\vec{k}}$ und $Q_{\vec{k}} \rightarrow \hat{Q}_{\vec{k}}$ definieren mit

$$[\hat{Q}_{\vec{k}}, \hat{P}_{\vec{k}'}] = i\hbar \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}. \quad (3.60)$$

Dies erlaubt es uns Auf- und Absteige-Operatoren einzuführen:

$$\hat{b}_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\vec{k}}}} \left(\omega_{\vec{k}} \hat{Q}_{\vec{k}} + i \hat{P}_{\vec{k}} \right) \quad \text{und} \quad \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\vec{k}}}} \left(\omega_{\vec{k}} \hat{Q}_{\vec{k}} - i \hat{P}_{\vec{k}} \right), \quad (3.61)$$

die die Kommutationsrelationen

$$[\hat{b}_{\vec{k}}, \hat{b}_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \quad [\hat{b}_{\vec{k}}, \hat{b}_{\vec{k}'}] = [\hat{b}_{\vec{k}}^\dagger, \hat{b}_{\vec{k}'}^\dagger] = 0 \quad (3.62)$$

erfüllen. Damit können wir aus der Energie mittels des Korrespondenzprinzips den Hamilton-Operator herleiten:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}} \left\{ \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right\} \quad (3.63)$$

Dieser Hamilton-Operator ist formal analog zur kinetischen Energie der Elektronen. Wir können die Operatoren $\hat{b}_{\vec{k}}^\dagger$ und $\hat{b}_{\vec{k}}$ als Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für das "Phonon" betrachten, ein Quasiteilchen mit einer eindeutigen Impuls-Energie-Beziehung. Das Phonon erfüllt die Kommutationsrelationen für Bosonen. Als kollektive Anregung des wechselwirkenden Systems haben Phononen bosonische Natur.

Wie oben erwähnt ist das Näherung durch das kontinuierliche Medium nur bei grossen Wellenlänge oder kleinen \vec{k} anwendbar. Die diskrete Natur des Gitter kommt zum Vorschein, wenn $\vec{k} \sim \pi/a$. Dann finden wir auch Abweichungen von der linearen Dispersion in $\omega_{\vec{k}}$. Wir bezeichnen den maximalen Wellenvektor als k_D , Debye-Wellenvektor. Dies definiert die Debye-Frequenz $\omega_D = c_s k_D$ und die Debye-Temperatur $\Theta_D = \hbar\omega_D/k_B$.

Da unsere Beschreibung des Gitters durch ein kontinuierliches Medium nur für eine einatomige Basis der Einheitszelle anwendbar ist, kommen hier keine optischen, sondern nur akustische Phononen vor.

3.3.2 Phononen im Metall

Die Betrachtung, die wir hier angestellt haben, ist sicherlich anwendbar, wenn wir einen Halbleiter betrachten. Die Wechselwirkung zwischen den Gitterionen wird durch kovalente Bindungen erzeugt und kann um die Gleichgewichtslage nahrungsweise als harmonisches Potential betrachtet werden. Damit ist die obige Form der elastischen Energie gerechtfertigt. Wie steht es aber fur ein Metall, in dem die positiv geladenen Ionen uber das langreichweitige Coulomb-Potential miteinander koppeln sind? Analog zu der Beschreibung der Plasma-Anregung der Elektronen konnen wir die Bewegung des Ionengitters als kollektive Bewegung betrachten. Konzentrieren wir uns auf den Grenzfall $\vec{k} \rightarrow 0$, dann ist die Anregungsenergie durch die Ionen-Plasma-Frequenz beschrieben:

$$\text{Elektronen: } \omega_p^2 = \frac{4\pi n_0 e^2}{m} \quad \text{Ionen: } \Omega_p^2 = \frac{4\pi n_i (Z_i e)^2}{M_i} \quad (3.64)$$

wobei $n_i = n_0/Z_i$ die Dichte der Ionen mit Ladungszahl Z_i und Masse M_i bezeichnet. Offenbar verschwindet die Anregungsfrequenz im Grenzfall $\vec{k} \rightarrow 0$ nicht.

Diese Betrachtungsweise lasst jedoch die Elektronen ausser acht, die jeder Bewegung der Ionen adiabatisch folgen. Die Elektronen sind wegen ihrer geringeren Masse in der Lage sich fast instantan einem modulierten Ionenhintergrund anzupassen. Die endliche Plasma-Frequenz ist eine Konsequenz der Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials. Wir haben jedoch oben gesehen, dass die Elektronen das Coulomb-Potential abschirmen, insbesondere im Bereich kleiner \vec{k} . Daher ist obige Plasma-Frequenz eine Grose der "nackten" Ionen.

Die Prasenz der Elektronen fuhrt zu einer Renormierung des Coulomb-Potentials durch $1/\epsilon(\vec{k}, \omega)$. Fur das Ionengitter wird die Ruckstellkraft in dieser Weise renormiert. Die Phononfrequenz ist proportional zu dieser Ruckstellkraft, so dass

$$\omega_{\vec{k}}^2 = \frac{\Omega_p^2}{\epsilon(\vec{k}, 0)} = \frac{k^2 \Omega_p^2}{k^2 + k_{TF}^2} \approx (c_s k)^2 \quad (3.65)$$

und die Schallgeschwindigkeit c_s ist

$$c_s^2 \approx \frac{\Omega_p^2}{k_{TF}^2} = \frac{Z m \omega_p^2}{M_i k_{TF}^2} = \frac{1}{3} Z \frac{m}{M_i} v_F^2 \quad (3.66)$$

Es gilt fur die Energieskalen:

$$\frac{\Theta_D}{T_F} = \frac{\hbar \omega_D}{E_F} = \frac{\hbar c_s k_D}{\frac{1}{2} \hbar k_F v_F} = \frac{2 k_D c_s}{k_F v_F} \sim \frac{c_s}{v_F} = \sqrt{\frac{1}{3} Z \frac{m}{M_i}} \ll 1 \quad (3.67)$$

Kohn-Anomalie: Beachte, dass die Phonon-Frequenzen viel kleiner sind als die Plasmafrequenz, so dass sich

$$\omega_{\vec{k}}^2 = \frac{\Omega_p^2}{\epsilon(\vec{k}, 0)} \quad (3.68)$$

nicht nur auf den Grenzfall von kleinen Wellenvektoren anwenden lasst. Wenn wir die volle Lindhard-Form fur $\epsilon(\vec{k}, 0)$ einsetzen erhalten wir, dass die Phononfrequenz bei $|\vec{k}| = 2k_F$ eine Singularitat aufweist. Man findet, dass

$$\frac{\partial \omega_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \rightarrow \infty \quad \text{fur } k \rightarrow 2k_F. \quad (3.69)$$

Dieses Verhalten nennt man *Kohn Anomalie* und resultiert aus der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen. Offensichtlich ist dieser Effekt nicht im ursprunglichen Modell des elastischen Mediums enthalten, da er bedingt, dass die Elektronen mit den Phonon wechselwirken.

3.3.3 Peierls-Instabilität in einer Dimension

Die Kohn-Anomalie kommt besonders drastisch in eindimensionalen Elektronensystemen zum Vorschein. Hier kommt es zu einer Instabilität des metallischen Zustandes durch die Kopplung der Elektronen und Phonon.

Wir betrachten das eindimensionale Jellium-Modell, wobei die Ionen ein elastisches Medium bilden mit Auslenkungsfeld u entlang der eindimensionalen Richtung. Die Wechselwirkung der Elektronen untereinander wird hier vernachlässigt. Der Hamilton-Operator ist folglich

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\vec{k}s}^\dagger c_{\vec{k}s} - n_0 \sum_s \int dx dx' V(x-x') \frac{d}{dx} u(x) \hat{\Psi}_s^\dagger(x') \hat{\Psi}_s(x') + \frac{\lambda}{2} \int dx \left(\frac{du}{dx}(x) \right)^2 \quad (3.70)$$

wobei $du/dx = -\delta n/n_0$ die Dichteänderung des elastischen Mediums beschreibt. Allgemein entspricht die Divergenz des Auslenkungsfeldes der Dichteänderung, $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -\delta n/n_0$. Daher beschreibt der zweite Term die Kopplung der Elektronen an die Ladungsdichteschwankungen des positiv geladenen Hintergrunds. $V(x-x')$ ist die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung. Wir betrachten nun N Elektronen (Dichte $n = N/L$) im Grundzustand. Der Fermiwellenvektor für die freien Elektronen (uniformer Hintergrund: $du/dx = 0$) ist leicht zu bestimmen

$$N = \sum_s \int_{-k_F}^{+k_F} dk 1 = 2 \frac{L}{2\pi} 2k_F \quad \Rightarrow k_F = \frac{\pi}{2} n \quad (3.71)$$

Für dieses System betrachten wir nun die Kohn-Anomalie, die im Falle eines eindimensionalen Elektronensystems besonders ausgeprägt ist. Wir wollen in (3.70) die Renormierung des elastischen Moduls durch die Kopplung an die Elektronen durch Störungsrechnung bestimmen. Die Kopplung zwischen Elektronen und Deformation kann im Impulsraum umgeschrieben werden als

$$\hat{V}_{ep} = i \sum_{k,q,s} q \{ \tilde{V}_q u_q \hat{c}_{k+q,s}^\dagger \hat{c}_{k,s} - \tilde{V}_{-q} u_{-q} \hat{c}_{k,s}^\dagger \hat{c}_{k+q,s} \}. \quad (3.72)$$

wobei $\tilde{V}_q = 4\pi e^2/q^2 \epsilon(q, 0)$. Wir verwenden nun die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie in dieser Kopplung, um eine Korrektur in zweiter Ordnung zur Grundzustandsenergie zu bestimmen, die quadratisch im Auslenkungsfeld ist (es gibt keinen Beitrag erster Ordnung). Dies ergibt

$$\begin{aligned} \Delta E^{(2)} &= - \sum_{k,q,s} q^2 |\tilde{V}_q|^2 u_q u_{-q} \sum_n \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{c}_{k,s}^\dagger \hat{c}_{k+q,s} | n \rangle|^2 + |\langle \Psi_0 | \hat{c}_{k+q,s}^\dagger \hat{c}_{k,s} | n \rangle|^2}{E_n - E_0} \\ &= \sum_q |\tilde{V}_q|^2 q^2 u_q u_{-q} \sum_k \frac{n_{k+q} - n_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} = \Omega \sum_q |\tilde{V}_q|^2 q^2 \chi(q, 0) u_q u_{-q} \end{aligned} \quad (3.73)$$

wobei die virtuellen Zustände $|n\rangle$ Elektron-Loch-Anregungen des Fermisees entsprechen. Der Vergleich mit dem elastischen Term $(\Omega\lambda/2) \sum_q q^2 u_q u_{-q}$ in (3.70) zeigt, dass das elastische Modul und damit die Phononfrequenz renormiert wird:

$$\omega_q^{(ren)2} \approx \omega_q^2 + \frac{|\tilde{V}_q|^2 q^2}{\rho_0} \chi(q, 0) = \omega_q^2 - \frac{|\tilde{V}_q|^2 q}{2\pi\rho_0} \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| \quad (3.74)$$

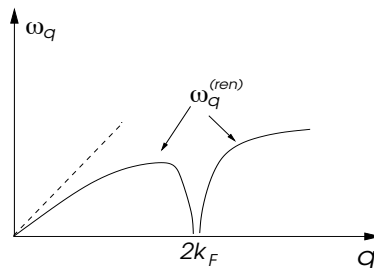


Abb. 3.7

Offensichtlich wird die Schallgeschwindigkeit ($q \rightarrow 0$) renormiert. Dieser Effekt ist aber weniger dramatisch als die Modifikation bei $q = 2k_F$. Hier wird das Phononspektrum "weich", d.h. die Frequenz geht zu Null und wird sogar negativ was ein Mangel der Störungsnäherung ist.⁴ Dies weist auf eine Instabilität hin, bei der Bosonzustände bei $q = 2k_F$ eine kondensieren ("Bose-Einstein-Kondensation") und damit den Grundzustand verändern. Dies entspricht einem kohärenten Zustand der Phononen, in diesem Falle einer statischen periodischen Deformation des Ionen-Hintergrundes mit dem Wellenvektor $2k_F$.

Das unphysikalische Verhalten der Frequenz ω_q zeigt an, dass wir diese Situation eben nicht störungstheoretisch angehen können, sondern auch die gemeinsame Reaktion der Elektronen und Phononen genauer betrachten müssen. Dies tun wir nun, indem wir annehmen, dass der Hintergrund ein einfache statische periodische Modulation besitzt (kohärenter Phonon-Zustand):

$$u(x) = u_0 \cos(Qx) \quad (3.76)$$

wobei $Q = 2k_F$ und $u(x)$ dem erwähnten kohärenten Zustand entspricht. Wir zeigen nun, dass eine solche periodische Modulation des elastischen Mediums die Energie des Elektronensystems verringert. Wenn wir annehmen, dass u_0 klein ist, können wir nun analog zur Methode der fast freien Elektronen die Energie der unabhängigen Elektronen ausrechnen. Daher wird jetzt Q effektiv ein reziproker Gittervektor. Wir betrachten das Elektronspektrum für $0 \leq k \leq Q$, welches für kleine u_0 näherungsweise durch die Säkulargleichung

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E & \Delta \\ \Delta^* & \frac{\hbar^2 (k-Q)^2}{2m} - E \end{pmatrix} = 0 \quad (3.77)$$

$$\Rightarrow E_{k\pm} = \frac{\hbar^2}{4m} \left[(k-Q)^2 + k^2 \pm \sqrt{\{(k-Q)^2 - k^2\}^2 + 16m^2 |\Delta|^2 / \hbar^4} \right]$$

gegeben ist. Δ folgt aus der Fourier-Transformation des Potentials $V(x)$:

$$\Delta = -iQ u_0 n \tilde{V}_Q \quad \text{mit} \quad \tilde{V}_Q = \int dx e^{iQx} V(x) \quad (3.78)$$

Die Gesamtenergie ist nun gegeben durch

$$E_{tot}(u_0) = 2 \sum_{0 \leq k < Q} E_{k-} + \frac{\lambda L Q^2}{4} u_0^2 \quad (3.79)$$

wobei alle Zustände des unteren Bands (E_{k-}) besetzt und alle des oberen Bandes (E_{k+}) leer sind. Wir minimieren E_{tot} bezüglich u_0 :

$$\begin{aligned} 0 = \frac{1}{L} \frac{dE_{tot}}{du_0} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{32Q^2 m^2 n^2 \tilde{V}_Q^2}{\hbar^4} u_0 \int_0^Q \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\{(k-Q)^2 - k^2\}^2 + 16m^2 Q^2 n^2 \tilde{V}_Q^2 u_0^2 / \hbar^4}} + \frac{\lambda}{2} Q^2 u_0 \\ &= -u_0 \frac{4Qmn^2 \tilde{V}_Q^2}{\hbar^2 \pi} \int_{-k_F}^{+k_F} dq \frac{1}{\sqrt{q^2 + 4m^2 n^2 \tilde{V}_Q^2 u_0^2 / \hbar^4}} + \frac{\lambda}{2} Q^2 u_0 \\ &= -u_0 \frac{8Qmn^2 \tilde{V}_Q^2}{\hbar^2 \pi} \operatorname{arsinh} \left(\frac{\hbar^2 k_F}{2mn \tilde{V}_Q u_0} \right) + \frac{\lambda}{2} Q^2 u_0 . \end{aligned} \quad (3.80)$$

⁴Beachte, dass der Ausdruck

$$\omega_q^2 = \frac{\Omega_p^2}{\varepsilon(q, 0)} \quad (3.75)$$

aus (3.68) keine negativen Energien liefert, sondern eine Nullstelle von ω_q bei $q = 2k_F$.

Wir lösen diese Gleichung auf, wobei wir verwenden, dass $\text{arsinh}(x) \approx \ln(2x)$ für $x \gg 1$.

$$u_0 = \frac{\hbar^2 k_F}{mn\tilde{V}_Q} \exp \left\{ -\frac{\hbar^2 k_F \pi \lambda}{8mn^2\tilde{V}_Q^2} \right\} = \frac{2}{k_F} \frac{\epsilon_F}{n\tilde{V}_Q} e^{-1/N(0)g} \quad (3.81)$$

wobei die Fermienergie $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ und die Zustandsdichte an der Fermienergie $N(0) = 2m / \pi \hbar^2 k_F$. Wir führen hier die Kopplungskonstante g ein, die die durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung induzierte effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung beschreibt: $g = 4n^2 \tilde{V}_Q^2 / \lambda$. Diese Kopplung ist umso stärker je weicher und polarisierbar der Ionenhintergrund ist, d.h. je kleiner das elastische Modul λ ist. Beachte, dass die Auslenkung u_0 exponentiell von der Kopplung und der Zustandsdichte abhängt.

Der Grund für diese Instabilität, Peierls-Instabilität genannt, liegt in der Öffnung einer Energielücke bei $k = \pm k_F$, also an der Fermienergie.

$$\Delta E = E_{k_{F+}} - E_{k_{F-}} = 2|\Delta| = 8\epsilon_F \exp \left(-\frac{1}{N(0)g} \right) \quad (3.82)$$

Dies führt auf die Senkung der Energie der gefüllten Elektronenzustände in der Nähe der Fermienergie. Wir nennen die daher auch eine Fermiflächen-Instabilität. Damit wird das Metall zum Halbleiter mit einer Energielücke für alle Elektron-Loch-Anregungen.

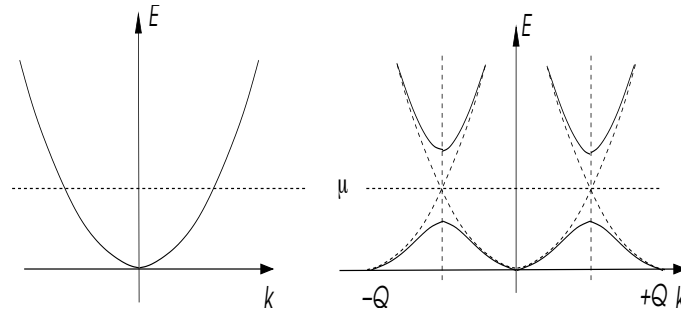


Abb. 3.8

Die Elektronen folgen in ihre eigenen Modulation der Ionengitterdeformation, denn die Wellenfunktion ist eine Überlagerung von zwei ebenen Wellen mit Wellenvektoren, die sich um Q unterscheiden:

$$\psi'_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \frac{\Delta e^{ikx} + (E_k - \epsilon_k) e^{i(k-Q)x}}{\sqrt{(E_k - \epsilon_k)^2 + |\Delta|^2}} \quad (3.83)$$

woraus folgt

$$\rho_k(x) = -e|\psi'_k(x)|^2 = -\frac{e}{\Omega} \left\{ 1 - \frac{2(\epsilon_k - E_k)|\Delta|}{(E_k - \epsilon_k)^2 + |\Delta|^2} \sin Qx \right\} \quad (3.84)$$

und die Dichtemodulation

$$\delta\rho(x) = \sum_k \rho_k(x) + en = \frac{e}{2} \int_0^{k_F} \frac{dk'}{2\pi} \frac{m|\Delta| \sin Qx}{\sqrt{\hbar^4 k_F^2 k'^2 + m^2 |\Delta|^2}} = \frac{en|\Delta|}{16\epsilon_F} \ln \left| \frac{2\epsilon_F}{|\Delta|} \right| \sin(2k_F x) \quad (3.85)$$

d.h. die Elektronen folgen der Hintergrundsdeformation. Wir nennen einen solchen Zustand eine *Ladungsdichtewelle* (charge density wave (CDW)).

Diese Instabilität ist wichtig in quasi-eindimensionalen Metallen, unter anderem in organischen Leitern (TTF·TCNQ, tetrathiafulvalene tetracyanoquinodemethane). In höheren Dimensionen ist der Effekt der Kohn-Anomalie im Allgemeinen nicht so stark, so dass dort spontane Deformation dieser Art eher selten sind. Es ist aber möglich, dass spezielle Bandstruktur-Eigenschaften Situationen ergeben, die quasi-eindimensionales Verhalten zeigen, insbesondere gilt dies für

Bänder, deren Fermiflächen einen oder mehrere "Nesting-Vektoren" haben, wie wir später in einem anderen Zusammenhang sehen werden. Dann können solche Fermiflächen-Instabilitäten auftreten. Andererseits spielt aber in höheren Dimensionen die Elektron-Phonon-Wechselwirkung eine wichtige Rolle für die Supraleitung, die eine andere Art von Fermiflächen-Instabilität darstellt.

3.3.4 Phononen und die Dielektrizitätsfunktion

Wir haben gesehen, wie ein externes Potential durch die Polarisierung der Elektronen renormiert und abgeschirmt wird. Wenn sich nun auch der positiv geladene Ionenhintergrund durch Deformation polarisieren lässt, sollte er auch in die Renormierung der Potentiale miteinbezogen werden. Es gilt also für die Beziehung zwischen renormiertem und äusserem Potential

$$\varepsilon V_{ren} = V_a \quad (3.86)$$

Wir definieren Dielektrizitätsfunktion für die Ionen: die "nackte", ε_n^{ion} , und die renormierte, ε_{ren}^{ion} . Die erstere vernachlässigt und die letztere berücksichtigt die Abschirmeffekte der Elektronen auf die Wechselwirkung der Ionen. Es ist hilfreich, die Renormierung von zwei Standpunkten her zu betrachten:

1) das "äussere Potential" beinhaltet auch das Potential der Ionen, so dass nur die Elektronen für die Abschirmung nötig sind:

$$\varepsilon^{el} V_{ren} = V_a + V_{ion} ; \quad (3.87)$$

2) das "äussere Potential" wird um das Elektronenpotential ergänzt, so dass die Renormierung Sache der nackten Ionen ist:

$$\varepsilon_n^{ion} V_{ren} = V_a + V_{el} \quad (3.88)$$

Beachte in (3.88) stecken alle Effekte der Elektronenpolarisation in V_{el} , woraus folgt, dass die Dielektrizitätsfunktion von den nackten Ionen herrührt. Wenn wir (3.87) und (3.88) addieren und davon (3.86) subtrahieren, dann erhalten wir

$$(\varepsilon^{el} + \varepsilon_n^{ion} - \varepsilon) V_{ren} = V_a + V_{el} + V_{ion} = V_{ren} \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon_n^{ion} - 1 \quad (3.89)$$

Wenn wir nun das renormierte Potential in Beziehung zum äusseren Potential setzen wollen, können wir ansetzen

$$V_{ren} = \frac{1}{\varepsilon} V_a = \frac{1}{\varepsilon_{ren}^{ion}} \frac{1}{\varepsilon^{el}} V_a \quad (3.90)$$

d.h. das effektive Potential V_a/ε^{el} welches durch die Polarisierung der Elektronen zustande kommt, wird dann auch noch von den Ionen abgeschirmt, die untereinander über von Elektronen abgeschirmte Wechselwirkungen koppeln. Aus dieser Beziehung und (3.89) erhalten wir

$$\varepsilon_{ren}^{ion} = 1 + \frac{1}{\varepsilon^{el}} (\varepsilon_n^{ion} - 1) \quad (3.91)$$

Aufgrund obiger Betrachtung bezüglich der Plasmaanregung der nackten Ionen machen wir in Anlehnung an (3.38) folgende Näherung:

$$\varepsilon_n^{ion} = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2} \quad (3.92)$$

womit wir für kleine \vec{k} erhalten

$$\varepsilon = 1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2} - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2} = \left(1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2}\right) \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \quad (3.93)$$

unter Verwendung von

$$\varepsilon^{el} = 1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2} . \quad (3.94)$$

Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen wird zu einer effektiven Wechselwirkung:

$$V^{eff}(\vec{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(\vec{q}, \omega)} = \frac{4\pi e^2}{k_{TF}^2 + q^2} \left\{ 1 + \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_q^2} \right\}. \quad (3.95)$$

Diese Wechselwirkung entspricht dem Matrixelement für einen Streuprozess zwischen zwei Elektronen mit Impuls- und Energieübertrag \vec{q} bzw. ω .

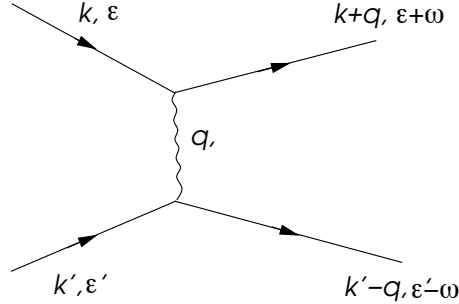


Abb. 3.9

Die Phononfrequenz ist kleiner als die Debye-Frequenz ω_D . Der Effekt der Phonon ist unmerklich, wenn der Energieübertrag viel grösser als ω_D ist. Die Zeitskala für die Reaktion würde in diesem Fall viel zu schnell sein für die langsame Bewegung der (schweren) Ionen. Interessanterweise ist die Wechselwirkung aber *attraktiv* für $\omega < \omega_D$. Diese geschieht aufgrund einer Überkompensation durch die Ionen. Dieser Aspekt der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist sehr wichtig für die Supraleitung, wie wir später sehen werden.

3.4 Fermifläche - de Haas-van Alphen-Effekt

Der Grundzustand eines normalen Metalls ist dadurch ausgezeichnet, dass es eine scharfe wohldefinierte Fermifläche gibt, an der die Besetzungszahlfunktion $n_{\vec{k}}$ eine Unstetigkeit besitzt. Eine der besten Methoden, die Existenz einer Fermifläche nachzuweisen und ihre Form zu bestimmen, ist das de Haas-van Alphen-Experiment. Dabei geht es um das Verhalten der Elektronen in einem grossen Magnetfeld bei tiefen Temperaturen.

3.4.1 Landau-Niveaus

Ein freies Elektronengas ist einem uniformen, äusseren Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$ ausgesetzt. Der entsprechende Einelektron-Hamilton-Operator hat die Form

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{g\mu_B}{\hbar} \hat{S}_z B \quad (3.96)$$

wobei wir die Landau-Eichung wählen $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ so dass $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Damit lässt sich (3.96) umschreiben:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} Bx \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \frac{g\mu_B}{\hbar} \hat{S}_z B \quad (3.97)$$

Dies entspricht einem verschobenen harmonischen Oszillator entlang der x -Richtung, der mit dem Ansatz

$$\psi(\vec{r}) = e^{ik_z z} e^{ik_y y} \phi(x) \xi_s \quad (3.98)$$

gelöst werden kann (ξ_s : Spinorwellenfunktion). Die stationären Zustände besitzen die Wellenfunktion

$$\phi_{n, k_y}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! 2\pi \ell^2}} H_n[(x - k_y \ell^2)/\ell] e^{-(x - k_y \ell^2)^2 / 2\ell^2} \quad (3.99)$$

mit $H_n(x)$ als Hermite-Polynomen, $\ell^2 = \hbar c/|eB|$ und den Energien

$$E_{n,k_z,s} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{g\mu_B}{\hbar} B s \quad (3.100)$$

wobei $s = \pm\hbar/2$, $n = 0, 1, 2, \dots$ und die Zyklotronfrequenz $\omega_c = |eB|/mc$. Beachte, dass die Energie nicht von k_y abhängt, so dass mit der ebenen Wellenform $e^{ik_y y}$ keine kinetische Energie verbunden ist. Vielmehr hängt die Form der Wellenfunktion mit der Eichung zusammen.⁵ Die Entartung der Zustände ist interessant. Wir betrachten $k_z = 0$ und vernachlässigen den Spin. Wir nehmen an, dass periodische Randbedingungen im Kubus $L \times L \times L$ gelten. Das Zentrum von $\phi(x)$ liegt bei $k_y \ell^2$ mit der Bedingung $0 < k_y \ell^2 < L$ und $k_y = 2\pi n_y/L$. Damit ergibt sich aus der Zählung der möglichen n_y die Entartung:

$$0 < \frac{2\pi n_y \ell^2}{L} < L \quad \Rightarrow \quad N_n = \frac{L^2}{2\pi \ell^2} \quad (3.102)$$

Die Energien entsprechen einem diskreten Set von eindimensionalen Systemen. Damit ist die Zustandsdichte durch die starke Struktur der eindimensionalen Dispersion entlang der z -Richtung bestimmt:

$$\begin{aligned} N_0(E, n, s) &= \frac{N_n}{\Omega} \sum_{k_z} \delta(E - E_{n,k_z,s}) = \frac{1}{2\pi \ell^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} \delta \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{g\mu_B}{\hbar} B s \right) \\ &= \frac{(2m)^{3/2} \omega_c}{8\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{E - \hbar\omega_c(n + 1/2) + g\mu_B B s/\hbar}} \end{aligned} \quad (3.103)$$

Die gesamte Zustandsdichte erhalten wir durch Summierung über $n = 0, 1, 2, \dots$ und $s = \pm\hbar/2$. Im Vergleich die Zustandsdichte für $B = 0$:

$$N_0(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, s} \delta \left(E - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \quad (3.104)$$

In Abb.3.10 bilden wir die Zustandsdichte für eine Spinkomponente ab.

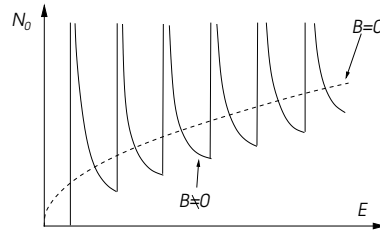


Abb. 3.10

3.4.2 Oszillationen der Magnetisierung

Die glatte Zustandsdichte des dreidimensionalen Metalls wird im Magnetfeld durch eine stark strukturierte Form ersetzt, die durch die Quadratwurzel-Singularitäten dominiert, deren Positionen vom Magnetfeld abhängen. Wir betrachten die freie Energie

$$F = N\mu - TS = N\mu - k_B T \sum_{k_z, k_y, n, s} \ln \left(1 + e^{-(E_{n,k_z,s} - \mu)/k_B T} \right). \quad (3.105)$$

⁵Die Eichfreiheit des Vektorpotentials geht auch in die Wellenfunktion ein. Es gilt nämlich

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \rightarrow \vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \chi(\vec{r}, t) \quad \Rightarrow \quad \psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t) e^{i\hbar c \chi(\vec{r}, t)/e} \quad (3.101)$$

d.h. die Wellenfunktion erhalten eine Phasenänderung.

Es ist interessant jetzt die Magnetisierung zu untersuchen, die wir aus freien Energie durch Ableitung nach B erhalten: $M = -\partial F/\partial B$. Die Rechnung ist etwas aufwendig und wir verweisen auf die Literatur, z.B. J.M. Ziman "Prinzipien der Festkörpertheorie".

$$M = N\chi_P B \left[1 - \frac{1}{3} + \frac{\pi k_B T}{\mu_B B} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\mu_B B}} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\nu}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{4} - \frac{\pi\nu\epsilon_F}{\mu_B B}\right)}{\sinh\left(\frac{\pi^2\nu k_B T}{\mu_B B}\right)} \right] \quad (3.106)$$

wobei χ_P die Pauli-Spinsuszeptibilität ist, die sich aus dem Zeeman-Term herleitet. Beachte, dass die beiden ersten Terme "1 - 1/3" sich aus der Spin-Suszeptibilität χ_P und der Landau'schen diamagnetischen Suszeptibilität χ_L zusammensetzen. Der letztere ist ein orbitaler Beitrag der Landau-Niveaus, und es gilt

$$\chi_P = -3\chi_L \quad (3.107)$$

Für genügend tiefen Temperaturen, $k_B T < \mu_B B$, werden als Funktion des angelegten Feldes Oszillationen der Magnetisierung sichtbar. Der dominante Term kommt von $\nu = 1$. Die Oszillation ist eine Konsequenz der Singularitäten in der Zustandsdichte, deren sukzessiven Passage der Fermienergie durch Aufdrehen des Magnetfeldes das magnetische Moment beeinflusst. Das Intervall der Oszillationen ist gegeben durch

$$\frac{\pi\epsilon_F}{\mu_B} \Delta\left(\frac{1}{B}\right) = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\mu_B}{\epsilon_F} = \frac{2\hbar e}{2mc} \frac{2m}{\hbar^2 k_F^2} = \frac{2\pi e}{\hbar c} \frac{1}{A(k_F)} \quad (3.108)$$

mit $A(k_F) = \pi k_F^2$ als Querschnittsfläche der Fermikugel, senkrecht zum Magnetfeld. Dies ist das Verhalten für freie Elektronen.

3.4.3 Onsager-Gleichung

Dieses Verhalten kann auf beliebige Bandstrukturen verallgemeinert werden, indem wir geschlossenen Pfade eines Wellenpakets im Magnetfeld betrachten. Die Schwerpunktsbewegung kann durch quasiklassische Gleichungen beschrieben werden:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \quad \text{und} \quad \hbar \dot{\vec{k}} = -\frac{e}{c} \vec{v}_{\vec{k}} \times \vec{B} \quad (3.109)$$

Die Zeit, die benötigt wird um einen Pfad zwischen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 zurückzulegen, berechnet sich als

$$t_2 - t_1 = \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} dk \frac{1}{|\dot{\vec{k}}|} = \frac{\hbar c}{eB} \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} \frac{dk}{|\vec{v}_{\vec{k},\perp}|} \quad (3.110)$$

wobei $\vec{v}_{\vec{k},\perp}$ die Geschwindigkeitskomponente senkrecht auf \vec{B} . Sei $\Delta\vec{k}$ ein Vektor in der Ebene der Bewegung senkrecht auf $\dot{\vec{k}}$ und \vec{B} , welcher eine Verbindung zu einem Orbit mit Energie $\epsilon + \Delta\epsilon$ herstellt. Dann gilt

$$\Delta\epsilon = \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}} \cdot \Delta\vec{k} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}_{\perp}} \cdot \Delta\vec{k} = \left| \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}_{\perp}} \right| |\Delta\vec{k}| = \hbar |\vec{v}_{\vec{k},\perp}| |\Delta\vec{k}|, \quad (3.111)$$

da $\partial\epsilon/\partial\vec{k}_{\perp}$ und $\Delta\vec{k}$ senkrecht auf den Bahnen konstanter Energie stehen. Also folgt

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2 c}{eB} \frac{1}{\Delta\epsilon} \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} |\Delta\vec{k}| dk \quad \Rightarrow \quad t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2 c}{eB} \frac{\partial A_{1,2}}{\partial \epsilon} \quad (3.112)$$

im Grenzfall infinitesimaler $\Delta\vec{k}$.

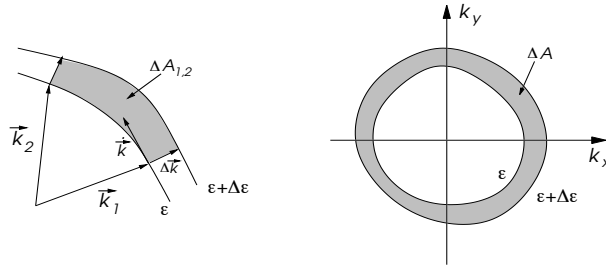


Abb. 3.11

Hier ist $\Delta A_{1,2}$ die von $\Delta \vec{k}$ zwischen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 überstrichene Fläche im k -Raum. Ein ganzer Umlauf ist in der Zeit $T(\epsilon)$ vollendet,

$$T(\epsilon) = \frac{\hbar^2 c}{eB} \frac{\partial A(\epsilon)}{\partial \epsilon} \quad (3.113)$$

Zurückgreifend auf Bohrs Korrespondenz-Prinzip können wir folgende Beziehung für grosse Quantenzahlen der Landau-Niveaus benutzen:

$$E_{n+1, k_z} - E_{n, k_z} = \frac{h}{T(E_{n, k_z}, k_z)} \quad (3.114)$$

d.h. die Differenz zwischen den quantisierten Energieniveaus entspricht der klassischen Frequenz des Umlaufs der geschlossenen Bahnen. Da wir uns für die Energiezustände nahe an der Fermifläche interessieren, gilt

$$n \sim \frac{\epsilon_F}{\hbar \omega_c} \gg 1 \quad (3.115)$$

Mit Hilfe (3.113) und (3.114) können wir nun zeigen, dass

$$\Delta A = A(E_{n+1, k_z}) - A(E_{n, k_z}) = \frac{2\pi eB}{\hbar c} \quad (3.116)$$

wobei wir verwendet haben, dass näherungsweise

$$\frac{\partial A(\epsilon)}{\partial \epsilon} = \frac{A(E_{n+1, k_z}) - A(E_{n, k_z})}{E_{n+1, k_z} - E_{n, k_z}} = \frac{T}{\hbar} \frac{eB}{\hbar c} \quad (3.117)$$

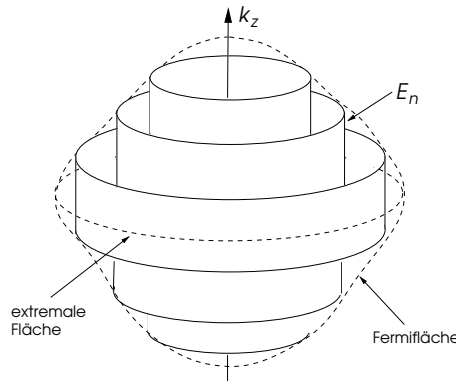


Abb. 3.12

Zwischen zwei benachbarten klassischen Bahnen mit quantenmechanisch erlaubten Energien wird die Fläche ΔA eingeschlossen. Dies bedeutet, dass gesamte Fläche, die durch die klassische Bahn für gegebene Quantenzahl n und k_z eingeschlossen wird,

$$A(E_{n, k_z}, k_z) = (n + \gamma) \Delta A \quad (3.118)$$

ist, wobei γ eine "Integrationskonstante" darstellt. Dies nennt man die *Onsager-Gleichung*. Die Fläche, die eine extremale Zustandsdichte an der Fermikante ergibt, entspricht der Bahn mit $E_{n,k_z} = \epsilon_F$:

$$A(\epsilon_F, k_z = 0) = \Delta A(n + \gamma) = \frac{2\pi e B}{\hbar c} (n + \gamma) \quad (3.119)$$

woraus nun allgemein folgt, dass die Periode für die Oszillationen durch

$$\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar c} \frac{1}{A(\epsilon_F)} \quad (3.120)$$

gegeben ist. Die Oszillationen, die in der Magnetisierung auftreten, erlauben es die transverse Querschnittsfläche der "Fermikugel" zu bestimmen. Indem man die Richtung des Feldes variiert, lässt sich die Fermiflächen-Topologie bestimmen. Alternative zur oszillierenden Magnetisierung kann auch der oszillierende elektrische Widerstand gemessen werden. Dann sprechen wir vom Schubnikov-de Haas-Effekt. In beiden Fällen ist wichtig, dass die Landau-Energie-Niveaus genügend klar erkennbar sind. Dies bedeutet neben "tiefen Temperaturen" auch eine hinreichende Sauberkeit des Materials, damit die Elektronen während ihres Umlaufes nicht von Verunreinigungen gestreut werden. Die Lebensdauer τ eines Zustandes mit gegebenem Impuls muss daher viel länger als ein Umlauf sein, d.h. $\omega_c \tau \gg 1$. Die Unschärferelation besagt nämlich

$$\Delta \epsilon \sim \frac{\hbar}{\tau} \ll \hbar \omega_c \quad (3.121)$$

Beachte auch, dass $v_F \tau = l$ die mittlere freie Weglänge ist.

3.5 Quantum Hall Effect

Der Hall-Effekt (entdeckt von Edwin Hall 1879) ist eine wichtige Methode, um die Eigenschaften der mobilen Ladungsträger zu untersuchen. Er beruht auf der Tatsache, dass bewegte Ladung in einem Magnetfeld eine Kraft, die Lorentzkraft, senkrecht zum Feld und zur Bewegungsrichtung verspürt, so dass sich eine Spannung transvers zu einem elektrischen Strom ergibt, wenn ein Magnetfeld angelegt wird. Wir betrachten die klassische Bewegungsgleichung

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = -e \left\{ \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right\}, \quad (3.122)$$

mit m^* als effektive Elektronmasse. Dann ergibt sich für die Hall-Geometrie (Abb. 3.13) mit einem Strom entlang der y -Richtung und einem Magnetfeld parallel zur z -Richtung die stationäre Bedingung, dass kein Strom in die x -Richtung fließen darf:

$$\left\{ \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right\}_x = 0, \quad (3.123)$$

d.h. die Lorentzkraft wird durch eine Spannung kompensiert, die Hall-Spannung. Mit der Definition der Stromdichte $\vec{j} = -n_0 e \vec{v}$ führen wir die Hall-Leitfähigkeit ein:

$$\sigma_H = \frac{j_y}{E_x} = \frac{n_0 e c}{B_z} = \nu \frac{e^2}{h}, \quad (3.124)$$

wobei $\nu = n_0 \hbar c / B e$. Daraus lässt sich nicht nur die Ladungsdichte n_0 bestimmen, sondern auch das Vorzeichen der Ladung, d.h. ob das Metall eine Fermifläche besitzt, die sich um den Γ -Punkt schliesst (elektronartig, negative Ladung) oder um einen Punkt auf der Brillouin-Zonen-Grenze (lochartig, positive Ladung).

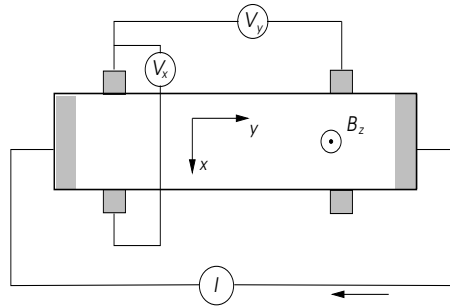


Abb. 3.13

1980 machte Klaus von Klitzing und seine Mitarbeiter (von Klitzing, Dorda und Pepper, Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980)) eine erstaunliche Entdeckung, als sie den Hall-Effekt in eine speziellen zweidimensionalen Elektronensystem betrachteten. Dieses System entsteht in der Inversionsschicht eines GaAs-MOSFET-Bauelements, das sich wie ein zweidimensionales Elektronengas mit hoher Mobilität $b = e\tau/m^*$ (mittlere freie Weglänge $l = 10 \text{ \AA}$ und kleiner Dichte ($n_0 \sim 10^{11}/\text{cm}^2$) verhält. Die beiden relevanten Dimensionen liegen entlang der Grenzschicht, während die Elektronen in der dritten Dimension senkrecht dazu wie in einem Potentialtopf eingeschlossen sind (siehe Abschnitt 2.5.3). Für hohe Magnetfelder, typischerweise 1 – 30T, beobachtete von Klitzing eine Quantisierung der Hall-Leitfähigkeit bei genügend tiefen Temperaturen ($< 4K$). Die Hall-Leitfähigkeit ergab sich als ganzzahlige Vielfache des Quantum e^2/h :

$$\sigma_H = N \frac{e^2}{h} \quad \frac{e^2}{h} = \frac{1}{25812.8\Omega} \quad (3.125)$$

wobei $N = 1, 2, 3, \dots$ Gleichzeitig mit der quantisierten Hall-Leitfähigkeit σ_H verschwindet die elektrische Leitfähigkeit entlang der Stromrichtung und wird nur endlich, wenn σ_H von einem quantisierten Wert (Quantum-Hall-Plateau) zum anderen übergeht.

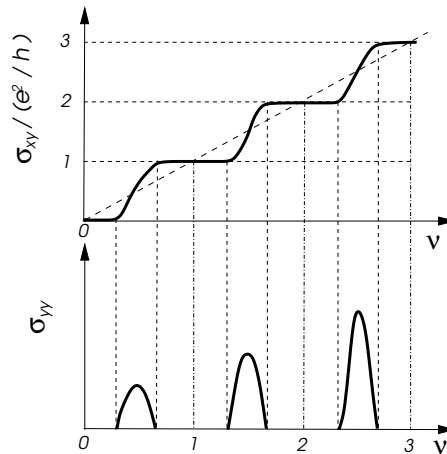


Abb. 3.14

Im Jahre 1982 wurde von Tsui, Störmer und Gossard (Phys. Rev. Lett. 48,1559 (1982)) eine weitere Quantisierung von σ_H entdeckt, die ganz bestimmten rational gebrochenen Werten von e^2/h entspricht. Von diesem Zeitpunkt an unterschied man den ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt (Integer Quantum Hall Effect IQHE) und dem fraktionierten Quanten-Hall-Effekt (Fractional Quantum Hall Effect FQHE). Mit dieser Entdeckung wurde ein neues Feld der Festkörperphysik eröffnet, das bis zum heutigen Tag immer wieder neue interessante Erkenntnisse liefert.

3.5.1 Hall-Effekt des zweidimensionalen Elektrongases

Um die Hall-Leitfähigkeit auch unter dem quantenmechanischen Gesichtspunkt zu betrachten, gehen wir vom Hamilton-Operator (3.96) aus und verwenden die Landau-Eichung für das Vektorpotential $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ so dass wir wie im letzten Abschnitt auf die Form (3.97) kommen.

In unserem System ist keine Bewegung in z -Richtung erlaubt (gebundener Zustand im Potentialtopf), so dass die hoch entarteten Energieeigenwerte durch $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ gegeben sind ($\omega_c = |eB|/m^*c$). Wir beschränken uns hier zunächst auf das niedrigste Landau-Niveau ($n = 0$) mit der Wellenfunktion

$$\phi_{0,k_y} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^2}} e^{-(x-k_y\ell^2)^2/2\ell^2} e^{ik_y y} . \quad (3.126)$$

wobei $\ell = \sqrt{\hbar c/|eB|}$ die magnetische Länge (Ausdehnung der Wellenfunktion im Magnetfeld) definiert. Obwohl die Wellenfunktion die Form einer ebenen Welle in y -Richtung besitzt, hängt die Energie nicht von k_y ab (grosse Entartung). Die Wellenfunktion ist in x -Richtung um $X = k_y\ell^2$ lokalisiert und in y -Richtung unendlich ausgedehnt, ohne dass jedoch die Elektronen in diese Richtung eine kinetische Energie haben.

Nun setzen wir diesen Zustand einem elektrischen Feld in x -Richtung aus, wodurch der Hamilton-Operator (3.96) um das Potential $U(\vec{r}) = -eE_x x$ ergänzt wird. Dieser Term wird einfach in das harmonische Potential von (3.97) absorbiert und führt zu einer Verschiebung des Zentrums der Wellenfunktion in x -Richtung: $X'(k_y) = X(k_y) - eE_x/m^*\omega_c^2$. Dadurch wird die grosse Entartung aufgehoben und die Energie erhält für das niedrigste Landau-Niveau die Form (aus quadratischer Ergänzung):

$$E_{n=0}(k_y) = \frac{\hbar\omega_c}{2} - eE_x X'(k_y) + \frac{m^*}{2} \left(\frac{cE_x}{B} \right)^2 \quad (3.127)$$

für ϕ_{0k_y} . Nun erhalten wir eine k_y -abhängige Energie. Das Elektron hat nun die Geschwindigkeit

$$v_y(k_y) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_0(k_y)}{dk_y} = -\frac{eE_x\ell^2}{\hbar} = -\frac{cE_x}{B\hbar} \quad (3.128)$$

Daraus bestimmen wir nun die Stromdichte

$$j_y = -en_0 v_y(k_y) = en_0 \frac{cE_x}{B\hbar} = \frac{e\nu}{2\pi\ell^2} \frac{cE_x}{B\hbar} = \nu \frac{e^2}{h} E_x \quad (3.129)$$

wobei $\nu = n_0 2\pi\ell^2 \propto B^{-1}$ der Füllung der Landau-Niveaus entspricht.⁶ Die Hall-Leitfähigkeit ist nun

$$\sigma_H = \frac{j_y}{E_x} = \nu \frac{e^2}{h} . \quad (3.130)$$

Dies gibt eine lineare Beziehung zwischen σ_H and $\nu \propto B^{-1}$.

3.5.2 Ganzzahliger Quanten-Hall-Effekt

Die Stufen oder Plateaus, die von Klitzing in der Hall-Leitfähigkeit σ_H des zweidimensionalen Elektronensystems in der Inversionsschicht eines GaAs-MOSFET als Funktion des Magnetfeldes beobachtet hat, entsprechen Werten $\sigma_H = Ne^2/h$, als ob ν ganzzahlig wäre. Im Bereich der Plateaus ist die Leitfähigkeit des Elektronengases null, d.h.

$$\sigma_{yy} = \frac{j_y}{E_y} = 0 , \quad (3.131)$$

und wird nur endlich beim Übergang von σ_H zwischen den Plateaus (Abb.3.14). Auch dies ist nicht kompatibel mit obiger Betrachtung, da die Leitfähigkeit für das Elektronengas keine solche dramatische Magnetfeld-Abhängigkeit aufweisen sollte.

Die Lösung für dieses rästelhafte Verhalten liegt in der Unordnung, die wir unweigerlich in jeder Inversionsschicht finden. Dies führt dazu, dass die Elektronen sich in einer zufällig modulierten Potentiallandschaft bewegen: $U(x, y)$. Daraus resultiert der Effekt der Lokalisierung von

⁶Beachte, dass $\nu^{-1} = B/n_0\Phi_0$ ($\Phi_0 = hc/e$: Flussquantum), d.h. ν^{-1} gibt an wieviele Flussquanten Φ_0 pro Elektron durch das magnetische Feld im Hall-Element vorhanden sind.

Elektronzuständen. Zur Beleuchtung dieses Aspekts betrachten wir nun das unterste Landau-Niveau in der symmetrischen Eichung: $\vec{A} = (-y, x, 0)B/2$. Die Schrödinger-Gleichung lautet in Polarkoordinaten

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ -\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \left(\frac{\partial}{r \partial \varphi} - i \frac{e}{2\hbar c} B r \right)^2 \right\} \psi(r, \varphi) + U(x, y) \psi(r, \varphi) = E \psi(r, \varphi) \quad (3.132)$$

Ohne externes Potential ($U(x, y) = 0$) finden wir die Lösung

$$\psi_{n=0,m}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^2 2^m m!}} \left(\frac{r}{\ell} \right)^m e^{-im\varphi} e^{-r^2/4\ell^2} \quad (3.133)$$

wobei alle $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ demselben Energie $E_0 = \hbar\omega_c/2$ entsprechen. Diese Wellenfunktionen sind auf Kreisen des Radius $r_m = \sqrt{2m}\ell$ konzentriert.

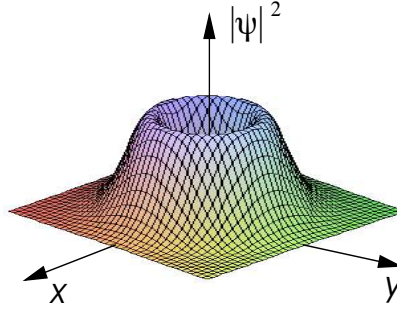


Abb. 3.15

Beachte, dass der magnetische Fluss durch diese Kreise gegeben ist durch

$$\pi B r_m^2 = \pi B 2m\ell^2 = 2\pi m B \frac{\hbar c}{eB} = m \frac{\hbar c}{e} = m\Phi_0 \quad (3.134)$$

und ist quantisiert in Einheiten des Flussquantums $\Phi_0 = hc/e$.

Nun betrachten wir den Effekt eines Potentials. Wir können die Eichung der Potentiallandschaft anpassen. Wenn wir an zentralsymmetrisches Potential in zwei Dimensionen annehmen, ist die symmetrische Eichung gerade optimal. Wir wählen den Ursprung als Zentrum. Eine einfache exakte Lösung ist möglich für das Potential

$$U(x, y) = U(r) = \frac{C_1}{r^2} + C_2 r^2 + C_3; \quad (3.135)$$

Es zeigt sich, dass wir für das unterste "Landau-Niveau" mit dem folgenden Ansatz alle Eigenzustände erhalten:

$$\tilde{\psi}_{0,m}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^{*2} 2^\alpha \Gamma(\alpha + 1)}} \left(\frac{r}{\ell^*} \right)^\alpha e^{-im\varphi} e^{-r^2/4\ell^{*2}} \quad (3.136)$$

mit

$$\alpha^2 = m^2 + C_1^*, \quad \frac{1}{\ell^{*2}} = \frac{1}{\ell^2} \sqrt{1 + C_2^*} \quad (3.137)$$

wobei $C_1^* = 2m^* C_1 / \hbar^2$ und $C_2^* = 8\ell^4 m^* C_2 / \hbar^2$ dimensionlose Parameter sind. Die Energieeigenwerte sind nicht mehr entartet:

$$E_{0,m} = \frac{\hbar\omega_c}{2} \left\{ \frac{\ell^2}{\ell^{*2}} (\alpha + 1) - m \right\} + C_3 \quad (3.138)$$

Die Wellenfunktionen konzentrieren sich auf dem Radius $r_m = \sqrt{2\alpha}\ell^*$. Für schwache Potentiale $C_1^*, C_2^* \ll 1$ und $m \gg 1$ erhalten wir für die Energie

$$E_{0,m} \approx \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{C_1}{r_m^2} + C_2 r_m^2 + C_3 \dots, \quad (3.139)$$

d.h. die stark konzentrierte Wellenfunktion schmiegt sich der Potentiallandschaft an. Dies gilt auch für beliebig strukturierte Potentiallandschaften. Die Wellenfunktion beschreibt hier Elektronen auf quasiklassischen Trajektorien, die Äquipotentiallinien folgen. Damit sind die hier beschriebene Zustände lokalisiert im Sinne, dass sie an den Potentialstrukturen haften. Ein angelegtes elektrisches Feld kann diese sich in konzentrischen Ringen aufhaltenden Elektronen nicht in Bewegung setzen: Lokalisierung. Sie fallen für den elektrischen Transport aus. Dies gilt für jedes langsam variierende Potential.

Bild der Potentiallandschaft: Durch Änderung des äusseren Feldes können wir den Füllungsgrad $\nu = n_0 2\pi\ell^2$ des Landau-Niveaus einstellen. Während im translationsinvarianten System alle Zustände eines Niveaus entartet sind, werden diese Zustände nun auf einen gewissen Energiebereich ausgeschmiert. Die Zustände entsprechen den Äquipotential-Trajektorien, die je nach Magnetfeld entweder gefüllt oder leer sind, d.h. entweder unterhalb oder oberhalb des chemischen Potentials liegen.

Daraus lässt sich ein intuitives Bild gewinnen. Für einen gewissen Füllungsgrad ν sind alle Zustände bis zu einer gewissen Potentialhöhe gefüllt. Dies entspricht bildlich einer Landschaft im Wasser mit einem gewissen Wasserpegel, der dem chemischen Potential entspricht. Das Ufer entspricht der obersten gefüllten Äquipotential-Trajektorie. Falls ν genügend klein ist ($\nu = 1$ entspricht einer vollständigen Füllung des Niveaus des ersten Landau-Levels, wobei die Entartung feldabhängig ist), sind alle diese Trajektorien geschlossen, wie auch alle anderen gefüllten Niveaus. Alle diese Zustände sind lokalisiert. Analog gilt für einen genügend hohe Füllungsgrad, dass die höchsten gefüllten Trajektorien nun die Ufer von Inseln in einem Meer bilden. Dies bedeutet jedoch, dass zwischen den beiden Situationen eine Änderung in der Topologie des Ufers stattgefunden hat. Bei einem gewissen Füllungsgrad muss die Küstenlinie durch das ganze System hindurch zusammenhängend sein. Wir sprechen von der *Perkolation* dieser Linie. Es gilt nun, dass die entsprechende Äquipotential-Trajektorien nicht lokalisiert sind. Diese Trajektorien spielen eine sehr wichtige Rolle für den Quanten-Hall-Effekt.

Laughlins Eichinvarianz-Argument: Wir betrachten ein Hall-Element, das in eine sogenannte Corbino-Geometrie deformiert wird, d.h. eine kreisförmige Scheibe mit einem Loch in der Mitte (Abb. 3.16). Das Hall-Element wird durch ein konstantes uniformes Magnetfeld B durchdrungen, während wir durch das Loch einen beliebigen zusätzlichen magnetischen Fluss einstellen können ohne, das uniforme Feld B zu beeinflussen (unendliche dünne Spule). Der Fluss Φ durch das Loch ist irrelevant für alle Elektron-Trajektorien, die lokalisiert sind, da nur die ausgedehnten (perkolierenden) Trajektorien das Loch umrunden können und so eine Aharonov-Bohm-Phase erhalten. Wenn wir den Fluss adiabatisch erhöhen, wird das Vektorpotential folgendermassen verändert (Eichtransformation):

$$\delta \vec{A} = \vec{\nabla} \chi \quad \Rightarrow \quad \delta A_\varphi = \frac{\delta \Phi}{2\pi r} \quad \Rightarrow \quad \psi \rightarrow \psi e^{i e \chi / \hbar c} = \psi e^{i \delta \Phi \varphi / \Phi_0} \quad (3.140)$$

Wäre die Scheibe translationsinvariant (ohne Unordnung), dann könnten wir für das unterste Landau-Niveau die Wellenfunktionen $\psi_{0,m}$ aus (3.133) annehmen, so dass $B\pi r_m^2 = n\Phi_0 + \delta\Phi$. Die Eindeutigkeit der Wellenfunktion erfordert, dass sich m entsprechend anpasst $m \rightarrow m - \delta\Phi/\Phi_0$ als ganze Zahl. Die Erhöhung von Φ um ein Flussquantum ergibt die Erniedrigung von m um 1. Die Eichinvarianz erfordert also, dass jede Wellenfunktion sich auf die nächste verschiebt. Das gleiche Argument kann auch für höhere Landau-Niveaus angewendet werden.

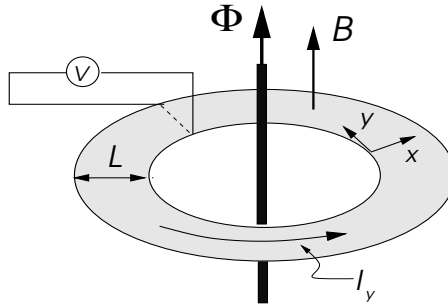


Abb. 3.16

Dies ist ein topologisches Argument und ändert sich für unabhängige Elektronen nicht, wenn wir Unordnung einführen. Der Transfer eines Elektrons zwischen benachbarten ausgedehnten Zuständen durch die Änderung von Φ um Φ_0 führt zur Netto-Verschiebung eines Elektrons vom äusseren zum inneren Rand. Wir nehmen nun ein elektrisches Field E_x in radialer Richtung (x -Richtung) an, womit bei diesem Prozess eine Energieänderung resultiert:

$$\Delta\epsilon_V = eE_x L \quad (3.141)$$

wobei L die Distanz zwischen den beiden Rändern ist. Andererseits ergibt sich eine elektromagnetische Energieänderung wegen der Erhöhung des Flusses aufgrund des konstanten Stromes I_y in der Scheibe:

$$\Delta\epsilon_I = \frac{I_y \delta\Phi}{c}, \quad (3.142)$$

die mit $\Delta\epsilon_V$ gleichgesetzt werden darf für $\delta\Phi = \Phi_0$:

$$\sigma_H = \frac{j_y}{E_x} = \frac{I_y}{LE_x} = \frac{ec}{\Phi_0} = \frac{e^2}{h}. \quad (3.143)$$

Diesen Beitrag zu σ_H erhält man für jedes gefüllte Landau-Niveau. Damit ergibt sich bei n gefüllten Niveaus $\sigma_H = ne^2/h$. Damit ist klar wieso die Quantisierung universell ist.

Lokalisierte und ausgedehnte Zustände: Für das zweidimensionale Elektronengas (2DEG) gilt für die Zustandsdichte

$$N_{\text{2DEG}}(E) = 2 \sum_{k_x, k_y} \delta\left(E - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}\right) = \frac{L_x L_y m}{2\pi}, \quad (3.144)$$

während wir für die Landau-Niveaus finden

$$N_{\text{LN}}(E) = \frac{L_x L_y}{2\pi\ell^2} \sum_n \delta(E - E_n). \quad (3.145)$$

Der Effekt der Unordnung ist gemäss unserer obigen Diskussion, die Entartung der Landau-Niveaus aufzuheben. Die meisten der Zustände sind dann lokalisiert und tragen nicht zum elektrischen Transport bei. Es gibt nur wenige ausgedehnte Zustände, die falls teilweise gefüllt zum Transport beitragen.

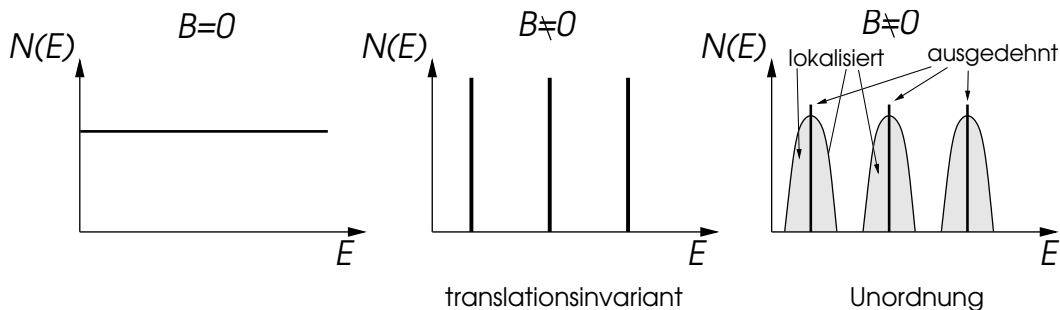


Abb. 3.17

Für teilweise gefüllte ausgedehnte Zustände ist die Hall-Leitfähigkeit σ_H nicht universell, da sich nach Laughlins Argument nicht alle Zustände besetzt sind, die notwendig sind, um unter der Änderung von Φ um Φ_0 eine Elektron von einem Rand zum anderen zu verschieben. Teilweise gefüllte ausgedehnte Zustände tauchen beim Übergang zwischen Plateaus auf. Hier erhalten wir eine endliche Leitfähigkeit σ_{yy} . Wenn alle ausgedehnten Zustände eines Landau-Niveaus besetzt sind, sind sie nicht für den Transport verfügbar, d.h. im Bereich des Plateaus verschwindet σ_{yy} . Beachte, dass wegen der thermischen Besetzung der Bereich der Plateaus mit steigender Temperatur abnimmt. Daher ist der Quanten-Hall-Effekt nur bei genügend tiefen Temperaturen sichtbar ($T < 4\text{K}$).

Randzustände und Büttikers Argument: Das Potential am Rand, welches die Elektronen einschliesst, gehört auch zur Potentiallandschaft. Äquipotentialtrajektorien von Zuständen, die sich dem Systemrand anschmiegen, sind immer ausgedehnt. Die Wellenfunktionen wurden in Abschnitt 3.5.1 diskutiert. Wir finden, dass aus (3.127), dass die Energie nicht symmetrisch in k_y (Wellenvektor entlang Rand), d.h. $E(k_y) \neq E(-k_y)$. Dies bedeutet, dass diese Zustände chiral sind und sich daher für gegebene Energie nur in eine Richtung bewegen können. Die Randzustände (edge states) bewegen sich auf gegenüberliegenden Rändern entgegengesetzt, wie sich leicht aus (3.127) herauslesen lässt.

Der Gesamtstrom, an einem Rand für ein Landau-Niveau fließt, ist gegeben durch

$$I = \sum_{k_y} \frac{e}{L_y} v_y, \quad (3.146)$$

d.h. wir besitzen pro k_y einen Zustand, der auf der ganzen Länge L_y des Hall-Elements ausgedehnt ist. Daher ist die Dichte $1/L_y$. Für den Wellenvektor nehmen wir Quantisierung mittels periodischer Randbedingung an: $k_y = 2\pi n_y/L_y$ mit $n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Die Geschwindigkeit finden wir in (3.128). Damit gilt

$$I = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{\text{besetzt}} dk_y \frac{dE_n(k_y)}{dk_y} = \frac{e}{h} \int_{\text{besetzt}} dX \frac{dE}{dX} = \frac{e}{h} (\mu - E_n^{(0)}) \quad (3.147)$$

wobei $X = k_y \ell^2$, die transversale Position der Wellenfunktion ist. Genügend weit vom Rand wird E_n unabhängig von X und erreicht den Wert $E_n^{(0)} = \hbar\omega_c(1/2 + n)$ für ein translationsinvariantes Elektronengas. μ ist das chemische Potential.

Eine Potentialdifferenz zwischen den beiden gegenüberliegenden Rändern resultiert in einem Nettostrom:

$$\mu_A - \mu_B = eV_H = eE_x L_x = \frac{h}{e} (I_A + I_B) = \frac{h}{e} I_H \quad \Rightarrow \quad \sigma_H = \frac{I_H}{E_x L_x} = \frac{e^2}{h}. \quad (3.148)$$

wobei für $\mu_A = \mu_B$ gilt, dass $I_A = -I_B$. Beachte, dass $I_H = I_A - I_B$ nur gilt solange keine Ströme im Innern des Systems getragen werden können, was durch die Lokalisierung aller Zustände am chemischen Potential sichergestellt ist.

Auch in dieser Konzept ergibt sich wieder dieselbe Quantisierung, wobei jedes besetzte Landau-Niveau genau einen Randzustand beisteuert: $\sigma_H = ne^2/h$ (n : Zahl besetzter Landau-Niveaus). Beachte, dass dieses Argument unabhängig von der speziellen Form des Randpotentials ist.

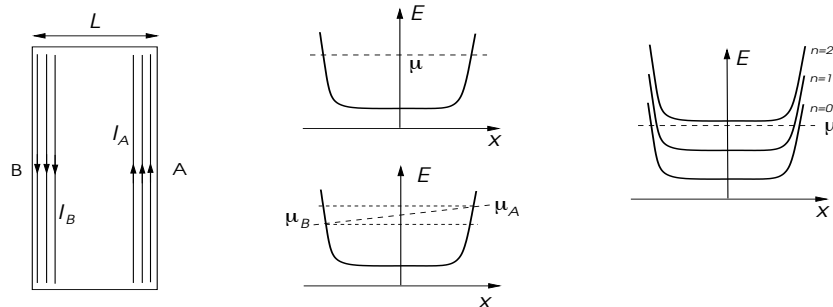


Abb. 3.18

Ferner lässt sich auch der Effekt auf die Leitfähigkeit hier diskutieren. Vom Standpunkt der Randzustände ist jedoch der elektrische Widerstand geeigneter. Wie die Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ ist auch der spezifische Widerstand $\hat{\rho}$ ein Tensor:

$$\left. \begin{array}{l} \vec{j} = \hat{\sigma} \vec{E} \\ \vec{E} = \hat{\rho} \vec{j} \end{array} \right\} \Rightarrow \sigma_{yy} = \frac{\rho_{yy}}{\rho_{yy}^2 + \rho_{xy}^2}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\rho_{xy}}{\rho_{yy}^2 + \rho_{xy}^2}. \quad (3.149)$$

Bei endlichem Hall-Widerstand ρ_{xy} folgt, dass mit $\sigma_{yy} = 0$ auch $\rho_{yy} = 0$ in zwei Dimensionen. Nun gilt für die Randzustände, dass ihre Elektronen sich für gegebene Energie nur in eine Richtung bewegen können (chiral). Es gibt also keine Rückwärtsstreuung (Reflexion) an Hindernissen, solange die beiden Ränder genügend weit von einander entfernt liegen. Also gilt $\rho_{yy} = 0$ und somit $\sigma_{yy} = 0$. Ein endlicher Widerstand tritt nur auf, wenn gerade die Zustände eines Landau-Niveaus im Innern des Hall-Elements am chemischen Potential liegen und daher teilweise gefüllt sind. Dann sind die beiden Ränder verbunden.

3.5.3 Fraktioneller Quanten-Hall-Effekt

Nur zwei Jahre nach der Entdeckung des ganzzahligen Quanten-Hall-Effektes wurde von Störmer und Tsui an Elektronengas in MOSFET-Inversionschichten sehr hoher Qualität (aber immer noch nicht perfekt) beobachtet, dass sich bei tiefen Temperaturen noch weitere Plateaus im Hall-Widerstand ausbilden. Das ausgeprägteste liegt bei einem Füllungsgrad $\nu = 1/3$ ($\rho_{xy} = h/\nu e^2$ oder $\sigma_{xy} = \nu e^2/h$). In der Folge wurde eine ganze Hierarchie von Plateaus bei gebrochenen Werten von $\nu = p/m$ entdeckt (p und m ganze Zahlen).

$$\nu = \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{3}{7}, \dots \quad (3.150)$$

Diese neuen Plateaus werden fraktionierter Quanten-Hall-Effekt (FQHE) genannt.

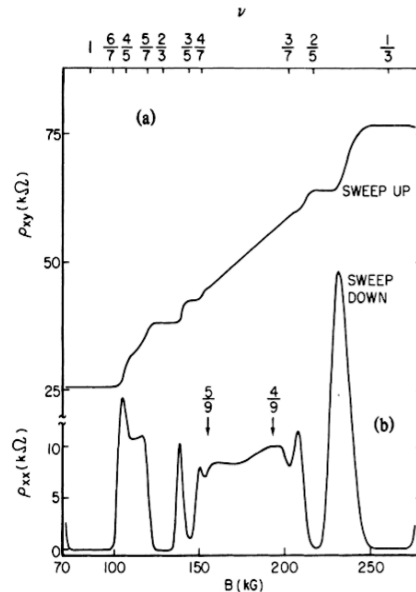


Abb. 3.19

Es war wieder Laughlin, der das Schlüsselkonzept fand. Der FQHE kann nicht im Rahmen von unabhängigen Elektronen verstanden werden, sondern die Coulomb-Abstoßung spielt eine wichtige Rolle und bringt Korrelation zwischen den Elektronen. Laughlin untersuchte den Fall $\nu = 1/3$ und setzte eine Viel-Elektronen-Wellenfunktion der folgenden Form an:

$$\Psi_{1/m}(z_1, \dots, z_N) \propto \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4\ell^2}\right) \quad (3.151)$$

wobei $z = x - iy$ eine komplexe Schreibweise für die Koordinaten im zweidimensionalen System ist. Wir haben uns hier auf Elektronen im untersten Landau-Niveau beschränkt. Für das Plateau $\nu = 1/3$ entspricht der Exponent $m = 3$. Dieser Zustand ergibt in der Tat ein stabiles Plateau bei $\sigma_H = e^2/3h$.

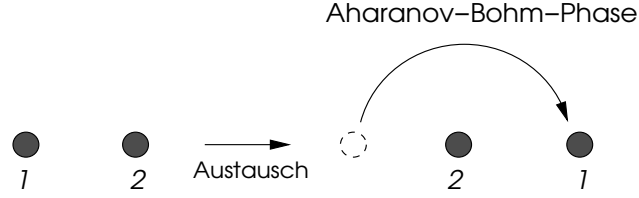


Abb. 3.20

Eine intuitive und sehr aussagekräftige Interpretation des Laughlin-Zustandes stammt von Jain, der das Konzept der composite Fermions (zusammengesetzte Fermion) einführte. Es gilt nämlich, dass

$$\Psi_{1/m} = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^{m-1} \Psi_1 \quad (3.152)$$

wobei Ψ_1 die Slater-Determinante des komplett gefüllten untersten Landau-Niveaus ist.⁷ Damit wird $\prod_{i < j} (z_i - z_j)^{m-1}$ als sogenannter Jastro-Faktor, der die Korrelationseffekte in die Wellenfunktion einbringt, da Ψ_1 als Slater-Determinante nur den Fermion-Austausch-Effekt aber nicht die Coulomb-Wechselwirkung miteinbezieht. Der Vorfaktor führt dazu, dass die Wellenfunktion reduziert wird, wenn sich zwei Teilchen nahe kommen. Der Vorfaktor in dieser Form führt dazu, dass zwei Elektronen einen gewissen Phasenfaktor erhalten, wenn man sie um einander kreisen lässt. Insbesondere ist der Elektron-Austausch davon abhängig und ergibt die Phase

$$\exp(i(m-1)\pi) = \exp\left(i \frac{e}{\hbar c} \frac{m-1}{2} \Phi_0\right) = 1 \quad (3.156)$$

im Sinne von Abb.3.20, was nur erfüllt ist, falls m ungerade ist. Damit bleibt das negative Vorzeichen der Wellenfunktion unter Vertauschung zweier Elektronen.

⁷Die Slater-Determinante des untersten Landau-Niveaus erhalten wir aus den Zuständen der unabhängigen Elektronen. Wir verwenden die symmetrische Eichung, so dass die Zustände durch die Quantenzahl m' bezeichnet werden. Bis auf die Normierung sind diese

$$\phi_{m'}(z) = z^{m'} e^{|z|^2/4\ell^2} \quad \text{wobei } m' = 0, 1, 2, \dots \quad (3.153)$$

wie in (3.133) ($z = x - iy$). Die Slater-Determinante für N unabhängige Elektronen ist nun

$$\begin{aligned} \Psi_1(z_1, \dots, z_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det} \begin{bmatrix} \phi_0(z_1) & \cdots & \phi_N(z_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_0(z_N) & \cdots & \phi_N(z_N) \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det} \begin{bmatrix} 1 & z_1 & z_1^2 & \cdots & z_1^N \\ 1 & z_2 & z_2^2 & \cdots & z_2^N \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & z_N & z_N^2 & \cdots & z_N^N \end{bmatrix} \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4\ell^2}\right). \end{aligned} \quad (3.154)$$

Die letzte Determinante ist eine sogenannte Vandermonde Determinante, die sich umschreiben lässt in die Form eines Produkts:

$$\Psi_1 = \prod_{i < j} (z_i - z_j) \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4\ell^2}\right) \quad (3.155)$$

wobei der Vorfaktor ein homogenes Polynom mit Nullstellen für $z_i = z_j$ (Pauli-Prinzip) ist. In dieser Form hat der Zustand einen bestimmten totalen Drehimpuls $L_z: N\hbar$.

Im Fall $m = 3$ kommen im Schnitt drei Flussquanten Φ_0 auf ein Elektron. Wir definieren nun ein composite Fermion als ein Elektron, dem zwei negative Flussquanten Φ_0 angehängt werden. Diese Objekte seien dann unabhängige Fermionen, da die angehängten Flussquanten den Jastro-Faktor kompensieren. Der Austausch von zwei solchen Objekten in zwei Dimensionen bringt ja wegen den Flussquanten eine Aharanov-Bohm-Phase, die gerade der umgekehrten Phase in (3.156) entspricht. Die Präsenz dieser Flüsse $-2\Phi_0$ pro Elektron hat zur Folge, dass wir diese composite Fermionen in einem effektiven Feld vorfinden, das sich aus dem externen Feld und den zugeordneten Flüssen der Fermionen zusammensetzt:

$$B_{eff} = \frac{1}{3}B + \left\{ \frac{2}{3}B - \sum_i 2\Phi_0(z_i) \right\} \quad (3.157)$$

Für das äussere Feld $B = 3n_0\Phi_0$ hebt sich der Ausdruck in der Klammer im Mittel weg und wir erhalten ein effektives Feld $B_{eff} = n_0\Phi_0$ (Abb.3.21). Wir können also die composite Fermions wie unabhängige Elektronen betrachten, die beim Feld $B = 3n_0\Phi_0$ einen ganzzahligen Quanten-Hall-Zustand $\nu = 1$ einnehmen, den wir oben für wirkliche Elektronen besprochen haben. Diese Sichtweise lässt sich auch auf andere fraktionelle Quanten-Hall-Zustände anwenden, z.B.

$$\nu = \frac{n}{2nk + 1} \quad (3.158)$$

wobei wir von n gefüllten Landau-Levels ausgehen und composite Fermionen mit dem angehängten Fluss $-2k\Phi_0$ betrachten:

$$B_{eff} = n_0 \frac{\Phi_0}{\nu} - 2kn_0\Phi_0 = n_0 \frac{\Phi_0}{n} \Rightarrow \frac{1}{n} + 2k = \frac{1}{\nu} . \quad (3.159)$$

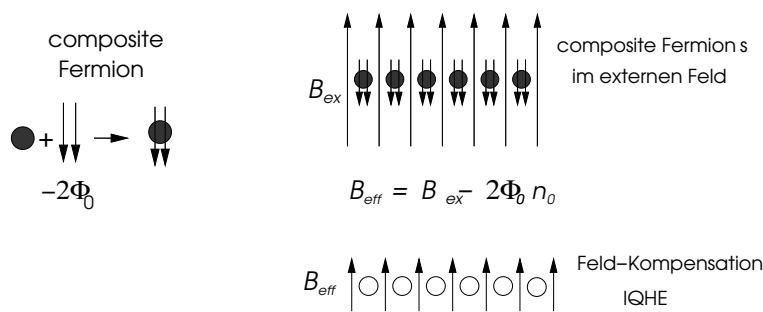


Abb. 3.21

Obwohl diese Betrachtung basierend auf unabhängigen composite Fermions sehr einfach erscheint, sollte man nicht aus den Augen verlieren, dass es sich bei den fraktionierten Quanten-Hall-Zuständen um stark-korrelierte Elektronenzustände handelt. Die Struktur des composite Fermions ist ein Ausdruck davon, dass es sich bei diesen Teilchen nicht um wirklich unabhängige Elektronen handelt. Es gibt keine composite Fermionen im Vakuum, sondern nur im Umfeld eines Viel-Elektronenzustandes. Der fraktionierte Quanten-Hall-Zustand hat auch ungewöhnliche Anregungen mit gebrochenen Ladungen, im Falle von $\nu = 1/3$ hat Laughlin Anregungen mit Ladung $e^* = e/3$ gefunden. Dabei handelt es sich um sogenannte "topologische" Anregungen, die nur in einem korrelierten Viel-Elektronensystem denkbar sind. Damit bilden die Zustände des fraktionierten Quanten-Hall-Systems einen speziellen "geordneten" Zustand des zweidimensionalen Elektronensystem, der viele sehr interessante und komplexe Eigenschaften besitzt.⁸

⁸Zusätzliche Literatur zum Quanten-Hall-Effekt:
 ganzzahliger QHE: *K. von Klitzing et al.*, Physik Journal 4 (6), 37 (2005);
 fraktionierter QHE: *R. Morf*, Physik in unserer Zeit 33, 21 (2002); *J.K. Jain*, Advances in Physics 41, 105 (1992).

Kapitel 4

Landaus Theorie der Fermiflüssigkeiten

Bisher haben wir die Elektronen als mehr oder weniger unabhängige Teilchen betrachtet und den Effekt ihre gegenseitigen Wechselwirkung meist nur im Zusammenhang mit der Renormierung von Potentialen betrachtet. Dabei haben wir aber nicht an der Tatsache gerührt, dass die Elektronen Teilchen sind, die eine gut definierte Energie-Impuls-Beziehung besitzen und im Grundzustand durch eine gefüllten Fermisee mit einer scharfen Fermifläche beschrieben werden. Dies ist jedoch nicht garantiert, wenn wir die Streuung der Elektronen aneinander mitnehmen. In diesem Kapitel zeigen wir jedoch, dass in einem Metall die Beschreibung der Elektronen als Quasiteilchen durchaus seine Berechtigung hat. Das Konzept der Quasiteilchen wird uns zu Landaus phänomenologischen Theorie der Fermiflüssigkeiten führen.

4.1 Lebensdauer eine Quasiteilchens

Wir beginnen unsere Betrachtungen mit dem Problem der Lebensdauer des Zustandes eines Elektrons, das zu einem gefüllten Fermisee hinzugefügt wird. Der Impuls sei $\hbar \vec{k}$ und die Energie $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$ mit $|\vec{k}| > k_F$ und $\epsilon_{\vec{k}} > \epsilon_F$. Durch die Wechselwirkung mit den anderen Elektronen kann dieser Elektronenzustand jedoch in einen Vielteilchenzustand zerfallen, wobei der erste Schritt in der Erzeugung einer zusätzlichen Elektron-Loch-Anregung besteht.

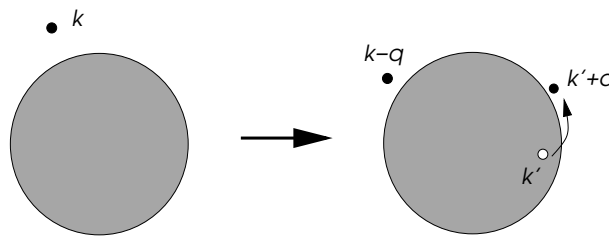


Abb. 4.1

Der Übergang ist erlaubt, wenn der Impuls und die Energie erhalten bleiben:

$$\vec{k} = (\vec{k} - \vec{q}) - \vec{k}' + (\vec{k}' + \vec{q}) \quad \text{und} \quad \epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'} + \epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} \quad (4.1)$$

Wir berechnen die Lebensdauer unter Verwendung von Fermis Goldener Regel. Die Lebensdauer entspricht der Übergangsrate vom Zustand $|\vec{k}\rangle$ zu $|\vec{k} - \vec{q}, \vec{k}' + \vec{q}; \vec{k}'\rangle$ gemäss Abb. 4.1:

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(\vec{q}, 0)} \right|^2 n_{0, \vec{k}'} (1 - n_{0, \vec{k}-\vec{q}}) (1 - n_{0, \vec{k}'+\vec{q}}) \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - (\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}})) \quad (4.2)$$

Wir führen zuerst das Integral über \vec{k}' unter der Bedingung, dass die Energie $\epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'}$ klein ist. Dann können wir das Integral auf folgende Form reduzieren:

$$S(\omega_{\vec{q},\vec{k}}, q) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k' n_{0,\vec{k}'}(1 - n_{0,\vec{k}'+\vec{q}}) \delta(\epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'} - \hbar\omega_{\vec{q},\vec{k}}) = \frac{N(\epsilon_F) \omega_{\vec{q},\vec{k}}}{4 q v_F} \quad (4.3)$$

wobei $N(\epsilon_F) = mk_F/\pi^2\hbar^2$ die Zustandsdichte der Elektronen an der Fermifläche und $\omega_{\vec{q},\vec{k}} = \hbar(2\vec{k} \cdot \vec{q} - \vec{q}^2)/2m > 0$ ist.¹

Das verbleibende Integral über \vec{q} führen wir unter der Voraussetzung aus, dass das Matrixelement $|4\pi e^2/q^2 \epsilon(\vec{q}, 0)|^2$ nur sehr schwach von \vec{q} abhängt, insbesondere für kleine \vec{q} , d.h. die Wechselwirkung ist kurzreichweitig. Wir benutzen Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\vec{k}}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{VN(\epsilon_F)}{4v_F} \sum_{\vec{q}} \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(\vec{q}, 0)} \right|^2 \frac{\omega(\vec{k}, \vec{q})}{q} \\ &= \frac{V^2 N(\epsilon_F)}{(2\pi)^2 4\hbar v_F} \int d^3\vec{q} \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(\vec{q}, 0)} \right|^2 \frac{\omega(\vec{k}, \vec{q})}{q} \\ &= \frac{V^2 N(\epsilon_F)}{(2\pi) 8m v_F} \int dq \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(q, 0)} \right|^2 q^2 \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \sin\theta (2k \cos\theta - q) \\ &= \frac{V^2 N(\epsilon_F)}{(2\pi) 8m v_F} \int dq \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(q, 0)} \right|^2 q^2 \left[-\frac{1}{4k} (2k \cos\theta - q)^2 \right]_{\theta_1}^{\theta_2}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die Einschränkung des θ -Integrationsbereichs ergibt sich aus der Bedingung $k^2 \geq (\vec{k} - \vec{q})^2 \geq k_F^2$ mit $(\vec{k} - \vec{q})^2 = k^2 - 2kq \cos\theta + q^2$. Aus der ersten Ungleichung folgt $\cos\theta_2 = q/2k$, aus der

¹Dieses Intergral wird für kleine ω in zylindrischen Koordinaten gelöst, indem die Richtung von \vec{q} als Zylinderachse betrachtet wird:

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{k_1}^{k_2} dk'_\perp k'_\perp \int_0^{k_F} dk'_\parallel \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 q k'_\parallel}{m} - \hbar\omega\right) = \frac{m}{4\pi^2 q} (k_1^2 - k_2^2) \quad (4.4)$$

mit $k_2^2 = k_F^2 - k_{\parallel,0}^2$ und $k_1^2 = k_F^2 - (k_{\parallel,0} + q)^2$, wobei sich $k_{\parallel,0} = (2m\omega - \hbar q^2)/2\hbar q$ aus der Nullstelle der δ -Funktion ergibt.

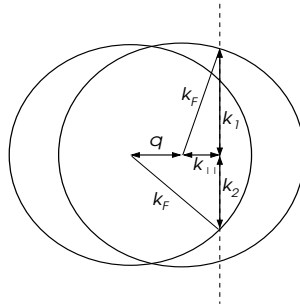


Abb. 4.2

Die Wellenvektoren k_2 und k_1 entsprechen der oberen bzw. unteren Grenze, die aus der Einschränkung $n_{0,\vec{k}'}(1 - n_{0,\vec{k}'+\vec{q}})$ folgt und durch einfache geometrische Betrachtung bestimmt werden. Durch Einsetzen erhalten wir (4.3).

zweiten $\cos \theta_1 = (k^2 - k_F^2 + q^2)/2kq$. Somit ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\vec{k}}} &= \frac{V^2 N(\epsilon_F)}{(2\pi)8mv_F} \int dq \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(q, 0)} \right|^2 \frac{1}{4k} (k^2 - k_F^2)^2 \\ &\approx \frac{V^2 N(\epsilon_F)}{(2\pi)8v_F} \frac{m}{k_F} \frac{1}{\hbar^4} (\epsilon_{\vec{k}}^2 - \epsilon_F)^2 \int dq \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(q, 0)} \right|^2 \\ &= \frac{\pi e^4 V^2}{\hbar^3} \frac{N(\epsilon_F)}{v_F^2} (\epsilon_{\vec{k}}^2 - \epsilon_F)^2 \int dq \frac{1}{|q^2 \epsilon(q, 0)|^2}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Beachte, dass das letzte q -Integral nur konvergiert, falls der Integrand maximal mit q^α ($\alpha < 1$) für $q \rightarrow 0$ divergiert. Für die Dielektrizitätsfunktion, die wir im letzten Kapitel berechnet hatten, ist dies sicher erfüllt.

Die Essenz des Resultats ist, dass

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} \propto (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F)^2 \quad (4.7)$$

für \vec{k} oberhalb, aber sehr nahe bei der Fermifläche. Das bedeutet, dass der Zustand des Elektrons $|\vec{k}s\rangle$ nur noch als Resonanz mit einer Breite $\hbar/\tau_{\vec{k}}$ auftritt. Nichtsdestoweniger finden wir, dass

$$\frac{\hbar/\tau_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F} \xrightarrow{k \rightarrow k_F} 0 \quad (4.8)$$

d.h. die Resonanz wird nahe bei der Fermifläche beliebig scharf, so dass das Konzept des Quasiteilchens für die Elektronen anwendbar bleibt. Damit bleibt auch der Wellenvektor oder Impuls eines Elektrons eine (vernünftig) gute Quantenzahl. All dies ist eine Konsequenz des Pauli-Ausschlussprinzips, welches den Phasenraum für die Zerfallsprozesse eines Elektronenzustandes sehr stark einschränkt, speziell nahe bei der Fermifläche. Es ist aber wichtig, dass unsere Abschätzung der Lebensdauer davon abhing, dass das Potential kurzreichweitig ist. Langreichweitige Potentiale können dieses Verhalten stark beeinträchtigen. Physikalisch hat das damit zu tun, dass eine reichweitige Potential mehr Zerfallskanäle öffnet.

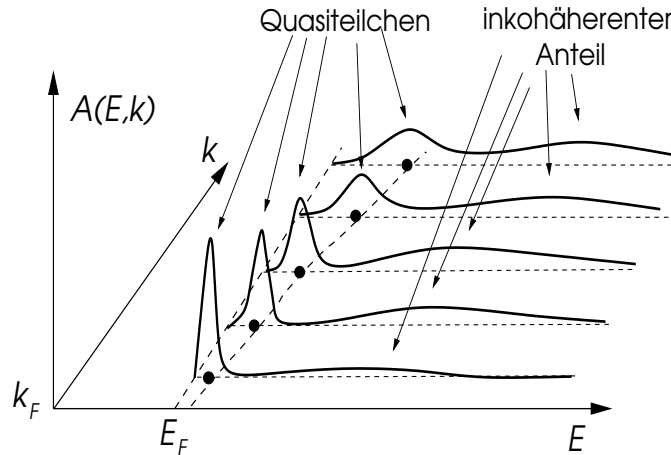


Abb. 4.2

4.2 Landau'sche Theorie der Fermiflüssigkeiten

Die Existenz der wohldefinierten Quasiteilchen, die Fermionischen Charakter besitzen, obwohl sie sehr komplexe Vielteilchengebilde sind, führte Landau zu folgende phänomenologischen Theorie. Wie die unabhängigen Elektronenzustände durch ihre Wellenvektoren \vec{k} und Spin σ unterscheidbar sind, können Quasiteilchen durch (\vec{k}, σ) charakterisiert werden. Es lässt sich eine

Eins-zu-Eins-Abbildung der unabhängigen Elektronen auf die Quasiteilchen durchführen. Dies bedeutet auch, dass die Zahl der Quasiteilchen mit der Zahl der ursprünglichen Elektronen übereinstimmt. Wir definieren die Impulsverteilungsfunktion der Quasiteilchen, $n_\sigma(\vec{k})$, die die Bedingung erfüllt:

$$N = \sum_{\vec{k}, \sigma} n_\sigma(\vec{k}) . \quad (4.9)$$

Im Grundzustand ist diese Verteilungsfunktion analog zur Fermi-Dirac-Verteilung eine Stufenfunktion.

$$n_\sigma^{(0)}(\vec{k}) = \Theta(k_F - |\vec{k}|) \quad (4.10)$$

Für ein sphärisch symmetrisches Elektronensystem, ist die so definierte Fermifläche wieder eine Kugel mit gleichem Radius k_F wegen der gleichen Teilchenzahl. Im allgemeinen kann jedoch die Fermifläche durch die Wechselwirkung deformiert werden, ohne die grundlegende Symmetrie (Punktgruppe) des Systems zu verändern. Dabei bleibt das Volumen, das von der Fermifläche eingeschlossen wird erhalten (Luttinger-Theorem: Erhaltung des Fermi-Volumens, J.M. Luttinger, Phys. Rev. 119, 1153 (1960)). Beachte, dass die Verteilung $n_\sigma^{(0)}(\vec{k})$ nicht identisch ist mit $n_{0\vec{k}s} = \langle \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} \rangle$ (Abb. 4.3). Interessanterweise hat $n_{0\vec{k}s}$ immer noch einen Sprung an der Fermienergie, der jedoch im Allgemeinen kleiner als 1 ist. Die Grösse dieser Unstetigkeit in $n_{0\vec{k}s}$ ist ein Mass für das "Gewicht" des Quasiteilchens an der Fermifläche, d.h. welcher Anteil der Wellenfunktion des Originalteilchens (ohne Wechselwirkung) im Quasiteilchen enthalten ist.

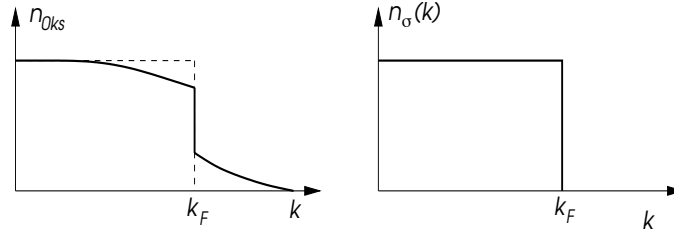


Abb. 4.3

Abweichungen von der Grundzustandsverteilung werden durch

$$\delta n_\sigma(\vec{k}) = n_\sigma(\vec{k}) - n_\sigma^{(0)}(\vec{k}) \quad (4.11)$$

beschrieben, welche die wesentliche Information über das System enthält. Wir definieren nun eine Energie, die von der Quasiteilchen-Verteilung abhängt:

$$E = E_0 + \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_\sigma(\vec{k}) \delta n_\sigma(\vec{k}) + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta n_\sigma(\vec{k}) \delta n_{\sigma'}(\vec{k}') + O(\delta n^3) \quad (4.12)$$

wobei E_0 die Grundzustandsenergie bezeichnet. Dabei sind sowohl $\epsilon_\sigma(\vec{k})$ als auch $f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}')$ phänomenologische Grössen, die aus dem Experiment bestimmt werden können. Die variationelle Ableitung

$$\tilde{\epsilon}_\sigma(\vec{k}) = \frac{\delta E}{\delta n_\sigma(\vec{k})} = \epsilon_\sigma(\vec{k}) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta n_{\sigma'}(\vec{k}') + \dots \quad (4.13)$$

liefert eine effektive Energie-Impuls-Beziehung $\tilde{\epsilon}_\sigma(\vec{k})$, die von der Verteilung aller Quasiteilchen abhängt. Ein Quasiteilchen bewegt sich im mittleren Feld der anderen Quasiteilchen, so dass sich Änderungen in der Verteilung auf diese Grössen auswirken. Die zweite variationelle Ableitung definiert dann die Kopplung zwischen den Quasiteilchen

$$\frac{\delta^2 E}{\delta n_\sigma(\vec{k}) \delta n_{\sigma'}(\vec{k}')} = \frac{1}{\Omega} f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') . \quad (4.14)$$

Wir führen eine Parametrisierung dieser Kopplungen ein, indem wir annehmen, dass Abhängigkeit von \vec{k} , \vec{k}' sich auf den Relativwinkel $\theta_{\hat{k}, \hat{k}'}$ beschränken lässt (sphärische Symmetrie), da wir nur Quasiteilchen sehr nahe von der Fermifläche betrachten:

$$f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') = f^s(\hat{k}, \hat{k}') + \sigma\sigma' f^a(\hat{k}, \hat{k}') \quad \Rightarrow \quad f^{s,a}(\hat{k}, \hat{k}') = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{s,a} P_l(\cos \theta_{\hat{k}, \hat{k}'} \quad (4.15)$$

mit $\hat{k} = \vec{k}/|\vec{k}|$ und $P_l(z)$ sind die Legendre-Polynome (s, a stehen für symmetrisch bzw. antisymmetrisch). Wir führen folgende Parameter ein:

$$N(\epsilon_F) f_l^s = F_l^s \quad \text{und} \quad N(\epsilon_F) f_l^a = F_l^a, \quad (4.16)$$

wobei $N(\epsilon_F) = m^* k_F / \hbar^2 \pi^2$ ist Zustandsdichte. In der Literatur wird oft auch die Notation $F_l^s = F_l$ und $F_l^a = Z_l$ verwendet.

4.2.1 Spezifische Wärme und Zustandsdichte

Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion zeigt, dass bei tiefen Temperaturen die Differenz

$$\delta n_{\sigma}(\vec{k}) = n_{\sigma}^{(0)}(T, \vec{k}) - n_{\sigma}^{(0)}(0, \vec{k}) \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \delta n_{\sigma}(\vec{k}) \propto T^2 + O(T^4) \quad (4.17)$$

Damit dürfen wir zu niedrigster Ordnung

$$n_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{1}{e^{(\epsilon(\vec{k}) - \mu)/k_B T} + 1} \quad (4.18)$$

mit $\epsilon_{\sigma}(\vec{k})$ anstelle des renormierten $\tilde{\epsilon}_{\sigma}(\vec{k})$ verwenden, da $\tilde{\epsilon}$ sich nur in der Ordnung T^2 von ϵ unterscheidet. Wenn wir uns auf die dominanten Terme konzentrieren (meist T^0 und T^1), können solche Korrekturen vernachlässigt werden.

Wir betrachten die spezifische Wärme mit Hilfe der Entropie des Fermionischen Systems. Für jedes Quasiteilchen mit gegebenem Spin ist ein "Platz" \vec{k} reserviert. Die Entropie-Dichte berechnet sich mittels der Verteilungsfunktion:

$$S = -\frac{k_B}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \sigma} \left\{ n_{\sigma}(\vec{k}) \ln[n_{\sigma}(\vec{k})] + [1 - n_{\sigma}(\vec{k})] \ln[1 - n_{\sigma}(\vec{k})] \right\} \quad (4.19)$$

Die spezifische Wärme erhalten wir nun durch Ableitung nach T ;

$$\frac{C}{T} = \frac{\partial S}{\partial T} = -\frac{k_B}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{e^{\xi(\vec{k})/k_B T}}{(e^{\xi(\vec{k})/k_B T} + 1)^2} \frac{\xi(\vec{k})}{k_B T^2} \ln \frac{n_{\sigma}(\vec{k})}{1 - n_{\sigma}(\vec{k})} \quad (4.20)$$

$= (2 \cosh(\xi(\vec{k})/2k_B T))^{-2} \quad \quad \quad = \xi(\vec{k})/k_B T$

wobei wir die Notation $\xi(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) - \mu$ verwendet haben. Daraus ergibt sich für $T \rightarrow 0$:

$$\frac{C}{T} \approx \frac{N(\epsilon_F)}{4k_B T^3} \int d\xi \frac{\xi^2}{\cosh^2(\xi/2k_B T)} \approx \frac{k_B^2 N(\epsilon_F)}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{y^2}{\cosh^2(y/2)} = \frac{\pi^2 k_B^2 N(\epsilon_F)}{3} = \gamma, \quad (4.21)$$

das bekannte Verhalten $C = \gamma T$. Die Zustandsdichte an der Fermienergie folgt aus:

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})|_{\vec{k}_F} = v_F = \frac{\hbar \vec{k}_F}{m^*} \quad \Rightarrow \quad N(\epsilon_F) = \frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon(\vec{k}) - \epsilon_F) = \frac{k_F^2}{\pi^2 \hbar v_F} = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2} \quad (4.22)$$

wodurch wir die effektive Masse m^* definieren.

4.2.2 Kompressibilität

Ein Fermigas hat eine endliche Kompressibilität, da jedes Fermion wegen des Pauli-Prinzips einen gewissen Raum für sich beansprucht. Diese wird durch die Wechselwirkung modifiziert. Die Kompressibilität κ ist definiert durch:

$$\kappa = -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial p} \quad (4.23)$$

wobei p den uniformen (hyrostatischen) Druck bezeichnet, der bei $T = 0$ mit der Änderung der Grundzustandsenergie unter Volumenänderung zusammenhängt:

$$p = -\frac{\partial E}{\partial \Omega} = -\frac{\partial \Omega \hat{\epsilon}(n)}{\partial \Omega} = -\hat{\epsilon} + \frac{N}{\Omega} \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial n} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\kappa} = \Omega \frac{\partial^2 E}{\partial \Omega^2} = n^2 \frac{\partial^2 \hat{\epsilon}}{\partial n^2} \quad (4.24)$$

wobei $E = \Omega \hat{\epsilon}(n)$ und n die Quasiteilchendichte ($n = N/\Omega$) ist. Das chemische Potential folgt aus

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N} = \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial n} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\kappa} = n^2 \frac{\partial \mu}{\partial n} \quad (4.25)$$

Eine Änderung von n und k_F sind verknüpft miteinander:

$$n = \frac{N}{\Omega} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad \Rightarrow \quad \delta n = \frac{k_F^2}{\pi^2} \delta k_F. \quad (4.26)$$

Ebenso ist das chemische Potential von k_F abhängig: $\mu = \tilde{\epsilon}(\vec{k}_F, n_\sigma(\vec{k}))$.

$$\delta \mu = v_F \hbar \delta k_F + \frac{\delta \tilde{\epsilon}(\vec{k}_F)}{\delta n_{\sigma'}(\vec{k}')} \frac{\delta n_{\sigma'}(\vec{k}')}{\delta k_F} \delta k_F = v_F \hbar \delta k_F + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma, \sigma'}(\vec{k}_F, \vec{k}') \delta(k' - k_F) \delta k_F \quad (4.27)$$

so dass

$$\frac{\partial \mu}{\partial k_F} = \hbar v_F + \frac{4\pi k_F^2}{(2\pi)^3} \int \frac{d\Omega_{\hat{k}'}}{4\pi} \sum_{\sigma'} f_{\sigma \sigma'}(\hat{k}, \hat{k}') = \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} \left\{ 1 + N(\epsilon_F) \int \frac{d\Omega_{\hat{k}'}}{4\pi} f^s(\hat{k}, \hat{k}') \right\} \quad (4.28)$$

Damit ergibt sich unter Verwendung von (4.16) und (4.25)

$$\frac{1}{\kappa} = n^2 \frac{\partial \mu}{\partial k_F} \frac{\partial k_F}{\partial n} = \frac{n^2}{N(\epsilon_F)} \{1 + F_0^s\} \quad (4.29)$$

4.2.3 Spin-Suszeptibilität

Wenn wir ein Magnetfeld anlegen, dann ändern sich die Quasiteilchenenergien je nach Spin-Orientierung. Da wir ein isotropes System behandeln, können wir ohne Verlust der Allgemeinheit das Feld entlang der z -Achse legen und erhalten für die Energieänderungen:

$$\delta \tilde{\epsilon}_\sigma(\vec{k}) = -g \mu_B H \frac{\sigma}{2} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma, \sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta n_{\sigma'}(\vec{k}') = -\tilde{g} \mu_B H \frac{\sigma}{2}. \quad (4.30)$$

Die Wechselwirkung führt zu einem effektiven gyromagnetischen Faktor \tilde{g} , der von $g = 2$ abweicht. Betrachten wir den Wechselwirkungsterm:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma \sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta n_{\sigma'}(\vec{k}') &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma \sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \frac{\partial n_{\sigma'}(\vec{k}')}{\partial \tilde{\epsilon}_{\sigma'}(\vec{k}')} \delta \tilde{\epsilon}_{\sigma'}(\vec{k}') \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma \sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta(\tilde{\epsilon}_{\sigma'}(\vec{k}') - \epsilon_F) \tilde{g} \mu_B H \frac{\sigma'}{2} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Damit leiten wir aus (4.30) folgende Gleichung her:

$$\tilde{g} = g - \tilde{g}N(\epsilon_F) \int \frac{d\Omega_{\hat{k}'}}{4\pi} f^a(\hat{k}, \hat{k}') = g - \tilde{g}F_0^a \quad \Rightarrow \quad \tilde{g} = \frac{g}{1 + F_0^a}. \quad (4.32)$$

Die Magnetisierung berechnet sich nun aus der Verteilungsfunktion:

$$M = g\mu_B \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\sigma}{2} \delta n_\sigma(\vec{k}) = g\mu_B \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\sigma}{2} \frac{\partial n_\sigma(\vec{k})}{\partial \tilde{\epsilon}_\sigma(\vec{k})} \delta \tilde{\epsilon}_\sigma(\vec{k}) = g\mu_B \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\sigma}{2} \delta(\tilde{\epsilon}_\sigma(\vec{k}) - \epsilon_F) \tilde{g}\mu_B H \frac{\sigma}{2} \quad (4.33)$$

und schliesslich die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{M}{H\Omega} = \frac{\mu_B^2 N(\epsilon_F)}{1 + F_0^a} \quad (4.34)$$

Die Änderung der Quasiteilchen-Verteilung im Magnetfeld führt also zu einer Rückkopplung, die die Suszeptibilität verstärken oder schwächen kann.

4.2.4 Effektive Masse

Wir untersuchen nun die effektive Masse der Quasiteilchen. Diese Masse hängt natürlich von der Verteilung der anderen Quasiteilchen ab, da sich ein Teilchen nicht unabhängig von den anderen bewegt. Betrachte ein System bei dem alle Teilchen einen zusätzlichen infinitesimalen Impuls $\hbar \vec{q}$ erhalten haben (Gallilei-Transformation) und vergleiche die Energie mit derjenigen des Grundzustandes:

$$\begin{aligned} \delta E &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \{ \epsilon_\sigma(\vec{k} + \vec{q}) - \epsilon_\sigma(\vec{k}) \} \delta n_\sigma(\vec{k}) \\ &+ \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \{ f_{\sigma\sigma'}(\vec{k} + \vec{q}, \vec{k}' + \vec{q}) - f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \} \delta n_\sigma(\vec{k}) \delta n_{\sigma'}(\vec{k}') \\ \delta E &\approx \sum_{\vec{k}, \sigma} \vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_\sigma(\vec{k}) \delta n_\sigma(\vec{k}) - \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \frac{\partial n_{\sigma'}(\vec{k}')}{\partial \epsilon_{\sigma'}(\vec{k}')} \vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_\sigma(\vec{k}) \delta n_\sigma(\vec{k}) \\ &= \hbar \vec{q} \cdot \sum_{\vec{k}, \sigma} \delta n_\sigma(\vec{k}) \left[\vec{v}(\vec{k}) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta(\epsilon_{\sigma'}(\vec{k}') - \epsilon_F) \vec{v}(\vec{k}') \right] \end{aligned} \quad (4.36)$$

mit $\vec{v}(\vec{k}) = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_\sigma(\vec{k}) / \hbar = \hbar \vec{k} / m^*$. Da wir alle Teilchen mit dem gleichen Impuls versehen, gilt für die Gesamtenergieänderung das Gallilei-Verhalten, welches für ein Teilchen mit ursprünglichen Impuls \vec{p} auf die Energieänderung bei infinitesimaler Impulsverschiebung $\hbar \vec{q}$

$$\delta E_{\vec{p}} = \frac{1}{2m} (\vec{p} + \hbar \vec{q})^2 - \frac{1}{2m} \vec{p}^2 \approx \frac{\hbar}{m} \vec{p} \cdot \vec{q} \quad (4.37)$$

führt. Daher ist obige Energieänderung auch gemäss Gallilei-Invarianz:

$$\delta E = \sum_{\vec{k}, \sigma} \delta E_{\hbar \vec{k}} = \hbar \vec{q} \cdot \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar \vec{k}}{m} \delta n_\sigma(\vec{k}), \quad (4.38)$$

so dass

$$\frac{\hbar \vec{k}}{m} = \vec{v}(\vec{k}) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') \delta(\epsilon_{\sigma'}(\vec{k}') - \epsilon_F) \vec{v}(\vec{k}') \quad (4.39)$$

und

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m^*} + N(\epsilon_F) \int \frac{d\Omega_{\hat{k}'}}{4\pi} f^s(\hat{k}, \hat{k}') \frac{\hat{k} \cdot \hat{k}'}{m^*} \quad (4.40)$$

$$\Rightarrow \frac{m^*}{m} = 1 + \frac{1}{3} F_1^s$$

wobei der Faktor $1/3$ von $1/(2l+1)$ für $l=1$ herrührt, denn

$$\int_{-1}^{+1} dz P_l(z) P_l(z) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1} \quad (4.41)$$

4.2.5 Stabilität der Fermiflüssigkeit

Bei der Renormierung der bisher betrachteten Größen

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1+F_0^s}, \quad \frac{\chi}{\chi_0} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1+F_0^a} \quad \text{mit} \quad \frac{m^*}{m} = 1 + \frac{1}{3} F_1^s \quad (4.42)$$

fällt auf, dass z.B. die Kompressibilität κ und die Suszeptibilität χ divergieren für $F_0^s \rightarrow -1$ bzw. $F_0^a \rightarrow -1$. Dies würde eine Instabilität des Systems bedeuten. So führt eine divergierende Suszeptibilität zu einem Ferromagnetischen Zustand mit aufgespalteter Fermifläche, in eine für die beiden Spin-Richtungen. Eine divergierende Kompressibilität würde einer spontanen Kontraktion des Systems entsprechen.

Man kann sich natürlich beliebige Abweichungen vom einfachen Fermiflüssigkeitszustand vorstellen, die sich nach der Deformation der Quasiteilchenverteilungsfunktion um die Fermifläche klassifizieren lassen:

$$\delta n_\sigma(\hat{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} \delta n_{\sigma,l} P_l(\cos \theta_{\hat{k}}) \quad (4.43)$$

Für Ladungsdichtedeformationen gilt $\delta n_{+l}(\hat{k}) = \delta n_{-l}(\hat{k})$ und für Spindichtedeformationen $\delta n_{+l}(\hat{k}) = -\delta n_{-l}(\hat{k})$. Die Stabilität der Fermiflüssigkeit gegenüber irgendeiner dieser Deformationen erfordert, dass

$$1 + \frac{F_l^{s,a}}{2l+1} > 0 \quad (4.44)$$

Man sieht, dass die Renormierung in der Fermiflüssigkeit auch zu einer Änderung des Wilson-Verhältnisses führt:

$$\frac{R}{R_0} = \frac{\chi}{\chi_0} \frac{\gamma_0}{\gamma} = \frac{1}{1+F_0^a} \quad (4.45)$$

wobei $R_0 = \chi_0/\gamma_0 = 6\mu_B^2/\pi^2 k_B^2$. Beachte, dass das Wilson-Verhältnis nicht von der effektiven Masse abhängt.

Das Erstaunliche der Fermiflüssigkeitstheorie ist, dass selbst sehr stark wechselwirkende Fermionen Fermiflüssigkeiten bleiben. Dies gilt für die Quantenflüssigkeit ^3He sowohl wie für die Systeme schwerer Elektronen, die Verbindungen zwischen Übergangsmetallen und seltenen Erden sind. Beide stellen sehr stark renormierte Fermiflüssigkeiten dar.

4.3 Einfache mikroskopische Betrachtung

Die rigorose mikroskopische Herleitung der Landau'schen Fermiflüssigkeitstheorie erfordert eine quantenfeldtheoretische Formulierung und geht über diese Vorlesung hinaus. Aber ein einfacher Einblick lässt sich schon mit Hilfe einfacher Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie gewinnen. Betrachten wir folgendes Modell von Fermion mit einer Kontaktwechselwirkung:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},s} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}s} + \frac{U}{\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.46)$$

wobei $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$.

4.3.1 Landau-Parameter

Wir nehmen eine gegebene Impulsverteilung $n_{\vec{k}s} = \langle c_{\vec{k}s}^\dagger c_{\vec{k}s} \rangle$ an und entwickeln die entsprechende Energie nach der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie:

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots \quad \text{mit} \\ E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \epsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k}s}, \quad E^{(1)} = \frac{U}{\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} n_{\vec{k}\uparrow} n_{\vec{k}'\downarrow}, \\ E^{(2)} &= \frac{U^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \frac{n_{\vec{k}\uparrow} n_{\vec{k}'\downarrow} (1 - n_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow}) (1 - n_{\vec{k}'-\vec{q}\downarrow})}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Der Term zweiter Ordnung enthält virtuelle Prozesse, d.h. die Erzeugung von Teilchen-Loch-Anregungen. Der Zähler dieses Terms lässt sich in vier verschiedene Beiträge aufspalten. Betrachten wir zuerst den Term quadratisch in $n_{\vec{k}}$:

$$\tilde{E}^{(1)} = E^{(1)} + \frac{U^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \frac{n_{\vec{k}\uparrow} n_{\vec{k}'\downarrow}}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}} \approx \frac{\tilde{U}}{\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} n_{\vec{k}\uparrow} n_{\vec{k}'\downarrow} \quad (4.48)$$

womit wir eine renormierte Wechselwirkung definieren:

$$\tilde{U} = U + \frac{U^2}{\Omega} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}} \quad (4.49)$$

Eigentlich ist \tilde{U} abhängig von den Wellenvektoren \vec{k}, \vec{k}' . Wenn wir uns aber auf die Nähe der Fermioberfläche konzentrieren ($|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k_F$), ist die Abhängigkeit schwach. Der nächst höhere Term ist kubisch in $n_{\vec{k}}$:

$$\tilde{E}^{(2)} = -\frac{\tilde{U}^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \frac{n_{\vec{k}\uparrow} n_{\vec{k}'\downarrow} (n_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} + n_{\vec{k}'-\vec{q}\downarrow})}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}} \quad (4.50)$$

Wir haben hier U^2 durch \tilde{U}^2 ersetzt, was bis zu dieser Ordnung erlaubt ist. Der Term quartisch in $n_{\vec{k}}$ verschwindet.

Wir können die Energie E bezüglich $n_{\vec{k}\uparrow}$ variieren und erhalten

$$\tilde{\epsilon}_\uparrow(\vec{k}) = \epsilon_{\vec{k}} + \frac{\tilde{U}}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} n_{\vec{k}'\downarrow} - \frac{\tilde{U}^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}',\vec{q}} \frac{n_{\vec{k}'\downarrow} (n_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} + n_{\vec{k}'-\vec{q}\downarrow}) - n_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} n_{\vec{k}'-\vec{q}\downarrow}}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}} \quad (4.51)$$

und analog für $\epsilon_\downarrow(\vec{k})$. Mit Hilfe der Definition (4.13) bestimmen wir die Kopplungsparameter. Wir beginnen mit $f_{\uparrow\uparrow}(\vec{k}_F, \vec{k}'_F)$ mit Wellenvektoren auf der Fermikugel ($\vec{k} \rightarrow \vec{k}_F$). Die Terme,

die zu dieser Kopplung beitragen sind:

$$\begin{aligned} & \frac{\tilde{U}^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} n_{\vec{k} + \vec{q} \uparrow} \frac{n_{\vec{k}' - \vec{q} \downarrow} - n_{\vec{k}' \downarrow}}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}' - \vec{q}}} \\ & \xrightarrow{\vec{k} + \vec{q} \rightarrow \vec{k}'_F} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}'_F} n_{\vec{k}'_F} \frac{\tilde{U}^2}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} \frac{n_{\vec{k}' - \vec{q} \downarrow} - n_{\vec{k}' \downarrow}}{\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}' - \vec{q}}} \Big|_{\vec{q} = \vec{k}'_F - \vec{k}_F} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}'_F} n_{\vec{k}'_F} \frac{\tilde{U}^2}{2} \chi(\vec{k}'_F - \vec{k}_F) \end{aligned} \quad (4.52)$$

wobei $\chi(\vec{q})$ der statischen Suszeptibilität in (3.32) entspricht ($\omega = 0$). Daraus ergibt sich

$$f_{\uparrow\uparrow}(\vec{k}_F, \vec{k}'_F) = f_{\downarrow\downarrow}(\vec{k}_F, \vec{k}'_F) = \frac{\tilde{U}^2}{2} \chi(\vec{k}_F - \vec{k}'_F) \quad (4.53)$$

Analog erhält man die anderen Kopplungen:

$$f_{\uparrow\downarrow}(\vec{k}_F, \vec{k}'_F) = f_{\downarrow\uparrow}(\vec{k}_F, \vec{k}'_F) = \tilde{U} - \frac{\tilde{U}^2}{2} \left\{ 2\tilde{\chi}(\vec{k}_F + \vec{k}'_F) - \chi(\vec{k}_F - \vec{k}'_F) \right\} \quad (4.54)$$

wobei wir die Funktion $\tilde{\chi}(\vec{q})$ folgendermassen definieren:

$$\tilde{\chi}(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} \frac{n_{\vec{k}' + \vec{q} \uparrow} + n_{\vec{k}' \downarrow}}{2\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}' + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'}} \quad (4.55)$$

Wir können nun die Kopplungen durch den Winkel θ zwischen \vec{k}_F und \vec{k}'_F ausdrücken.

$$\begin{aligned} f_{\sigma\sigma'}(\theta) &= \frac{\tilde{U}}{2} \left[\left\{ 1 + \frac{\tilde{U}N(\epsilon_F)}{2} \left(2 + \frac{\cos\theta}{2\sin(\theta/2)} \ln \frac{1 + \sin(\theta/2)}{1 - \sin(\theta/2)} \right) \right\} \delta_{\sigma\sigma'} \right. \\ & \quad \left. - \left\{ 1 + \frac{\tilde{U}N(\epsilon_F)}{2} \left(1 - \frac{\sin(\theta/2)}{2} \ln \frac{1 + \sin(\theta/2)}{1 - \sin(\theta/2)} \right) \right\} \sigma\sigma' \right] \end{aligned} \quad (4.56)$$

Daraus bestimmen wir die wichtigsten Landau-Parameter ($\tilde{u} = \tilde{U}N(\epsilon_F) > 0$):

$$\begin{aligned} F_0^s &= \tilde{u} \left\{ 1 + \tilde{u} \left(1 + \frac{1}{6}(2 + \ln 2) \right) \right\} = \tilde{u} + 1.449 \tilde{u}^2 > 0 \\ F_0^a &= -\tilde{u} \left\{ 1 + \tilde{u} \left(1 - \frac{2}{3}(1 - \ln 2) \right) \right\} = -\tilde{u} - 0.895 \tilde{u}^2 < 0 \\ F_1^s &= \tilde{u}^2 \frac{2}{15} (7\ln 2 - 1) = 0.514 \tilde{u}^2 > 0 \end{aligned} \quad (4.57)$$

Daher wird in jedem Fall die effektive Masse m^* grösser als die nackte Masse m , denn die Wechselwirkung der Teilchen untereinander erzwingt die Bewegung vieler Teilchen, wenn man eines bewegen will. Es zeigt sich jedoch, dass Kompressibilität und Suszeptibilität sich je nach dem Charakter der Wechselwirkung verhalten. Ist die Wechselwirkung repulsiv ($\tilde{u} > 0$) nimmt die Kompressibilität ab - es wird schwieriger die Fermiflüssigkeit zusammenzudrücken -, während die Suszeptibilität ansteigt - es wird leichter die Spins zu polarisieren. Umgekehrt wird die Kompressibilität grösser, wenn die Wechselwirkung attraktiv ist - die Kontraktion der Fermiflüssigkeit wird erleichtert -, und die Suszeptibilität sinkt ab - es ist schwieriger die Spins zu polarisieren. Der Fall der attraktiven Wechselwirkung ist jedoch komplexer, da die Fermiflüssigkeit in diesem Fall instabil ist und in eine supraflüssige Phase übergeht, wie wir später sehen werden.

4.3.2 Unstetigkeit in der Verteilungsfunktion

Wir stellen nun noch einige Betrachtungen über die Zustände innerhalb der Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung an. Die Berechnung der Korrekturen zum Grundzustand $|\Psi_0\rangle$, dem gefüllten Fermisee, ist relativ einfach:

$$|\Psi\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle + |\Psi^{(1)}\rangle + \dots$$

$$|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_0\rangle \quad \text{und} \quad |\Psi^{(1)}\rangle = \frac{U}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \sum_{s, s'} \frac{\hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}, s'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}', s'} \hat{c}_{\vec{k}, s}}{\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}} |\Psi_0\rangle \quad (4.58)$$

Damit bestimmen wir die Impulsverteilungsfunktion $\langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle = \langle \hat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}s} \rangle$:

$$\langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}s} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle^{(0)} + \langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle^{(2)} + \dots \quad (4.59)$$

Hier ist $\langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle^{(0)}$ natürlich die einfache Stufenverteilung $\Theta(k_F - |\vec{k}|)$, und

$$\langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle^{(2)} = \begin{cases} -\frac{U^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \frac{(1-n_{\vec{k}_1})(1-n_{\vec{k}_2})n_{\vec{k}_3}}{(\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}_3} - \epsilon_{\vec{k}_1} - \epsilon_{\vec{k}_2})^2} \delta_{\vec{k}+\vec{k}_3, \vec{k}_1+\vec{k}_2} & |\vec{k}| < k_F \\ \frac{U^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \frac{n_{\vec{k}_1} n_{\vec{k}_2} (1-n_{\vec{k}_3})}{(\epsilon_{\vec{k}_1} + \epsilon_{\vec{k}_2} - \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}_3})^2} \delta_{\vec{k}+\vec{k}_3, \vec{k}_1+\vec{k}_2} & |\vec{k}| > k_F \end{cases} \quad (4.60)$$

Wir verwenden dieses Resultat, um die Grösse der Unstetigkeit der Verteilungsfunktion an der Fermikante zu bestimmen:

$$\langle \hat{n}_{\vec{k}_{F-}} \rangle - \langle \hat{n}_{\vec{k}_{F+}} \rangle = 1 - \left(\frac{UN(\epsilon_F)}{2} \right)^2 \ln 2 \quad (4.61)$$

Der Sprung von $\langle \hat{n}_{\vec{k}} \rangle$ wird reduziert, unabhängig vom Vorzeichen der Wechselwirkung. Der Sprung ist auch ein Mass für das Gewicht des Quasiteilchenzustandes an der Fermikante.

Es ist interessant die gleiche Betrachtung für ein eindimensionales System anzustellen. Nach etwas Rechnung findet man

$$\langle \hat{n}_{\vec{k}s} \rangle^{(2)} \approx \begin{cases} \frac{1}{8\pi^2} \frac{U^2}{\hbar^2 v_F^2} \ln \frac{k_+}{k - k_F} & k > k_F \\ -\frac{1}{8\pi^2} \frac{U^2}{\hbar^2 v_F^2} \ln \frac{k_-}{k_F - k} & k < k_F \end{cases} \quad (4.62)$$

wobei k_+ und k_- Abschneideparameter sind von der Grösse von k_F .

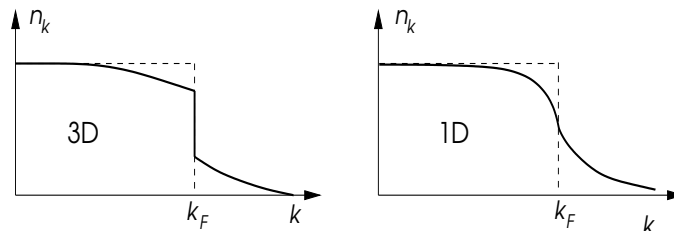


Abb. 4.4

Es ist offensichtlich, dass die Störungsrechnung für $k \rightarrow k_F$ versagt. In der Tat besitzt die Verteilungsfunktion in einer Dimension keine Unstetigkeit bei $k = k_F$ sondern nur eine Singularität. Dies zeigt an, dass es auch kein Quasiteilchengewicht gibt und die elementaren Anregungen eher durch kollektive Anregungen ausgedrückt werden sollten. Es gibt eine Formulierung mittels der sogenannten Bosonisierung der Fermionen, die diese Form der Anregungen beschreiben kann. Diese geht jedoch über das Ziel dieser Vorlesung hinaus. Eine wichtige Tatsache ist jedoch, dass in einer Dimension die Fermionen zerfallen und Ladungs- und Spin-Anregungen unabhängig betrachtet werden können (Spin-Ladungsseparation). Dies lässt sich auf einem Gitter mit ungefähr einem Elektron pro Gitterplatz (halbe Füllung) sehr gut zeigen, wenn wir davon ausgehen, dass die dominante Spinkorrelation antiferromagnetisch ist (wie wir später zeigen). Dann sind beide, Ladungsanregung und Spinanregung eine Art von Domänenwand, die sich mit verschiedenen Geschwindigkeiten bewegen.

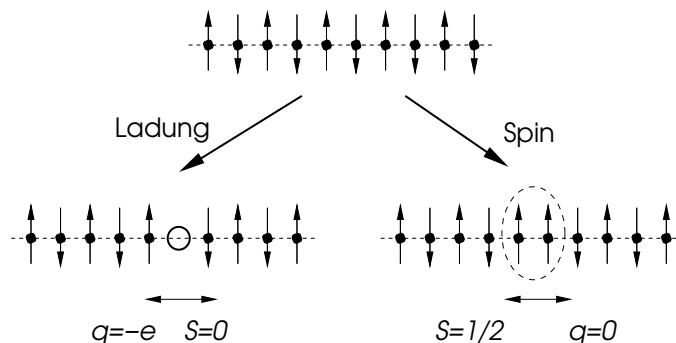


Abb. 4.5

Kapitel 5

Transport in Metallen

Die Fähigkeit elektrischen Strom zu transportieren ist eine der bemerkenswertesten und charakteristischen Eigenschaften von Metallen. Es gibt verschiedene Einflüsse, die die elektrische Leitfähigkeit eines Metalls bestimmen. Ein perfektes Metall ist bei $T = 0$ ein perfekter elektrischer Leiter. Aber Verunreinigungen sind verantwortlich dafür, dass ein *Restwiderstand* bestehen bleibt. Bei endlichen Temperaturen können Streuprozesse der Elektronen untereinander und zwischen Elektronen und Phononen zu einer T -abhängigen Leitfähigkeit führen. Elektronen spielen aber auch eine führende Rolle beim Wärmetransport in Metallen. Auch ein angelegtes Magnetfeld kann die Leitfähigkeit beeinflussen, was wir Magnetowiderstand nennen. Ferner gibt es den früher schon angesprochenen Hall-Effekt. In diesem Kapitel werden wir die Effekte des Magnetfeldes jedoch nicht betrachten.

5.1 Elektrische Leitfähigkeit

Elektrischer Strom tritt als Reaktion auf ein angelegtes elektrisches Feld auf. Dabei wird die Leitfähigkeit als lineare Antwort-Beziehung zwischen Feld und Strom definiert:

$$e\langle \vec{j}(\vec{q}, \omega) \rangle = \sigma(\vec{q}, \omega) \vec{E}(\vec{q}, \omega) \quad (5.1)$$

für ein homogenes Metall. Interessanterweise besteht eine Beziehung zwischen der Leitfähigkeit und der dynamischen Dielektrizitätsfunktion, die sich aus der Kontinuitätsgleichung ergibt.

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle + \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{j}(\vec{r}, t) \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle - \vec{q} \cdot \langle \vec{j}(\vec{q}, \omega) \rangle = 0 \quad (5.2)$$

Damit folgt

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{V_a(\vec{q}, \omega)} = \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{j}(\vec{q}, \omega) \rangle}{\omega V_a(\vec{q}, \omega)} = \frac{\sigma(\vec{q}, \omega) \vec{q} \cdot \vec{E}(\vec{q}, \omega)}{\omega e V_a(\vec{q}, \omega)} = \frac{\sigma(\vec{q}, \omega)}{\omega} \frac{\{-i\vec{q}^2 V_a(\vec{q}, \omega)\}}{e^2 V_a(\vec{q}, \omega)} \quad (5.3)$$

und

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\vec{q}, \omega) \quad (5.4)$$

Im Grenzfall langer Wellenlängen, $q \ll k_F$ gilt gemäss unserer früheren Diskussion:

$$\varepsilon(0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \Rightarrow \quad \sigma(\omega) = \frac{i\omega_p^2}{4\pi\omega} \quad (5.5)$$

Damit erscheint die Leitfähigkeit rein imaginär. Dies ist jedoch nicht der Fall, denn wir können den Realteil von $\sigma(\omega)$ aus den Kramers-Kronig-Beziehungen herleiten: $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$.

$$\sigma_1(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega'} \sigma_2(\omega') \quad \text{und} \quad \sigma_2(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega'} \sigma_1(\omega') \quad (5.6)$$

Eine einfache Rechnung ergibt nun:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4} \delta(\omega), \quad \sigma_2(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi\omega} \quad (5.7)$$

Offensichtlich ist dieses Metall eine perfekter Leiter mit einer unendliche Leitfähigkeit bei $\omega = 0$. Innerhalb dieser Betrachtungen findet sich kein Platz für Dissipation, da wir nur Gleichgewichtszustände betrachtet haben.

Es ist interessant zu sehen, dass es eine Summenregel gibt, die sogenannte f -Summenregel:

$$\int_0^\infty d\omega' \sigma_1(\omega') = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \sigma_1(\omega') = \frac{\omega_p^2}{8} = \frac{\pi e^2 n}{2m} \quad (5.8)$$

Diese Summenregel gilt für alle elektronischen Systemem, in denen Ladungen durch äussere Felder bewegt werden können (selbst für Halbleiter).

5.2 Transport-Gleichungen und Relaxationszeit

5.2.1 Boltzmann-Gleichung

Um das Problem der endlichen Leitfähigkeit anzugehen, eignet sich eine Formulierung analog zur Fermiflüssigkeitstheorie, basierend auf der Verteilungsfunktion der Quasiteilchen. Diese werden in der Transport-Theorie die Abweichung vom Gleichgewichtszustand beschreiben, der durch Relaxation nach einiger Zeit erreicht wird, wenn das System nicht von aussen beeinflusst wird. Wir führen die Verteilungsfunktion $f(\vec{k}, \sigma; \vec{r}, t)$ ein, wobei

$$f(\vec{k}, \sigma; \vec{r}, t) d^3r \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (5.9)$$

die Zahl der Teilchen in einem infinitesimalen Phasenraumelement an der Position (\vec{k}, \vec{r}) mit Spin σ zur Zeit t bestimmt (wir werden im Folgenden den Spin vernachlässigen). Die Gesamtzahl der Teilchen ist folglich

$$N = \int f(\vec{k}, \sigma; \vec{r}, t) d^3r \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (5.10)$$

Damit eine solche Beschreibung Sinn macht, muss sowohl die räumliche als auch die zeitliche Variation langsam sein, $q \ll k_F$ und $\hbar\omega \ll \epsilon_F$.

Die Gleichgewichtsverteilung für Quasiteilchen ist gegeben durch

$$f_0(\vec{k}, \vec{r}, t) = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)/k_B T} + 1} \quad (5.11)$$

d.h. die Fermi-Dirac-Verteilung, unabhängig von der räumlichen Position und der Zeit. Die Abweichung

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) - f_0(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad (5.12)$$

soll klein sein. Die Verteilungsfunktion erfüllt die *Boltzmann-Gleichung*:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \dot{\vec{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoss}} \quad (5.13)$$

wobei die linke Seite eine substantielle Ableitung im Phasenraum darstellt (zeitliche Ableitung im Phasenraum, wenn wir uns mit dem Volumenelement im Phasenraum mitbewegen). Die rechte Seite heisst Stossintegral und gibt die Rate der Änderung von f durch Stösse an. Die zeitlichen Ableitungen von \vec{r} und \vec{k} betrachten wir vom quasiklassischen Standpunkt:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \quad \text{und} \quad \hbar \dot{\vec{k}} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (5.14)$$

d.h. die Kraft, die uns vorallem interessiert, wird durch das elektrische und magnetische Feld erzeugt. Wir werden jedoch nur den Fall $\vec{B} = 0$ betrachten.

Wir wenden uns dem Stossintegral zu. Hier spielt die Wahrscheinlichkeit $W(\vec{k}, \vec{k}')$ für die Streuung eines Quasiteilchens vom Wellenvektor \vec{k} zu \vec{k}' eine wichtige Rolle. Falls das System zeitumkehr-invariant ist, dann gilt: $W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k})$, d.h. der umgekehrte Streuprozess hat die gleiche Wahrscheinlichkeit. Betrachten wir einfache Streuprozesse an statischen Potentialen, dann gilt:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoss}} &= - \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \left[W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}, \vec{r}, t) \{1 - f(\vec{k}', \vec{r}, t)\} \right. \\ &\quad \left. - W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}', \vec{r}, t) \{1 - f(\vec{k}, \vec{r}, t)\} \right] \end{aligned} \quad (5.15)$$

Der erste Term beschreibt den Prozess, dass ein Quasiteilchen mit \vec{k} nach \vec{k}' gestreut wird. Dies kann nur geschehen, wenn ein Teilchen bei \vec{k} vorhanden ist und es kein Teilchen bei \vec{k}' gibt (Spin erhalten). Dieser Prozess zählt negativ, da die Zahl der Quasiteilchen mit \vec{k} im gegebenen Phasenraumelement verringert wird. Der zweite Term beschreibt gerade den umgekehrten Prozess und erhöht folglich die Teilchenzahl im Phasenraumelement. Aufgrund der Zeitumkehrinvarianz können wir die beiden Terme zusammenziehen:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoss}} = \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} W(\vec{k}, \vec{k}') \left\{ f(\vec{k}', \vec{r}, t) - f(\vec{k}, \vec{r}, t) \right\} \quad (5.16)$$

Damit ist die Boltzmann-Gleichung eine relativ komplizierte Integro-Differential-Gleichung. Falls die Abweichung vom Nichtgleichgewichtszustand gering ist, können wir das Stossintegral approximieren. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die Quasiteilchen-Energie $\epsilon_{\vec{k}}$ isotrop ist und die Streuprozesse auch nur vom Relativwinkel zwischen \vec{k} und \vec{k}' abhängen und elastisch sind. Dann setzen wir an

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoss}} = - \frac{f(\vec{k}, \vec{r}, t) - f_0(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\tau(\epsilon_{\vec{k}})} \quad (5.17)$$

Dabei ist $f_0(\vec{k}, \vec{r}, t)$ eine lokale Gleichgewichtsverteilungsfunktion wie in (5.11) aber im Allgemeinen mit orts- und zeitabhängigem chemischen Potential und Temperatur, $\mu = \mu(\vec{r}, t)$ und $T = T(\vec{r}, t)$, wobei beide langsam variieren. $\tau(\epsilon_{\vec{k}})$ ist die sogenannte Relaxationszeit (charakteristische Zeit um im ungezwungenen System zum Gleichgewichtszustand zu relaxieren). Man nennt diese Form *Relaxationszeit-Näherung*.

Wir betrachten die Situation mit einem uniformen oszillierenden elektrischen Feld $\vec{E}(t) = \vec{E} e^{-i\omega t}$. Die Temperatur ist konstant. In der Relaxationszeit-Näherung finden wir, dass

$$\delta f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t) - f_0(\vec{k}, \vec{r}, t) = \delta f(\vec{k}) e^{-i\omega t} \quad (5.18)$$

Wir schreiben die Boltzmann-Gleichung für $f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f_0(\vec{k}, \vec{r}, t) + \delta f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ und setzen an, dass $f_0(\vec{k}, \vec{r}, t) = f_0(\vec{k})$. Dann folgt durch Einsetzen in (5.13)

$$-i\omega \delta f(\vec{k}) + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = - \frac{\delta f(\vec{k})}{\tau(\epsilon_{\vec{k}})} \quad (5.19)$$

wobei wir hier die lineare Näherung gemacht haben, d.h. wir betrachten $\delta f(\vec{k})$ als Entwicklung in $|\vec{E}|$, die wir nach der ersten Ordnung abbrechen. Damit ist $\delta f(\vec{k}) \propto |\vec{E}|$:

$$\delta f(\vec{k}) = - \frac{e\tau \vec{E}}{\hbar(1 - i\omega\tau)} \cdot \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = - \frac{e\tau \vec{E}}{\hbar(1 - i\omega\tau)} \cdot \frac{\partial f_0(\epsilon)}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \quad (5.20)$$

Daraus lässt sich nun der Quasiteilchenstrom berechnen:

$$\begin{aligned}\vec{j}(t) &= 2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{v}_{\vec{k}} f(\vec{k}, t) = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int d^3k \frac{\tau(\epsilon_{\vec{k}})(\vec{E} \cdot \vec{v}) \vec{v}}{1 - i\omega\tau(\epsilon_{\vec{k}})} \frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} e^{-i\omega t} \\ \Rightarrow j_\alpha(t) &= \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\omega) E_\beta e^{-i\omega t}\end{aligned}\tag{5.21}$$

wobei

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int d\epsilon \frac{\partial f_0(\epsilon)}{\partial \epsilon} \frac{\tau(\epsilon)}{1 - i\omega\tau(\epsilon)} \int d\Omega_{\vec{k}} k^2 \frac{v_\alpha \vec{k} v_\beta \vec{k}}{\hbar |\vec{v}_{\vec{k}}|}.\tag{5.22}$$

Dies entspricht dem Ohm'schen Gesetz mit $\sigma_{\alpha\beta}$ als Leitfähigkeitstensor. Beachte, dass $\sigma_{\alpha\beta}$ diagonal ist, falls das System isotrop ist.

5.2.2 Drude-Form

Im Fall $\omega\tau \gg 1$ fällt die Relaxationszeit aus (5.22) heraus und wir erhalten für ein isotropes System ($T \ll T_F$):

$$\sigma(\omega) \approx i \frac{e^2 m v_F}{4\pi^3 \hbar^3 \omega} \int d\Omega_{\vec{k}} v_{Fz}^2 = i \frac{e^2 n}{m\omega} = i \frac{\omega_p^2}{4\pi\omega}\tag{5.23}$$

wie wir bereits in Gleichung (5.5) gefunden hatten. Dies bedeutet jedoch nicht, dass wir hier einen perfekten Leiter haben.

Andererseits sind wir eher am statischen Limit interessiert, die uns die dc-Leitfähigkeit ($\omega = 0$) definiert.

$$\sigma = -\frac{e^2 n}{m} \int d\epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \tau(\epsilon) = \frac{e^2 n \bar{\tau}}{m} = \frac{\omega_p^2 \bar{\tau}}{4\pi}\tag{5.24}$$

Dies ist die bekannte Drude-Form der Leitfähigkeit.¹ Falls τ nur schwach von der Energie abhängt können wir auch die ω -Abhängigkeit einfach mitnehmen und erhalten so die optische Leitfähigkeit:

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \frac{\bar{\tau}}{1 - i\omega\bar{\tau}} = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \left\{ \frac{\bar{\tau}}{1 + \omega^2 \bar{\tau}^2} + \frac{i\bar{\tau}^2 \omega}{1 + \omega^2 \bar{\tau}^2} \right\} = \sigma_1 + i\sigma_2\tag{5.25}$$

Damit finden wir auch für die Dielektrizitätsfunktion

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \bar{\tau}}{\omega(i + \omega\bar{\tau})}.\tag{5.26}$$

Diese Grösse kann nun benutzt werden, um optische Eigenschaften eines Metalls zu diskutieren. Der komplexe Brechungsindex ist gegeben durch $N^2 = (n + ik)^2 = \varepsilon$. Wir können drei wesentliche Frequenzbereiche unterscheiden.

Relaxationsfreier Bereich ($\omega\bar{\tau} \ll 1 \ll \omega_p\bar{\tau}$): Hier finden wir

$$\varepsilon_1(\omega) \approx -\omega_p^2 \bar{\tau}^2 \quad \text{und} \quad \varepsilon_2(\omega) \approx \frac{\omega_p^2 \bar{\tau}}{\omega}\tag{5.27}$$

Der Realteil ist konstant und negativ, während der Imaginärteil für $\omega \rightarrow 0$ singularär und dominant ist. Es folgt

$$n(\omega) \approx k(\omega) \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_2(\omega)}{2}} \approx \sqrt{\frac{\omega_p^2 \bar{\tau}}{2\omega}}\tag{5.28}$$

¹Beachte, dass die Drude-Theorie des Elektrontransportes sich aus rein klassischen Betrachtungen als phänomenologische Theorie herleiten lässt.

Der Brechungsindex $n(\omega) \gg 1$ zeigt an, dass die Reflektivität R praktisch 100 % ist, denn

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (5.29)$$

Der Absorptionsindex $k(\omega)$ gibt die Eindringtiefe an

$$\delta(\omega) = \frac{c}{\omega k(\omega)} \approx \frac{c}{\omega_p} \sqrt{\frac{2}{\omega \bar{\tau}}}, \quad (5.30)$$

die viel grösser als die Debye-Länge c/ω_p ($\sim 10^{-6}$ cm für $\hbar\omega_p = 10$ eV) ist. Diese Eindringtiefe liegt im cm-Bereich für Frequenzen von 10 - 100 Hz. Beachte, dass in Abb.5.1 eine logarithmische Skala für ω verwendet wird, um dieses Verhalten der Eindringtiefe bei sehr kleinen Frequenzen sichtbar zu machen.

Relaxierender Bereich ($1 \ll \omega \bar{\tau} \ll \omega_p \bar{\tau}$): Wir können in $(\omega \bar{\tau})^{-1}$ entwickeln und erhalten:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} + i \frac{\omega_p^2}{\omega^3 \bar{\tau}}. \quad (5.31)$$

Der Realteil $\varepsilon_1 \approx -\omega_p^2/\omega^2$ ist immer noch negativ. Für die optischen Eigenschaften gilt nun:

$$k(\omega) \approx \frac{\omega_p}{\omega} \quad \text{und} \quad n(\omega) \approx \frac{\omega_p}{2\omega^2 \bar{\tau}} \quad (5.32)$$

Es gilt $k(\omega) \gg n(\omega) \gg 1$, so dass das Metall auch in diesem Frequenzbereich stark reflektierend ist, wozu auch der sichtbare optische Bereich gehört. Die Eindringtiefe ist nur noch schwach frequenzabhängig und ungefähr gleich der Debye-Länge c/ω_p .

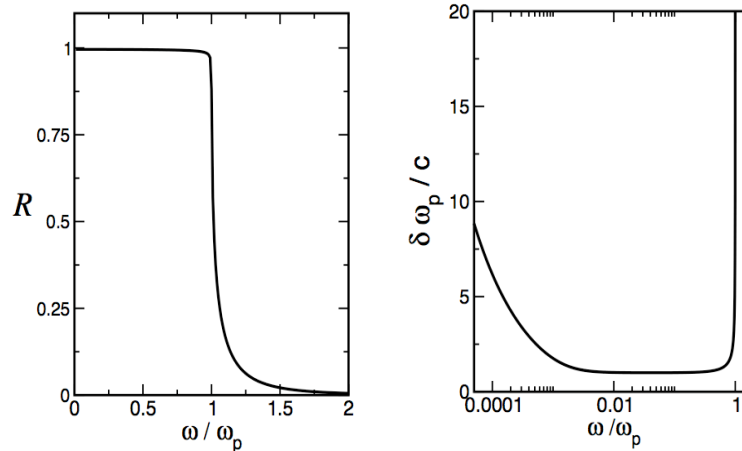


Abb. 5.1: Parameterwahl $\omega_p \bar{\tau} = 500$.

Ultraviolett-Bereich ($\omega \approx \omega_p$ und $\omega > \omega_p$): In diesem Bereich ist der Imaginärteil praktisch Null und der Realteil hat die bekannte Form

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (5.33)$$

so dass die Reflektivität sich drastisch verändert, von 1 zu fast 0 (Abb.5.1) Das Metall ist im Wesentlichen transparent für $\omega > \omega_p$. In Abb.5.1 sehen wir, wie auch die Eindringtiefe sehr schnell ansteigt und damit die Transparenz des Metalls anzeigt.

Wir haben hier Beiträge der Ionenrümpfe zur Dielektrizitätsfunktion vernachlässigt, die die Reflektionseigenschaften von Metallen auch beeinflussen. Insbesondere wird die Grenzfrequenz ω_p nach unten verschoben, $\omega'_p = \omega_p/\sqrt{\varepsilon_\infty}$, wobei ε_∞ der frequenzunabhängige Anteil der Dielektrizitätsfunktion der Ionen ist. Damit strebt die Reflektivität für Frequenzen oberhalb ω'_p gegen $R = (\varepsilon_\infty - 1)^2/(\varepsilon_\infty + 1)^2$, so dass $0 < R < 1$ ist.

5.2.3 Relaxationszeit

Mit Hilfe der Näherungslösung der Boltzmann-Gleichung, (5.20) untersuchen wir den Zusammenhang zwischen der Streurrate $W(\vec{k}, \vec{k}')$ und der Relaxationszeit τ . Es soll die Beziehung

$$\frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau(\epsilon_{\vec{k}})} = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W(\vec{k}, \vec{k}') \{f(\vec{k}) - f(\vec{k}')\} \quad (5.34)$$

gelten, wobei wir wiederum von einem isotropen System ausgehen und annehmen, dass die Streuung elastisch ist. Die Struktur der Lösung von (5.19) ist

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + A(k) \vec{k} \cdot \vec{E} \quad \Rightarrow \quad f(\vec{k}) - f(\vec{k}') = A(k) (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{E} . \quad (5.35)$$

Wir nehmen nun folgende Winkelparametrisierung vor ($\vec{k} \parallel z$):

$$\begin{aligned} \vec{k} \cdot \vec{E} &= kE \cos \theta , & \vec{k} \cdot \vec{k}' &= kk' \cos \theta' , \\ \vec{k}' \cdot \vec{E} &= k'E \{ \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \phi' \} . \end{aligned} \quad (5.36)$$

Mit $k = k'$ erhalten wir daraus:

$$f(\vec{k}) - f(\vec{k}') = A(k) kE [\cos \theta (1 - \cos \theta') - \sin \theta \sin \theta' \cos \phi'] . \quad (5.37)$$

In die rechte Seite von (5.34) eingesetzt führt dies dazu, dass der ϕ' -abhängige Teil in der Integration verschwindet falls wir ein isotropes System betrachten.

$$\begin{aligned} \int d\Omega_{\vec{k}'} [f(\vec{k}) - f(\vec{k}')] W(\vec{k}, \vec{k}') &= A(k) kE \cos \theta \int d\Omega_{\vec{k}'} (1 - \cos \theta') W(\vec{k}, \vec{k}') \\ &= [f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})] \int d\Omega_{\vec{k}'} (1 - \cos \theta') W(\vec{k}, \vec{k}') \end{aligned} \quad (5.38)$$

Damit können wir in (5.34) den Faktor $f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})$ auf beiden Seiten weglassen:

$$\frac{1}{\tau(\epsilon_{\vec{k}})} = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos \theta') \quad (5.39)$$

wobei zu beachten gilt $\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}'}$.

5.3 Streuung an Verunreinigungen

5.3.1 Potentialstreuung

Jede Abweichung des Kristalls von seiner perfekten Periodizität führt zu Streuung der Quasiteilchen. Durch solche Streuung verlieren die Quasiteilchen ihren ursprünglichen Impuls. Da die Translationsinvarianz nicht mehr gewährleistet ist, gibt es auch keine Impulserhaltung mehr. Die Energie hingegen bleibt erhalten. Als statische Streuzentren kommen Leerstellen, Versetzungen oder Fremdatome in Frage. Die Streurrate $W(\vec{k}, \vec{k}')$ für ein Potential \hat{V} kann durch die Goldene Regel bestimmt werden.²

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} n_{imp} |\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle|^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \quad (5.40)$$

Die Dichte der Verunreinigungen bezeichnen wir mit n_{imp} , wobei wir angenommen haben, dass alle identisch sind. Wir vernachlässigen hier Interferenzeffekte durch Streuung an mehreren Verunreinigungen, was bei kleinen Dichten eine vernünftige Näherung ist.

²Dies entspricht der ersten Born'schen Näherung in der Streutheorie. Beachte, dass diese Näherung nicht ausreicht, um resonante Streuung zu beschreiben.

Es folgt nach (5.39) für die Lebensdauer des Quasiteilchens mit Impuls $\hbar \vec{k}$, dass

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\epsilon)} &= \frac{2\pi}{\hbar} n_{imp} \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} |\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle|^2 (1 - \hat{k} \cdot \hat{k}') \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \\ &= n_{imp} (\hat{k} \cdot \vec{v}_{\vec{k}}) \int \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \hat{k} \cdot \hat{k}') \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi} \end{aligned} \quad (5.41)$$

wobei $d\sigma/d\Omega$ der differentielle Wirkungsquerschnitt ist und $\hat{k} = \vec{k}/|\vec{k}|$. Wir haben hier den Zusammenhang zwischen der Golden Regel und der Born'schen Näherung benutzt.³

Beachte, dass die Relaxationszeit τ nicht identisch ist mit der Lebensdauer $\tilde{\tau}$, wie sie aus der Goldenen Regel folgt:

$$\frac{1}{\tilde{\tau}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} W(\vec{k}, \vec{k}') \quad (5.44)$$

Die Integration mit dem Faktor $1 - \cos \theta'$ in (5.39) gibt der Rückstreuung ein grösseres Gewicht als der Vorwärtsstreuung, da letztere sich weniger "schädlich" auf den Transport auswirkt. Man nennt daher τ auch *Transport-Lebensdauer*.

Nehmen wir an, dass die Verunreinigungen Punktladungen Ze entsprechen, deren Potential im Metall abgeschirmt ist. Daraus folgt

$$\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle = \frac{4\pi Z e^2}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + k_{TF}^2} . \quad (5.45)$$

Im Falle, dass $k_{TF} \gg k_F$ (sehr starke Abschirmung) wird der differentielle Wirkungsquerschnitt unabhängig von der Ablenkung - man spricht im Sinne der Partialwellenzerlegung von s -Wellenstreuung, d.h. $\delta_{l>0} \rightarrow 0$ - wird die Transport- und gewöhnliche Lebensdauer identisch: $\tau = \tilde{\tau}$.

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} \approx \frac{\pi}{\hbar} N(\epsilon_F) n_{imp} \left(\frac{4\pi Z e^2}{k_{TF}^2} \right)^2 . \quad (5.46)$$

Wir bestimmen nun die Leitfähigkeit für die Streuung an Verunreinigungen unter der Annahme, dass nur s -Wellenstreuung eine Rolle spielt. Dann ist $\tau(\epsilon)$ nur schwach von der Energie abhängig. Folglich ergibt sich aus (5.24)

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau(\epsilon_F)}{m} \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{e^2 n \tau(\epsilon_F)} \quad (5.47)$$

wobei ρ der spezifische Widerstand ist. Beide sind konstant als Funktion der Temperatur. Man nennt diesen Beitrag den *Restwiderstand* eines Metalls, der gegen Null strebt, wenn das Material perfekt ist. Temperaturabhängigkeit des Widerstandes hat seinen Ursprung in anderen Streumechanismen wie der Elektron-Phonon-Streuung oder Elektron-Elektron-Streuung, die wir später behandeln werden. Oft wird zur Angabe der Qualität eines Materials der sogenannte RRR angegeben, der residual resistance ratio, der sich definiert als $RRR = R(T = 300K)/R(T = 0)$, d.h. das Verhältnis zwischen dem Widerstand bei Null- und Raumtemperatur. Je grösser dieser ist, desto besser ist die Materialqualität des Metalls.

³Die Streuung von Teilchen mit Impuls $\hbar \vec{k}$ in den Raumwinkel $d\Omega_{\vec{k}'}$, um \vec{k}' herum ergibt

$$\begin{aligned} W(\vec{k}, \vec{k}') d\Omega_{\vec{k}'} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}' \in d\Omega_{\vec{k}'}} |\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle|^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} d\Omega_{\vec{k}'} \int_{\vec{k}' \in d\Omega_{\vec{k}'}} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} |\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle|^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) = \frac{2\pi}{\hbar} d\Omega_{\vec{k}'} N(\epsilon) |\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (5.42)$$

Der Übergang per einfallendem Teilchenstrom j_{ein} ergibt dann den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$j_{ein} d\sigma(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}, \vec{k}') d\Omega_{\vec{k}'}, \quad \Rightarrow \quad \hat{k} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N(\epsilon)}{4\pi} |\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle|^2 . \quad (5.43)$$

Daraus folgt (5.41).

5.3.2 Resonante Streuung - Kondo-Effekt

Es gibt auch Fremdatome, die zu resonanter Streuung führen. Falls die Resonanzenergie nahe bei der Fermienergie liegt, dann wird die Streurrate eine starke Energieabhängigkeit zeigen und folglich der erzeugte elektrische Widerstand eine stärkere Temperaturabhängigkeit haben. Ein wichtiges Beispiel ist die Streuung an magnetischen Verunreinigungen, die einen Spinfreiheitsgrad besitzen. In diesem Fall führt der interne Freiheitsgrad zu einer dramatischen Energieabhängigkeit für die Streurrate. Dieses Problem wurde zu ersten Mal von Kondo 1964 untersucht, der damit eine Erklärung des Problems des Widerstandsminimums in gewissen Materialien gab. Die Kopplung zwischen dem lokalen Spin \vec{S} des Fremdatoms und den Quasiteilchenspins \vec{s} hat folgende einfache Austauschform:

$$\begin{aligned}
\widehat{V}_K &= \sum_i \widehat{V}_{Ki} = J \sum_i \widehat{\vec{S}}_i \cdot \widehat{\vec{s}}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \\
&= J \sum_i \left\{ \widehat{S}_i^z \widehat{s}^z(\vec{r}) + \frac{1}{2} \widehat{S}_i^+ \widehat{s}^-(\vec{r}) + \frac{1}{2} \widehat{S}_i^- \widehat{s}^+(\vec{r}) \right\} \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \\
&= \frac{J\hbar}{2\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', i} \left[\widehat{S}_i^z (\widehat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \widehat{c}_{\vec{k}'\uparrow} - \widehat{c}_{\vec{k}\downarrow}^\dagger \widehat{c}_{\vec{k}'\downarrow}) + S_i^+ \widehat{c}_{\vec{k}\downarrow}^\dagger \widehat{c}_{\vec{k}'\uparrow} + S_i^- \widehat{c}_{\vec{k}\uparrow} \widehat{c}_{\vec{k}'\downarrow} \right] e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_i}
\end{aligned} \tag{5.48}$$

für lokale Spin \vec{S}_i bei \vec{R}_i . Wichtig ist hier, dass auch sogenannte Spinflip-Prozesse möglich sind, bei denen der Spinzustand des gestreuten Elektrons und des Fremdatoms geändert wird.

Wir berechnen die Streurrate hier nicht, sondern geben nur das Resultat an:

$$\begin{aligned}
W(\vec{k}, \vec{k}') &\approx J^2 S(S+1) \left\{ 1 + 2JN(\epsilon_F) \ln \frac{D}{|\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F|} + \dots \right\} \\
\Rightarrow \frac{1}{\tau(\epsilon)} &\approx \frac{J^2 S(S+1)}{\hbar} N(\epsilon) \left\{ 1 + 2JN(\epsilon_F) \ln \frac{D}{|\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F|} \right\}
\end{aligned} \tag{5.49}$$

wobei wir annehmen, dass $JN(\epsilon_F) \ll 1$ (D : Bandbreite). Beachte, dass $W(\vec{k}, \vec{k}')$ winkelnabhängig ist (s-Wellengstreuung). Die Energieabhängigkeit ist an der Fermienergie singularär. Dies deutet darauf hin, dass dies kein gewöhnlicher Effekt resonanter Potentialstreuung ist, sondern ein viel subtilerer Vielteilchen-Effekt, der die Elektronen an der Fermifläche involviert. Die Tatsache, dass bei einem Streuprozess der lokale Spin umgedreht werden kann, macht das Streuzentrum dynamisch. Das heisst, dass sich das Streuzentrum ständig ändert und ein Streuprozess eines Elektrons von den vorhergehenden Streuprozessen beeinflusst wird. Die Singularität der Streurrate bei ϵ_F ist die Konsequenz davon. Offensichtlich kann dies nicht auf dem Niveau erster Born'scher Näherung beschrieben werden, sondern benötigt mindestens zweite Born'sche Näherung oder die volle Lösung. Wir verweisen hier auf die Literatur: J.M. Ziman: Prinzipien der Festkörpertheorie; A.C. Hewson: The Kondo Problem to Heavy Fermions.

Das resonante Verhalten bedeutet, dass wir eine starke Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit erhalten, denn

$$\begin{aligned}
\sigma(T) &= \frac{e^2 k_F^3}{6\pi^2 m} \int d\epsilon \frac{1}{4k_B T \cosh^2(\epsilon - \epsilon_F)/2k_B T} \tau(\epsilon) \\
&\approx \frac{e^2 n}{8mk_B T} \int d\tilde{\epsilon} \frac{J^2 S(S+1) \{1 - 2JN(\epsilon_F) \ln(D/\tilde{\epsilon})\}}{\cosh^2(\tilde{\epsilon}/2k_B T)}
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Durch einfache Substitution im Integral folgt:

$$\sigma(T) \approx \frac{e^2 n}{2m} J^2 S(S+1) \left\{ 1 - 2JN(\epsilon_F) \ln \frac{D}{k_B T} \right\} \tag{5.51}$$

Der bei kleinen Temperaturen stark ansteigende Anteil des Widerstandes führt jedoch zu einem Minimum im Widerstand, da bei hohen Temperaturen der Widerstand normalerweise mit sinkendem T abnimmt, wie etwa durch die Streuung an Gitterschwingungen.

Offensichtlich wird die Leitfähigkeit für kleine Temperaturen unterdrückt. Innerhalb unserer Näherung würde die Leitfähigkeit sogar negativ. Dies ist jedoch ein Problem der Näherung. In der Realität saturiert die Leitfähigkeit bei einem endlichen Wert. Es findet ein Crossover statt bei einer charakteristischen Temperatur (Kondo-Temperatur)

$$k_B T_K = D e^{-1/JN(\epsilon_F)}, \quad (5.52)$$

die eine charakteristische Energieskala dieses Systems darstellt. Das wirkliche Verhalten bei Temperaturen $T \ll T_K$ ist nicht durch einfach Störungsrechnung beschreibbar. Dies ist als das Kondo-Problem bekannt und stellt einen der interessantesten Korrelationseffekte in der Vielteilchenphysik dar.

5.4 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Selbst in perfekten Metallen ist die Leitfähigkeit bei endlichen Temperaturen endlich. Die thermisch induzierten Gitterverzerrungen bilden fluktuierende Streuzentren. In der Sprache der Elektron-Phonon-Wechselwirkung werden die Elektronen durch Absorption oder Emission von Phononen gestreut. Die relevante Kopplung geschieht durch die longitudinalen Phononen, die lokale Volumenfluktuationen hervorrufen, wie wir dies in Kapitel 3 gesehen hatten. Der entsprechende Kopplungsterm hat die folgende Form:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{ep} &= i \sum_{\vec{k}, \vec{q}, s} \tilde{V}_{\vec{q}} \vec{q} \cdot \left\{ \hat{u}_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},s} - \hat{u}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},s} \right\} \\ &= 2i \sum_{\vec{k}, \vec{q}, s} \tilde{V}_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_0\omega_{\vec{q}}}} |\vec{q}| (\hat{b}_{\vec{q}} - \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},s} \end{aligned} \quad (5.53)$$

Diese Wechselwirkung beschreibt also Streuprozesse, ähnlich wie sie auch für die Wechselwirkung zwischen Elektronen und elektromagnetischer Strahlung (Photonen) kennen. Die wichtigsten Prozesse entsprechen den "Ein-Phonon"-Prozessen, wobei ein Elektron ein Phonon absorbiert oder emittiert und so seine Richtung ändert. Die Kinematik erfordert, dass die Energie und der Impuls erhalten bleiben. Es gilt daher für den Streuprozess, bei dem ein Elektron mit \vec{k} durch Abgabe eines Phonons mit \vec{q} in den Zustand mit \vec{k}' übergeht:

$$\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q} + \vec{G} \quad \text{und} \quad \epsilon_{\vec{k}} = \hbar\omega_{\vec{q}} + \epsilon_{\vec{k}'} \quad (5.54)$$

wobei \vec{G} ein reziproker Gittervektor ist. Dies schränkt den Phasenraum speziell für Elektronenergien sehr nahe an der Fermienergie stark ein. Beachte, dass $\hbar\omega_{\vec{q}} \leq \hbar\omega_D \ll \epsilon_F$.

Zur Berechnung der Streuraten benötigen wir die Matrixelemente der möglichen Prozesse:⁴

$$\begin{aligned} &\langle \vec{k} + \vec{q}; N_{\vec{q}'} | (\hat{b}_{\vec{q}} - \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},s} | \vec{k}; N_{\vec{q}'} \rangle \\ &= \langle \vec{k} + \vec{q} | \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},s} | \vec{k} \rangle \left\{ \sqrt{N_{\vec{q}'}} \delta_{N_{\vec{q}'}, N_{\vec{q}'}-1} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} - \sqrt{N_{\vec{q}'} + 1} \delta_{N_{\vec{q}'}, N_{\vec{q}'}+1} \delta_{\vec{q}, -\vec{q}'} \right\} \end{aligned} \quad (5.55)$$

⁴Beachte, dass es ganz analog zur Diskussion der elektromagnetischen Strahlung hier auch aufgrund der Nullpunktsfluktuationen der Phononen das Phänomen der *spontanen Phonon-Emission* gibt. Dies ist formal erkennbar in der zusätzlichen "1" in den Faktoren $(1 + N_{\pm \vec{q}})$.

Aus der Goldenen Regel ergibt sich dann

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoss}} &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} |g(\vec{q})|^2 \left[\left\{ f(\vec{k}) \left(1 - f(\vec{k} + \vec{q})\right) \left(1 + N_{-\vec{q}}\right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - f(\vec{k} + \vec{q}) \left(1 - f(\vec{k})\right) N_{-\vec{q}} \right\} \delta(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} + \hbar\omega_{-\vec{q}}) \right. \\
&\quad \left. - \left\{ f(\vec{k} + \vec{q}) \left(1 - f(\vec{k})\right) \left(1 + N_{\vec{q}}\right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - f(\vec{k}) \left(1 - f(\vec{k} + \vec{q})\right) N_{\vec{q}} \right\} \delta(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}}) \right]
\end{aligned} \tag{5.56}$$

wobei $g(\vec{q}) = \tilde{V}_{\vec{q}} |\vec{q}| \sqrt{2\hbar/\rho_0\omega_{\vec{q}}}$. Die vier Terme beschreiben die vier Prozesse in Abb.5.2 .

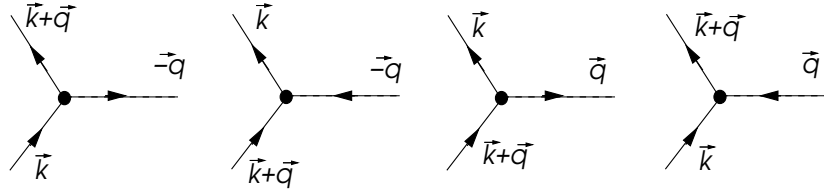


Abb. 5.2

Das Stossintegral führt auf eine komplizierte Integro-Differenzialgleichung, deren Lösung sehr mühsam ist. Anstelle der rigorosen Rechnung werden wir hier jetzt mit Hilfe einiger qualitativen Betrachtungen das Verhalten in verschiedenen Temperaturbereichen erklären.

Die charakteristische Temperatur der Phononen ist die Debye-Temperatur $\Theta_D \ll T_F$. Da die Phononenergie klein im Vergleich zur Fermienergie ist, fällt sie in der Energieerhaltung kaum ins Gewicht: $\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} \approx \epsilon_{\vec{k}}$. Daher können wir uns auf die Impulserhaltung konzentrieren und die Gitterdeformation als praktisch statisch betrachten, d.h. im Sinne der adiabatischen Näherung gemäss Born-Oppenheimer. Wir schreiben daher das Stossintegral näherungsweise als

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoss}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} |g(\vec{q})|^2 2N(\omega_{\vec{q}}) \underbrace{\left\{ f(\vec{k} + \vec{q}) \left(1 - f(\vec{k})\right) - f(\vec{k}) \left(1 - f(\vec{k} + \vec{q})\right) \right\}}_{f(\vec{k} + \vec{q}) - f(\vec{k})} \delta(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}) \tag{5.57}$$

wobei wir nun die Besetzungszahl der Phononen durch die Gleichgewichtsverteilung für Bosonen annehmen:

$$N(\omega_{\vec{q}}) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\vec{q}}/k_B T} - 1} . \tag{5.58}$$

Analog zu früher setzen wir den Relaxationsansatz an und erhalten

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\lambda}{N(\epsilon_F)} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \hbar\omega_{\vec{q}} N(\omega_{\vec{q}}) (1 - \cos\theta) \delta(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}) \tag{5.59}$$

wobei $|\vec{k}| = |\vec{k} + \vec{q}| = k_F$, d.h. die relevanten Elektronen liegen in der Nähe der Fermifläche. Ferner haben wir folgende Parameterisierung gemacht:

$$|g(\vec{q})|^2 = \frac{\lambda}{2N(\epsilon_F)\Omega} \hbar\omega_{\vec{q}} \tag{5.60}$$

wobei λ eine dimensionslose Elektron-Phonon-Kopplungskonstante ist, in Metallen gewöhnlich $\lambda < 1$. Damit folgt, dass analog zur Streuung an Verunreinigungen die Relaxationszeit nur schwach von der Energie der Elektronen abhängt. Es kommt jetzt jedoch eine direkte Temperaturabhängigkeit von den Phononen hinzu. Um das Integral über \vec{q} ausführen zu können, müssen wir zuerst $\delta(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})$ analysieren:

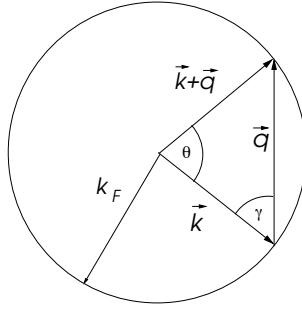


Abb. 5.3

$$\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}) = \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\{q^2 - 2k_F q \cos \gamma\}\right) = \frac{m}{\hbar^2 k_F q} \delta\left(\frac{q}{2k_F} - \cos \gamma\right) \quad (5.61)$$

Für die Beziehung zwischen γ und θ (Abb.5.3) gilt

$$2\gamma + \theta = \pi \quad \Rightarrow \quad 1 - \cos \theta = 1 + \cos(2\gamma) = 2 \cos^2 \gamma \quad (5.62)$$

Offensichtlich wird der Integrationsbereich für q : $0 \leq q \leq 2k_F$. Damit können wir den Integranden umformen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(T)} &= \frac{\lambda}{N(\epsilon_F)} \frac{m}{\hbar^2 \pi k_F} \int_0^{2k_F} dq q \omega_{\vec{q}} N(\omega_{\vec{q}}) \int d \cos \gamma \cos^2 \gamma \delta\left(\frac{q}{2k_F} - \cos \gamma\right) \\ &= \frac{\lambda}{4N(\epsilon_F)} \frac{m c_s}{\hbar^2 \pi k_F^3} \int_0^{2k_F} \frac{q^4 dq}{e^{\hbar c_s q / k_B T} - 1} = \frac{\lambda}{4N(\epsilon_F)} \frac{m c_s k_F^2}{\hbar^2 \pi} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^5 \int_0^{2\Theta_D/T} \frac{y^4 dy}{e^y - 1} \end{aligned} \quad (5.63)$$

wobei wir die Näherung $k_B \Theta_D \approx 2\hbar c_s k_F$ für die Debye-Temperatur gemacht haben. Diese Form hat offensichtlich zwei charakteristische Temperaturbereiche:

$$\frac{1}{\tau} = \begin{cases} 6\zeta(5) \lambda \pi \frac{k_B \Theta_D}{\hbar} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^5 & T \ll \Theta_D \\ \lambda \pi \frac{k_B \Theta_D}{\hbar} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right) & T \gg \Theta_D \end{cases} \quad (5.64)$$

Die Vorfaktoren hängen von den Details unserer Näherung ab, nicht aber die qualitative Temperaturabhängigkeit. Die Leitfähigkeit und den spezifische Widerstand erhalten wir nun aus (5.22):

$$\sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau(T) \quad \text{und} \quad \rho = \frac{m}{e^2 n} \frac{1}{\tau(T)} \quad (5.65)$$

Damit erhalten wir die bekannte Bloch-Grüneisen-Form:

$$\rho(T) \propto \begin{cases} T^5 & T \ll \Theta_D \\ T & T \gg \Theta_D \end{cases} \quad (5.66)$$

Der Hochtemperaturbereich ist alleine durch die Besetzungszahl der Phononen bestimmt, während im Niedertemperaturbereich die Einschränkung des Streuphasenraums eine wichtige Rolle spielen.

5.5 Elektron-Elektron-Streuung

Wir haben im Kapitel 4 gesehen, dass die Lebensdauer eines Quasiteilchens unter Berücksichtigung von kurzreichweitiger Elektron-Elektron-Wechselwirkung in der Nähe der Fermienergie stark zunimmt. Der Grund lag im eingeschränkten Streuphasenraum aufgrund des Pauli-Prinzips. Die

Lebensdauer, die wir hier mit der Relaxationszeit identifizieren, hat im Wesentlichen die Form

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = C(\epsilon - \epsilon_F)^2 \quad (5.67)$$

Damit können wir die Leitfähigkeit aus (5.22) bestimmen

$$\sigma(T) = \frac{e^2 n}{mC(k_B T)^2} \quad (5.68)$$

und der spezifische Widerstand, $\rho \propto T^2$. Dies ist eine Schlüssel-Eigenschaft einer Fermiflüssigkeit und wird oft als identifizierendes Kriterium verwendet.

Ein wichtiger Punkt bedarf jedoch hier etwas Erklärung. Man könnte eigentlich folgendermassen argumentieren. Bei Stößen zwischen Elektronen bleibt der Impuls einer Fermiflüssigkeit erhalten. Wie kommt dann der Widerstand zustande? Dieses Argument lässt das Gitter ausser Acht. Die Kinematik ist auch erfüllt, wenn Elektronen von der Fermifläche in einer Brillouin-Zone auf diejenige einer benachbarten Brillouin-Zone gestreut werden, indem ein reziproker Gittervektor miteinbezogen wird. Dadurch geht Impuls an das Gitter über. Solche Prozesse nennt man *Umklapp-Prozesse*. Diese Streuprozesse spielen auch bei der Elektron-Phonon-Streuung eine wichtige Rolle.

5.6 Matthiessen'sche Regel und der Ioffe-Regel-Limit

Matthiessens Regel besagt, dass sich Streuraten verschiedener Streuprozesse einfach addieren:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W_1(\vec{k}, \vec{k}') + W_2(\vec{k}, \vec{k}') \quad (5.69)$$

oder analog in der Relaxationszeitnäherung:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{m}{ne^2\tau} = \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \right) = \rho_1 + \rho_2. \quad (5.70)$$

Dies ist eine "Regel" und kein Theorem. Sie entspricht effektiv einer Anordnung von in Serie geschalteten Widerständen. Sie ist nur anwendbar, wenn sich die beiden Streuprozesse nicht gegenseitig beeinflussen. Nur schon die Tatsache, dass die Streuraten von Verunreinigungen linear von deren Dichte n_{imp} abhängt, ist in diesem Sinne verknüpft mit der Matthiessen'schen Regel. Falls sich die Verunreinigungen gegenseitig beeinflussen, etwa durch Interferenzeffekte indem ein Teilchen kohärent an mehreren Verunreinigungen gestreut wird, würde diese Vereinfachung ungültig machen. Dies kann man sehr eindrücklich in einer Dimension sehen, wo jedes Hindernis einen endlichen Widerstand R erzeugt. Zwei hintereinander liegende Hindernisse ergeben den gemeinsamen Widerstand:

$$R = R_1 + R_2 + \frac{2e^2}{h} R_1 R_2 \geq R_1 + R_2 \quad (5.71)$$

Im eindimensionalen System kommt es durch die Überlagerung der rückgestreuten Wellen Interferenzeffekte, die unweigerlich beide Hindernisse miteinander verbindet. Zudem muss jedes Teilchen, das das System traversiert alle Hindernisse überwinden.

Es gilt jedoch eine etwas erweiterte Matthiessen'sche Regel, nämlich

$$\rho \geq \rho_1 + \rho_2 \quad (5.72)$$

Wir nehmen jedoch oft an, dass die Matthiessen'sche Regel anwendbar ist, wenn wir Widerstandsdaten von einfachen Metallen analysieren. Zum Beispiel kommt das Widerstandsminimum, das Kondo erklärt hat, durch die Addition verschiedener Beiträge zustande:

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_{e-p}(T) + \rho_K(T) + \rho_{e-e}(T) = \rho_0 + CT^5 + C'(1 + 2JN(\epsilon_F)\ln(D/k_B T)) + AT^2 \quad (5.73)$$

Der Kondoterm steigt an, während der Teil der Elektron-Phonon- und Elektron-Elektron-Streuung abnimmt. Folglich gibt es ein Minimum. Schwierigkeiten treten mit der Mathiessen'schen Regel auf, wenn etwa die Relaxationszeiten von \vec{k} abhängen, da dann die Mittelungen nicht für alle Streuprozesse gleich ausfällt. Die Elektron-Phonon-Kopplung kann von der Streuung an Verunreinigungen modifiziert werden, insbesondere, wenn anisotrope Fermiflächen vorhanden sind.

Der elektrische Widerstand steigt mit der Temperatur und würde beliebig gross, wenn wir den vorhergehenden Betrachtungen unbeschränkt vertrauen. Es zeigt sich jedoch, dass in den meisten Fällen der Widerstand bei hohen Temperaturen gegen einen endlichen Grenzwert strebt. Dies ergibt sich aus einer einfachen Überlegung zur mittleren freien Weglänge, die wir als $\ell = v_F \tau(\epsilon_F)$ definieren. Dies ist die mittlere Strecke, die ein Elektron zwischen zwei Stössen sich frei bewegen kann. Im Kristallgitter gibt es eine natürlich untere Grenze dafür. Dies ist die Gitterkonstante a . Ferner gilt es zu bedenken, dass unsere bisherigen Betrachtungen darauf beruhen, dass die Stösse zwischen zwei Zuständen mit klarem Impuls stattfinden ($\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$). Falls die de Broglie-Wellenlänge vergleichbar mit der mittleren freien Weglänge wird, gilt dieses Bild nicht mehr, d.h. $k_F \ell \sim 1$ stellt eine Grenze dar.

Empirisch wird für der spezifische Widerstand durch folgende Formel beschrieben,

$$\frac{1}{\rho(T)} = \frac{1}{\rho_{BT}(T)} + \frac{1}{\rho_{max}}, \quad (5.74)$$

die sozusagen einer Situation parallel geschalteter Widerstände entspricht, wobei $\rho_{BT}(T)$ der Boltzmann-Transport-Theorie folgt, während ρ_{max} ein Grenzwert darstellt. Dies ist im klaren Gegensatz zur Matthiessen'schen Regel, da für $k_F \ell \sim 1$ ganz bestimmt komplexe Interferenzefekte zu erwarten sind. Wir können den Grenzwert für das Jellium-Modell abschätzen durch

$$\rho_{max} = \frac{m}{e^2 n \tau(\epsilon_F)} = \frac{3\pi^2 m}{e^2 k_F^3 \tau(\epsilon_F)} = \frac{h}{e^2} \frac{3\pi}{2 k_F^2 \ell} \sim \frac{h}{e^2} \frac{3\pi}{2 k_F} \sim (25 \text{k}\Omega) \frac{3\pi}{2 \times 10^8 \text{cm}^{-1}} \approx 1 \text{m}\Omega \text{cm} \quad (5.75)$$

wobei wir verwendet haben, dass $\ell^{-1} \sim k_F \sim 10^8 \text{cm}^{-1}$. Dies wird Ioffe-Regel-Limit oder auch Mott-Ioffe-Regel-Limit genannt.⁵ Es ist jedoch meist nicht leicht ρ_{max} für ein gegebenes Material abzuschätzen, Es gibt auch Materialien, für der spezifische Widerstand den Ioffe-Regel-Limit übersteigt.

5.7 Allgemeine Transportkoeffizienten

Elektronen transportieren nicht nur Ladung, sondern auch Energie. Letzteres entspricht der Übertragung von Wärmeenergie oder Entropie. Es ist leicht zu sehen, dass Ladungs- und Wärmetransport der Elektronen miteinander verknüpft sind.

5.7.1 Erweiterte Boltzmann-Gleichung und das Wiedemann-Franz-Gesetz

Wir betrachten ein Metall mit einer leicht ortsabhängigen Temperatur $T(\vec{r})$. Dann hat die Verteilungsfunktion die Form

$$\delta f(\vec{k}; \vec{r}) = f(\vec{k}; \vec{r}) - f_0(\vec{k}, T(\vec{r})) \quad (5.76)$$

mit

$$f_0(\vec{k}, T(\vec{r})) = \frac{1}{\exp[(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)/k_B T(\vec{r})] + 1} \quad (5.77)$$

⁵Dieser spezifische Widerstand ($\rho_{max} \sim 1 \text{m}\Omega \text{cm}$) sollte verglichen werden mit dem guter Leiter bei Zimmertemperatur:

Metall	Cu	Au	Ag	Pt	Al	Sn	Na	Fe	Ni	Pb
$\rho[\mu\Omega \text{cm}]$	1.7	2.2	1.6	10.5	2.7	11	4.6	9.8	7	21

Diese Werte liegen weit unter ρ_{max} .

Zusätzlich soll die Bedingung gelten, dass die Ladungsdichte im Raum konstant bleibt,

$$\int d^3k \delta f(\vec{k}; \vec{r}) = 0 \quad (5.78)$$

für jeden Punkt im reellen Raum. Die Boltzmann-Gleichung für die stationäre Situation ist folglich

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoss}} &= \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \dot{\vec{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \\ &= -\frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \left\{ \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{T} - e \vec{E} \right\} \end{aligned} \quad (5.79)$$

Beachte, dass in \vec{E} auch ein Gradient des chemischen Potentials ($\vec{\nabla} \mu$) enthalten ist. In der Relaxationszeitnäherung für das Stossintegral erhalten wir als Lösung

$$f(\vec{k}) = f_{0\vec{k}} - \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \tau(\epsilon_{\vec{k}}) \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \left\{ e \vec{E} - \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{T} \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} \right\} \quad (5.80)$$

woraus für den elektrische und den Wärmestrom folgt

$$\vec{J}_e = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e \vec{v}_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \quad \text{bzw.} \quad \vec{J}_q = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \vec{v}_{\vec{k}} f_{\vec{k}}. \quad (5.81)$$

Daher erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{J}_e &= e^2 \hat{K}^{(0)} \vec{E} + \frac{e}{T} \hat{K}^{(1)} (-\vec{\nabla} T) \\ \vec{J}_q &= e \hat{K}^{(1)} \vec{E} + \frac{1}{T} \hat{K}^{(2)} (-\vec{\nabla} T) \end{aligned} \quad (5.82)$$

mit

$$K_{\alpha\beta}^{(n)} = -\frac{1}{4\pi^3} \int d\epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \tau(\epsilon) (\epsilon - \mu)^n \int d\Omega_{\vec{k}} \frac{v_{F\alpha} v_{F\beta}}{\hbar |\vec{v}_F|} \quad (5.83)$$

Für $T \ll T_F$ können wir die Koeffizienten ausrechnen ⁶

$$\begin{aligned} K_{\alpha\beta}^{(0)} &= \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \tau(\epsilon_F) \int d\Omega_{\vec{k}} \frac{v_{F\alpha} v_{F\beta}}{|\vec{v}_F|} \\ \hat{K}^{(1)} &= \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \left. \frac{\partial}{\partial \epsilon} \hat{K}^{(0)}(\epsilon) \right|_{\epsilon=\epsilon_F} \\ \hat{K}^{(2)} &= \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \hat{K}^{(0)}(\epsilon_F) \end{aligned} \quad (5.86)$$

Wir messen den elektrischen Widerstand unter der Voraussetzung thermischen Gleichgewichts, d.h. $\vec{\nabla} T = 0$ überall. Damit ist die Leitfähigkeit wie früher

$$\sigma_{\alpha\beta} = e^2 K_{\alpha\beta}^{(0)} \quad (5.87)$$

⁶Wir können mittels der Taylor-Entwicklung folgende allgemeine Näherung für $T \rightarrow 0$ herleiten, falls $g(\epsilon)$ nur schwach von der Energie abhängt:

$$-\int d\epsilon g(\epsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = g(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{\partial^2 g(\epsilon)}{\partial \epsilon^2} \right|_{\epsilon=\epsilon_F} + \dots \quad (5.84)$$

und

$$-\int d\epsilon g(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_F) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \left. \frac{\partial g(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=\epsilon_F} \quad (5.85)$$

wobei wir verwenden, dass $\mu \rightarrow \epsilon_F$ für $T \rightarrow 0$.

Für die Wärmeleitfähigkeit κ gilt, dass wir üblicherweise den elektrischen Strom $\vec{J}_e = 0$ setzen (offener Stromkreis). Dann ergibt sich aus (5.82), dass sich ein endliches elektrisches Feld aufbaut:

$$\vec{E} = \frac{1}{eT} \hat{K}^{(0)-1} \hat{K}^{(1)} \vec{\nabla} T \quad (5.88)$$

Somit ist der Wärmestrom

$$\mathbf{J}_q = -\frac{1}{T} \left(\hat{K}^{(2)} - \hat{K}^{(1)} \hat{K}^{(0)-1} \hat{K}^{(1)} \right) \vec{\nabla} T = -\hat{\kappa} \vec{\nabla} T \quad (5.89)$$

In einfachen Metallen ist der zweite Term in der Wärmeleitfähigkeit oft vernachlässigbar. Daher gilt dann

$$\hat{\kappa} = \frac{1}{T} \hat{K}^{(2)} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3} T \hat{K}^{(0)} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3 e^2} T \hat{\sigma} \quad (5.90)$$

was dem bekannten *Wiedemann-Franz-Gesetz* entspricht. Beachte, dass wir die Wärmeleitung auch in folgender Form schreiben können

$$\hat{\kappa} = \frac{C}{e^2 N(\epsilon_F)} \hat{\sigma} \quad (5.91)$$

wobei C die elektronische spezifische Wärme ist.

5.7.2 Thermoelektrischer Effekt

Wir haben in (5.88) gesehen, dass ein Temperaturgradient auch zu einem elektrischen Feld führt. Wir betrachten hier zur Vereinfachung wieder ein vollkommen isotropes System.

$$\vec{E} = Q \vec{\nabla} T \quad (5.92)$$

mit

$$Q = - \left. \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3} \frac{\sigma'(\epsilon)}{e \sigma(\epsilon)} \right|_{\epsilon=\epsilon_F} \quad (5.93)$$

als der Seebeck coefficient. Wir untersuchen $\sigma'(\epsilon)$ using $\sigma(\epsilon) = n(\epsilon)e^2\tau(\epsilon)/m$:

$$\sigma'(\epsilon) = \frac{\tau'(\epsilon)}{\tau(\epsilon)} \sigma(\epsilon) + \frac{n'(\epsilon)}{n(\epsilon)} \sigma(\epsilon) = \frac{\tau'(\epsilon)}{\tau(\epsilon)} \sigma(\epsilon) + \frac{N(\epsilon)}{n(\epsilon)} \sigma(\epsilon) \quad (5.94)$$

Wir erhalten einen Beitrag, falls die Relaxationszeit stark von der Energie abhängt. Dies ist insbesondere der Fall, wenn resonante Streuung für τ verantwortlich ist (z.B. im Kondo-Effekt). Falls jedoch der erste Term irrelevant ist, erhalten wir

$$Q = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3} \frac{N(\epsilon_F)}{e n(\epsilon_F)} = - \frac{S}{ne} \quad (5.95)$$

was der Entropie pro Elektron entspricht.

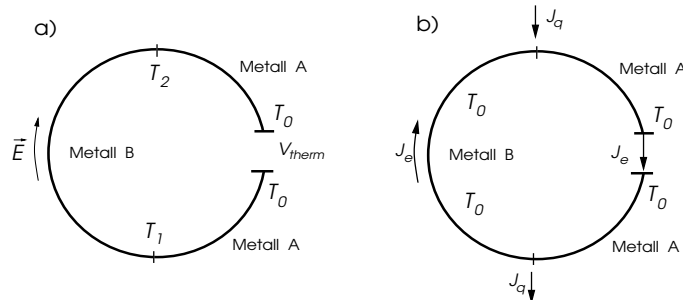


Abb. 5.4: Schematische Anordnung für thermoelektrische Effekte:
a) Seebeck-Effekt; b) Peltier-Effekt.

Wir betrachten hier zwei Typen von thermoelektrische Effekten. Der erste ist der *Seebeck-Effekt*, die Erzeugung einer thermoelektrischen Spannung in einem bimetalischen System (Abb.5.4 a)). Über dem Metall B liegt ein Temperatur-Gradient, der nach (5.92) eine elektromotorische Kraft induziert:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \int d\vec{s} \cdot \vec{E} = \int d\vec{s} \cdot Q \vec{\nabla} T \\ &= \int_{T_0}^{T_1} Q_A d\vec{s} \cdot \vec{\nabla} T + \int_{T_1}^{T_2} Q_B d\vec{s} \cdot \vec{\nabla} T + \int_{T_2}^{T_0} Q_A d\vec{s} \cdot \vec{\nabla} T = (Q_B - Q_A)(T_2 - T_1) \end{aligned} \quad (5.96)$$

Die resultierende Spannung wird in über einem zweiten Metall A, dessen beiden Kontakte bei gleicher Temperatur T_0 gehalten werden. Hier wurde eine bimetalliche Konfiguration gewählt, da man über den Kontakten Spannungsunterschiede haben kann, die man in einem einzelnen Metall nicht finden würde.

Das zweite Phänomen ist der sogenannte *Peltier-Effekt* in einem System, das überall die gleiche Temperatur hat. Hier erzeugt ein elektrischer Strom in einem bimetalischen System (Abb.5.4 b)) einen Wärmestrom, so dass beim einen bimetalischen Kontakt Wärme einem Reservoir entzogen und am anderen abgegeben wird. Dies ergibt sich aus den Gleichungen (5.82), indem wir die Temperatur überall als konstant annehmen ($\vec{\nabla} T = 0$). Dann gilt nämlich

$$\left. \begin{aligned} J_e &= e^2 K^{(0)} \vec{E} \\ J_q &= e K^{(1)} \vec{E} \end{aligned} \right\} \Rightarrow J_q = \frac{K^{(1)}}{e K^{(0)}} J_e = T Q J_e = \Pi J_e . \quad (5.97)$$

Π wird Peltier-Koeffizient genannt. In der Anordnung in Abb.5.4b) sehen wir, dass wir je einen Beitrag zum Wärmestrom von Metall A und B:

$$J_q = (\Pi_A - \Pi_B) J_e = T_0 (Q_A - Q_B) J_e \quad (5.98)$$

Dies bedeutet, dass wir durch den elektrischen Strom den Wärmeaustausch zwischen zwei Reservoiren steuern können.

5.8 Transport in einer Dimension - Anderson Lokalisierung

Transport in einer räumlichen Dimension hat spezielle Eigenschaften, da es nur zwei Fortbewegungsrichtungen gibt, nach rechts / links oder fortwärts / rückwärts. Wir führen hier den Formalismus der Transfer-Matrix ein und werden dann sehen, dass sich damit die Leitfähigkeit durch die Landauer Formel ausdrücken lässt. Im Anschluss werden wir den Effekt von mehrfacher Streuung und Interferenz untersuchen, der zur sogenannten Anderson Lokalisierung führt, wobei ein Metall durch Unordnung zum Isolator wird.

5.8.1 Landauer Formel

Die Transmission durch und Reflektion an einem beliebigen Potential in einer Dimension, das auf einen gewissen Bereich beschränkt ist, kann durch die sogenannte Transfermatrix beschrieben werden.

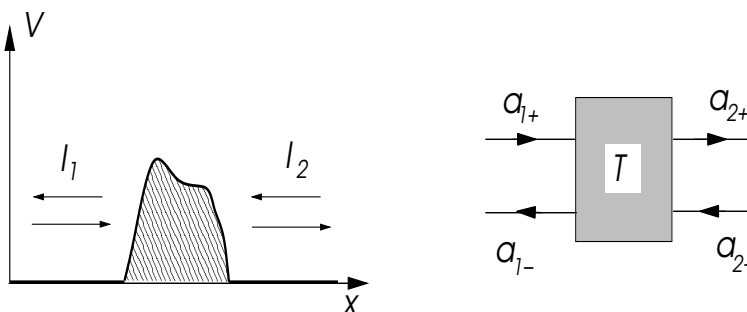


Abb. 5.5. Transfer-Matrix: Streuung an einem Potential in einer Dimension.

Dabei besteht die Wellenfunktion eines Elektorns auf beiden Seiten des Streupotentials aus zwei ebenen Wellen, einer rechts- und linkslaufenden Komponente (Abb. 5.5)

$$\psi_1(x) = a_{1+}e^{ikx} + a_{1-}e^{-ikx} \quad \text{und} \quad \psi_2(x) = a_{2+}e^{ikx} + a_{2-}e^{-ikx}, \quad (5.99)$$

wobei ψ_1 (ψ_2) im Bereich I_1 (I_2) definiert ist. Die Vektoren $a_i = (a_{i+}, a_{i-})$ sind durch eine lineare Beziehung verknüpft:

$$a_2 = T a_1 = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} a_1, \quad (5.100)$$

mit T als einer 2×2 -Matrix, die Transfer-Matrix. Diese Beziehung folgt aus dem Superpositionsprinzip der Wellen. Die Stromerhaltung ($J_1 = J_2$) erfordert, dass $\det T = 1$, d.h. T ist unimodular, wobei

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{d\psi(x)^*}{dx} \psi(x) - \psi(x)^* \frac{d\psi(x)}{dx} \right\}, \quad (5.101)$$

so dass für eine ebene Welle $\psi(x) = L^{-1/2}e^{ikx}$ gilt $J = \hbar k/Lm = v/L$ (L : Länge des Systems). Wegen der Zeitumkehrsymmetrie ist mit $\psi(x)$ auch $\psi(x)^*$ eine Lösung der stationären Schrödingergleichung. Daraus leitet sich die Beziehung her, dass $T_{11} = T_{22}^*$ und $T_{12} = T_{21}^*$, d.h.

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{pmatrix}. \quad (5.102)$$

Man kann leicht zeigen, dass falls wir das Streupotential um eine Distanz x_0 verschieben, ändern sich die Koeffizienten von T um einen Phasenfaktor

$$T_{11} \rightarrow T_{11} \quad \text{und} \quad T_{12} \rightarrow T_{12}e^{i2kx_0}. \quad (5.103)$$

Wir können die Koeffizienten von T mit der Transmissions- und Reflektionsamplitude der vorhergehenden Abschnitte in Verbindung bringen. Aus dem Ansatz für eine von links einlaufende (nicht normierte) Welle,

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx} \quad \text{und} \quad \psi_2(x) = t e^{ikx}, \quad (5.104)$$

ergibt sich durch Einsetzen, dass

$$T = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix} \quad (5.105)$$

Beachte, dass die Stromerhaltung erfordert, dass $1 = |r|^2 + |t|^2$. was die Matrix unimodular macht.

Wir leiten nun den Zusammenhang zwischen dem Reflektions- und Transmissionskoeffizienten (r und t) einer Potentialbarriere und dem elektrischen Widerstand her. Die einfallende elektrische Stromdichte J_0 spaltet sich in einen reflektierten und transmittierten Anteil auf: J_r und J_t .

$$J_0 = -\frac{1}{L}ve, \quad J_r = -\frac{|r|^2}{L}ve, \quad J_t = -\frac{|t|^2}{L}ve \quad (5.106)$$

wobei $v = \hbar k/m$ die Geschwindigkeit und $-e$ die Elektronenladung ist. Die Dichte der Elektronen auf den beiden Seiten der Barriere ist:

$$n_1 = \frac{1 + |r|^2}{L} \quad \text{und} \quad n_2 = \frac{|t|^2}{L} \quad (5.107)$$

woraus sich ein Dichteunterschied von $\delta n = n_1 - n_2 = (1 + |r|^2 - |t|^2)/L = 2|r|^2/L$ ergibt. Es besteht folglich ein Energieunterschied $\delta E = -e\delta V$ zwischen den beiden Seiten, der einem Spannungsunterschied entspricht:

$$\delta n = \frac{dn}{dE} \delta E = -\frac{dn}{dE} e \delta V. \quad (5.108)$$

Dabei ist $\frac{dn}{dE}dE$ die Zahl der Zustände pro Längeneinheit, die im Energieintervall $[E, E + dE]$ liegen:

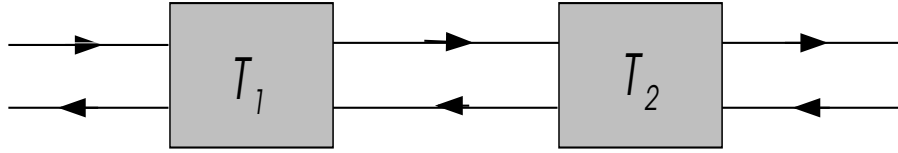
$$\frac{dn}{dE} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k},s} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = 2 \int \frac{dk}{2\pi} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \frac{1}{\pi \hbar v} \quad (5.109)$$

Den Widerstand erhält man aus:

$$R = \frac{\delta V}{J_t} = -\frac{\delta n}{e} \left(\frac{dn}{dE}\right)^{-1} \frac{1}{J_t} = \frac{h}{e^2} \frac{|r|^2}{|t|^2}. \quad (5.110)$$

wobei $h/e^2 \approx 25.8k\Omega$ das Widerstandsquantum ist. Dies ist die Landauer-Formel, die für alle eindimensionalen Systeme gilt und oft für die Beschreibung mesoskopischer Systeme und Quantendrähte benutzt wird.

Wir betrachten nun zwei räumlich separierte Streupotentiale, dargestellt durch T_1 und T_2 (r_1, t_1 bzw. r_2, t_2).



Die Teilchenwelle erfährt an diesen Potentialen eine komplizierte Mehrfach-Streuung. Das Ergebnis dieser Streuung kann jedoch wieder mit einer einzelnen Transfermatrix ausgedrückt werden, indem man T_1 und T_2 einfach multipliziert. Alle obigen Eigenschaften bleiben auch für die neue Gesamtmatrix gültig.

$$T = T_1 T_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_1^* t_2^*} + \frac{r_1^* r_2}{t_1^* t_2} & -\frac{r_2^*}{t_1^* t_2^*} - \frac{r_1^*}{t_1^* t_2} \\ -\frac{r_1}{t_1 t_2^*} - \frac{r_2}{t_1 t_2} & \frac{1}{t_1 t_2} + \frac{r_1 r_2^*}{t_1 t_2^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix} \quad (5.111)$$

Wir berechnen nun das Verhältnis zwischen Reflektions- und Transmissionswahrscheinlichkeit:

$$\frac{|r|^2}{|t|^2} = \frac{1}{|t|^2} - 1 = \frac{1}{|t_1|^2 |t_2|^2} \left| 1 + \frac{r_1 r_2^* t_2}{t_1^*} \right|^2 - 1 = \frac{1}{|t_1|^2 |t_2|^2} \left(1 + |r_1|^2 |r_2|^2 + \frac{r_1 r_2^* t_2}{t_1^*} + \frac{r_1^* r_2 t_2^*}{t_1} \right) - 1. \quad (5.112)$$

Unter der Annahme, dass die Distanz $d = x_2 - x_1$ zwischen den beiden Potentialbarrieren beliebig ist, führen wir eine Mittelung über die Distanz durch. Beachte dabei, dass $r_2/t_2 \propto e^{-2ikd}$ ist, und dass Terme mit solchen Faktoren durch die Mittelung über d verschwinden. Was von (5.112) übrigbleibt, kann einfach zusammengefasst werden als

$$\left. \frac{|r|^2}{|t|^2} \right|_{\text{Mittel}} = \frac{1}{|t_1|^2 |t_2|^2} (1 + |r_1|^2 |r_2|^2) - 1 = \frac{|r_1|^2}{|t_1|^2} + \frac{|r_2|^2}{|t_2|^2} + 2 \frac{|r_1|^2 |r_2|^2}{|t_1|^2 |t_2|^2}. \quad (5.113)$$

Obwohl die zwei Streupotentiale in Serie geschaltet sind, ergibt sich eine nicht-lineare Kombination und nicht einfach die Summe der beiden $|r_i|^2/|t_i|^2$. Aus der Landauer-Formel folgt nun, dass dies Konsequenzen dafür hat wie Widerstände sich "addieren". Wenn wir nämlich zwei Widerstände, R_1 und R_2 in Serie schalten, erhalten wir als Gesamtwiderstand nicht $R = R_1 + R_2$, sondern

$$R = R_1 + R_2 + \frac{2e^2}{h} R_1 R_2. \quad (5.114)$$

Diese ist eine Konsequenz der Mehrfachstreuung und der Interferenzeffekte. Besonders stark tritt dies hervor, wenn $R_i \gg h/e^2$. Dann werden die beiden Widerstände multipliziert und nicht addiert.

5.8.2 Anderson Lokalisierung

Betrachten wir nun ein System mit vielen zufällig verteilten Streupotentialen. Sei ρ ein mittlerer Widerstand pro Länge. Der Widerstand des Systems auf der Strecke zwischen 0 und ℓ_0 sei R_0 . Nun berechnen wir die Änderung des Gesamtwiderstandes, wenn wir eine infinitesimal kurze Strecke $d\ell$ weitergehen:

$$dR = \rho d\ell + \frac{2e^2}{h} R \rho d\ell. \quad (5.115)$$

Daraus ergibt sich unmittelbar

$$\int_{R_0}^R \frac{dR}{1 + \frac{2e^2}{h} R} = \int_{\ell_0}^{\ell} \rho d\ell, \quad (5.116)$$

mit dem Resultat

$$\frac{h}{2e^2} \ln \left(\frac{1 + 2e^2 R(\ell)/h}{1 + 2e^2 R_0/h} \right) = \rho(\ell - \ell_0). \quad (5.117)$$

Mit $R_0 \rightarrow 0$ für $\ell_0 \rightarrow 0$ ergibt sich

$$R(\ell) = \frac{h}{2e^2} \left(e^{2e^2 \rho \ell / h} - 1 \right). \quad (5.118)$$

Offenbar geht der Widerstand R rapide gegen unendlich mit wachsendem ℓ . Das bedeutet, dass dieses System ein Isolator ist für beliebig kleines, aber endliches ρ . Dies rührt daher, dass in einer Dimension alle Zustände *lokalisiert* (gebunden) sind, falls Unordnung herrscht. Dieses Phänomen wird *Anderson-Lokalisierung* genannt. Obwohl alle Zustände lokalisiert sind, ist das Energieeigenwertspektrum kontinuierlich, da unendlich viele gebundene Zustände verschiedener Energie vorhanden sind. Die mittlere Lokalisierungslänge (Ausdehnung der Wellenfunktion) einzelner Zustände ergibt sich aus (5.118) zu $\xi = h/e^2 \rho$. Auch die Transmissionamplitude nimmt mit dieser Länge ab, $|t| \approx 2e^{-\ell/\xi}$ für $\ell \gg \xi$.⁷

In einer Dimension gibt es keinen "normalen" elektrischen Widerstand ($R(\ell) \approx \rho \ell$) für nicht-wechselwirkende Teilchen, sondern nur zwei Extreme. Entweder ist das Streupotential perfekt periodisch angeordnet und die Zustände entsprechen Bloch'schen Wellen. Dann erzeugt die kohärente konstruktive Interferenz ausgedehnte Zustände, die frei durch das System propagieren, und somit einen perfekten Leiter ohne jeglichen Widerstand. Oder das Streupotential ist ungeordnet, und alle Zustände sind lokalisiert. Dann gibt es keine freie Propagation, und das System ist ein Isolator. In dreidimensionalen Systemen ist Mehrfachstreuung weitaus weniger gefährlich, und das Ohm'sche Gesetz ist ohne Probleme anwendbar. Lokalisierung in zweidimensionale Systemen ist ein sehr subtiles Problem, und ist immer noch Thema aktueller Forschung.

⁷Für eine ausführlichere Diskussion empfiehlt sich der Artikel "New method for a scaling theory of localization" von P.W. Anderson, D.J. Thouless, E. Abrahams and D.S. Fisher in Physical Review B 22, 3519 (1980).

Kapitel 6

Magnetismus in Metallen

In diesem Kapitel betrachten wir magnetische Ordnung in Metallen, eine Form der Instabilität des Fermiflüssigkeitszustandes. Wir beschränken uns dabei auf die detailliertere Beschreibung des Stoner-Ferromagnetismus und geben nur einen begrenzten Einblick in den Antiferromagnetismus oder Spindichtewellen. In beiden Fällen ist es der Spin beweglicher Elektronen, der das magnetische Moment liefert. Den Magnetismus lokalisierter magnetischer Momente in Mott-Isolatoren werden wir im nächsten Kapitel untersuchen.

Typische Beispiel von magnetischen Metallen sind die Ferromagneten Fe, Co oder Ni. Diese gehören zu den $3d$ -Übergangsmetallen. Hier haben die Leitungselektronen dominant $3d$ -Orbital-Charakter. Da diese Orbitale stark an den Ionenrumpf gebunden sind, ist die Beweglichkeit der Elektronen etwas eingeschränkt und die Wechselwirkung erhält stärkere Bedeutung. Wir finden andere Formen des Magnetismus (Spindichtewellen oder Antiferromagnetismus) in Cr und Mn, die auch zu den $3d$ -Übergangsmetallen gehören. Hingegen sind die $4d$ - oder $5d$ -Übergangsmetalle in den gleichen Kolonen des Periodensystems nicht magnetisch. Diese Orbitale liegen weniger dicht am Rumpf und liefern beweglichere Elektronen. Es zeigt sich jedoch, dass Pd und Rh ($4d$) und Pt ($5d$) nahezu ferromagnetisch sind. In ähnlicher Weise sind $4f$ -Orbitale in den Lanthaniden fast lokalisiert und können zu Ferromagnetismus führen, wie die Beispiele Gd und Dy zeigen.

Der Magnetismus taucht als eine Phasenumwandlung auf, d.h. bei sehr hohen Temperaturen ist das Metall nicht magnetisch. Es gibt jedoch eine kritische Temperatur, unterhalb derer der Magnetismus - in den meisten Fällen kontinuierlich - auftritt. Man spricht hier von Phasenübergängen zweiter Ordnung (ohne latente Wärme aber mit einer Unstetigkeit in der spezifischen Wärme) und einer spontanen Symmetriebrechung.

Element	T_{krit} (K)	Typ	Element	T_{krit} (K)	Typ
Fe	1043	Ferromagnet (3d)	Gd	293	Ferromagnet (4f)
Co	1388	Ferromagnet (3d)	Dy	85	Ferromagnet (4f)
Ni	627	Ferromagnet (3d)	Cr	312	Spindichtewelle (3d)
ZrZn ₂	22	Ferromagnet	α -Mn	100	Antiferromagnet
Pd	–	Paramagnet	Pt	–	Paramagnet
HfZn ₂	–	Paramagnet			

In diesem Kapitel untersuchen wir vorallem den metallischen Ferromagnetismus, der auf dem Stoner-Mechanismus beruht. Die treibende Kraft ist hier analog zur ersten Hund'schen Regel die Austauschwechselwirkung, d.h. die Ausrichtung der Spins erlaubt wegen des Austauschlochs den Energieverlust der Coulomb-Wechselwirkung zu mildern. Für die andere Formen des Magnetismus werden auch Bandstruktur-Effekte wichtig sein.

6.1 Stoner-Instabilität

Landaus Theorie der Fermiflüssigkeiten zeigt, dass durch Wechselwirkung zwischen Elektronen die Spinsuszeptibilität renormiert wird. Man erhält

$$\chi = \frac{m^*}{m} \frac{\chi_0}{1 + F_0^a}, \quad (6.1)$$

die für $F_0^a \rightarrow -1$ divergiert. Dies deutet auf eine mögliche Instabilität der Fermiflüssigkeit hin, die wir nun hier mit einem einfachen Model diskutieren.

6.1.1 Stoner-Modell in der Molekularfeld-Näherung

Wir betrachten Elektronen mit einer repulsiven Kontaktwechselwirkung:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},s} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}s} + U \int d^3r d^3r' \hat{\rho}_\uparrow(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\rho}_\downarrow(\vec{r}'). \quad (6.2)$$

wobei die Dichte durch $\hat{\rho}_s(\vec{r}) = \hat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_s(\vec{r})$ definiert wird. Wegen des Pauli-Ausschlussprinzips existiert die Kontaktwechselwirkung nur für Elektronen mit umgekehrtem Spin (Austauschloch für Elektronen mit parallelen Spins)

Wir können dieses Modell nicht allgemein lösen. Aber es gibt eine interessante und äusserst nützliche Näherung, die Molekularfeld-Näherung. Wir setzen an

$$\hat{\rho}_s(\vec{r}) = n_s + \{ \hat{\rho}_s(\vec{r}) - n_s \}, \quad (6.3)$$

wobei gilt

$$n_s = \langle \hat{\rho}_s(\vec{r}) \rangle \quad \text{und} \quad \langle \{ \hat{\rho}_s(\vec{r}) - n_s \}^2 \rangle \ll n_s^2. \quad (6.4)$$

Wir setzen (6.3) in den Hamilton-Operator ein und erhalten

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mf} &= \sum_{\vec{k},s} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}s} + U \int d^3r \{ \hat{\rho}_\uparrow(\vec{r}) n_\downarrow + \hat{\rho}_\downarrow(\vec{r}) n_\uparrow - n_\uparrow n_\downarrow \} + \dots \\ &= \sum_{\vec{k},s} \{ \epsilon_{\vec{k}} + U n_{-s} \} \hat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}s} + -U \Omega n_\uparrow n_\downarrow + \dots \end{aligned} \quad (6.5)$$

Dieser Näherung bedeutet, dass die Elektronen einer Spinsorte sich im mittleren Feld der anderen bewegt. Der Vorteil dieser Näherung ist, dass wir es mit einem effektiven Einteilchen-Problem zutun haben, wobei nur die gemittelte Elektronwechselwirkung berücksichtigt wird (verallgemeinerte Hartree-Fock-Näherung). Daraus lassen sich folgenden Erwartungswerte errechnen:

$$\begin{aligned} n_\uparrow &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} f(\epsilon_{\vec{k}} + U n_\downarrow) = \int d\epsilon \underbrace{\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}} - U n_\downarrow)}_{= \frac{1}{2} N(\epsilon - U n_\downarrow)} f(\epsilon) \end{aligned} \quad (6.6)$$

und analog für den umgekehrten Spin. Diese müssen nun selbstkonsistent bestimmt werden, d.h. der Input von n_s in (6.5) muss dem Output der Erwartungswerte (6.6) ergeben. Dabei muss gelten, dass Gesamtzahl der Elektronenzahl erhalten bleibt. Wir definieren

$$n_s = \frac{1}{2} ((n_\uparrow + n_\downarrow) + s(n_\uparrow - n_\downarrow)) = \frac{n_0 + sm}{2} \quad (6.7)$$

wobei n_0 die Teilchendichte und m proportional zur Magnetisierung M ($= \mu_B m$) des Metalls ist. Wir erhalten nun zwei Gleichungen

$$n_0 = \frac{1}{2} \int d\epsilon \{N(\epsilon - Un_\downarrow) + N(\epsilon - Un_\uparrow)\} f(\epsilon) = \frac{1}{2} \sum_s \int d\epsilon N\left(\epsilon - \frac{Un_0}{2} - s\frac{Um}{2}\right) f(\epsilon)$$

$$m = \frac{1}{2} \int d\epsilon \{N(\epsilon - Un_\downarrow) - N(\epsilon - Un_\uparrow)\} f(\epsilon) = -\frac{1}{2} \sum_s \int d\epsilon s N\left(\epsilon - \frac{Un_0}{2} - s\frac{Um}{2}\right) f(\epsilon) \quad (6.8)$$

6.1.2 Stoner-Kriterium

Um diese Gleichungen zu erfüllen, müssen wir das chemische Potential anpassen. Dieses kann für kleine Magnetisierung und Temperatur, d.h. $m \ll n_0$, entwickelt werden als

$$\mu(m, T) = \epsilon_F + \Delta\mu(m, T) \quad (6.9)$$

wobei die globale Energie-Verschiebung $-Un_0/2$ in ϵ_F absorbiert wurde. Deshalb ist es vorteilhaft für die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion die folgende Form einzuführen:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\{\epsilon - \mu(m)\}} + 1} \quad (6.10)$$

mit $\beta = (k_B T)^{-1}$. Wir entwickeln nun die erste Gleichung von (6.8) und erhalten

$$n_0 \approx \int d\epsilon f(\epsilon) \left\{ N(\epsilon) + \frac{1}{2} \left(\frac{Um}{2}\right)^2 N''(\epsilon) \right\}$$

$$\approx \underbrace{\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon N(\epsilon)}_{=n_0} + N(\epsilon_F) \Delta\mu + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 N'(\epsilon_F) + \frac{1}{2} \left(\frac{Um}{2}\right)^2 N'(\epsilon_F). \quad (6.11)$$

wobei $N'(\epsilon) = dN(\epsilon)/d\epsilon$ und $N''(\epsilon) = d^2N(\epsilon)/d\epsilon^2$. Da der erste Term auf der rechten Seite n_0 ergibt, erhalten wir unmittelbar

$$\Delta\mu(m, T) \approx -\frac{N'(\epsilon_F)}{N(\epsilon_F)} \left\{ \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{Um}{2}\right)^2 \right\} \quad (6.12)$$

Analog gehen wir nun die zweite Gleichung in (6.8) an, indem wir in m und T entwickeln:

$$m \approx \int d\epsilon f(\epsilon) \left[N'(\epsilon) \frac{Um}{2} + \frac{1}{3!} N'''(\epsilon) \left(\frac{Um}{2}\right)^3 \right] \quad (6.13)$$

$$\approx \left\{ N(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 N''(\epsilon_F) + \frac{1}{3!} \left(\frac{Um}{2}\right)^2 N''(\epsilon_F) + \Delta\mu N'(\epsilon_F) \right\} \frac{Um}{2}$$

$$m = \frac{m}{2} UN(\epsilon_F) \left[1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \Lambda_1(\epsilon_F)^2 \right] - N(\epsilon_F) \Lambda_2(\epsilon_F)^2 \left(\frac{Um}{2}\right)^3 \quad (6.14)$$

wobei

$$\Lambda_1(\epsilon_F)^2 = \frac{N'(\epsilon_F)^2}{N(\epsilon_F)^2} - \frac{N''(\epsilon_F)}{N(\epsilon_F)} \quad \text{und} \quad \Lambda_2(\epsilon_F) = \frac{1}{2} \left(\frac{N'(\epsilon_F)^2}{N(\epsilon_F)^2} - \frac{N''(\epsilon_F)}{3N(\epsilon_F)} \right). \quad (6.15)$$

Die Struktur dieser Gleichung ist

$$m = am + bm^3 \quad (6.16)$$

wobei $b < 0$ angenommen wird. Somit hat diese Gleichung zwei Typen von Lösungen:

$$m^2 = \begin{cases} 0 & a < 1 \\ \frac{a-1}{b} & a \geq 1 \end{cases} \quad (6.17)$$

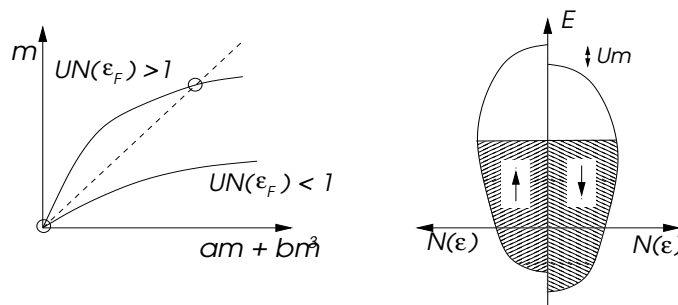


Abb. 6.1

Damit entspricht $a = 1$ einem kritischen Wert, d.h.

$$1 = \frac{1}{2}UN(\epsilon_F) \left[1 - \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \Lambda_1(\epsilon_F)^2 \right] \quad (6.18)$$

woraus folgt

$$k_B T_C = \frac{\sqrt{6}}{\pi \Lambda_1(\epsilon_F)} \sqrt{1 - \frac{2}{UN(\epsilon_F)}} = \frac{\sqrt{6}}{\pi \Lambda_1(\epsilon_F)} \sqrt{1 - \frac{U_c}{U}} \quad (6.19)$$

für $U > U_c = 2/N(\epsilon_F)$. Dies entspricht einer Instabilitätsbedingung des unmagnetischen Fermiflüssigkeitszustandes mit $m = 0$, und T_C ist die *Curie-Temperatur* unterhalb derer ein ferromagnetischer Zustand auftritt. Somit hat die Magnetisierung M des ferromagnetischen Zustandes die Temperaturabhängigkeit

$$M(T) = \mu_B m(T) \propto \sqrt{T_C - T} \quad \text{für} \quad T < T_C \quad (6.20)$$

falls $T_C - T \ll T_C$. Beachte, dass T_C nur endlich ist für $UN(\epsilon_F) > 2$ und gegen Null geht, wenn $UN(\epsilon_F) \rightarrow 2_+$. Damit besitzen wir hier auch ein einfaches Modell mit einem sogenannten *Quantenphasenübergang*, d.h. einem Phasenübergang bei $T = 0$ als Funktion von Systemparametern, z.B. die Zustandsdichte. Während bei endlicher Temperatur thermische Fluktuationen den geordneten Zustand zerstören, indem nämlich die Zunahme der Entropie S (Unordnung) eine Absenkung der freien Energie F bei endlichen Temperaturen ergibt ($dF = -SdT + \dots$) bewirkt, spielt die Entropie bei $T = 0$ keine Rolle mehr. Es sind die Quantenfluktuationen, die Heisenberg'sche Unschärferelation, die Ordnung (klassischer Gleichgewichtszustand) unterdrückt.

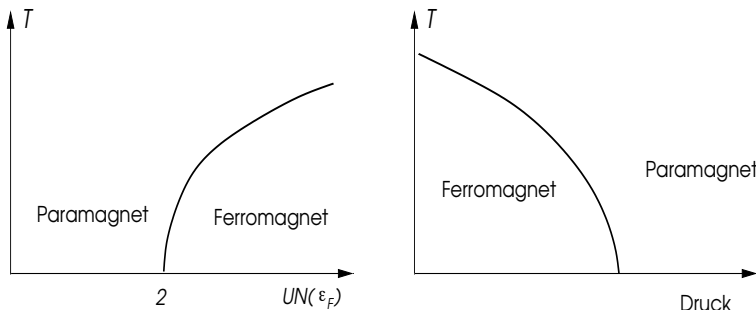


Abb. 6.2

Die Zustandsdichte als interner Parameter kann zum Beispiel durch Druck verändert werden. Mit abnehmender Gitterkonstante wird die Bewegung der Leitungselektronen erleichtert, d.h. die Fermigeschwindigkeit nimmt zu und folglich die Zustandsdichte ab. Dies entspricht der Erfahrung bei einigen schwach ferromagnetischen Metallen, dass der Druck den Ferromagnetismus zerstört, z.B. in ZrZn_2 , MnSi oder UGe_2 . Bei anderen Materialien ist die Curie-Temperatur so hoch, dass der technisch mögliche Druck normalerweise nicht ausreicht den Magnetismus zu unterdrücken. Es kann jedoch unter Druck zu anderen, etwa zu strukturellen Phasenübergängen, kommen, die dem Ferromagnetismus ein Ende bereiten. Dies kann etwa bei Eisen beobachtet werden, das unter Druck von der ferromagnetischen kubisch raumzentrierten Kristallstruktur bei ca. 12 GPa in eine unmagnetische, dichtest gepackte hexagonale Struktur übergeht.

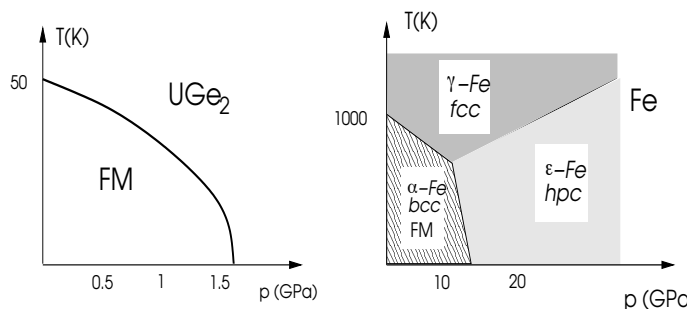


Abb. 6.3

Während diese Form des Übergangs auch ein Quantenübergang ist, handelt es sich meist um unetstetige Übergänge erster Ordnung.¹ Druck kann auch eine Erhöhung von $N(\epsilon_F)$ bewirken, z.B. ein Metallen mit mehreren Bändern, in denen unter Komprimierung eine Umverteilung der Ladung vorkommen kann. Ein Beispiel ist $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$.

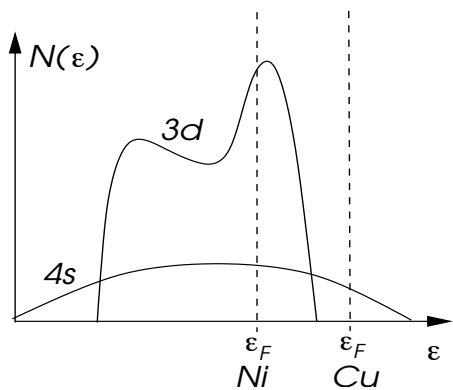


Abb. 6.4

Warum ist Cu als unmittelbarer Nachbar von Ni in der 3d-Reihe der Periodentabelle nicht ferromagnetisch? Beide Elemente haben sogar die gleiche Kristallstruktur, nämlich kubisch flächenzentriert (fcc). Dies kann auch durch die Betrachtung des Stoner-Instabilitätskriteriums verstanden werden ($UN(\epsilon_F) = 2$). Während die Leitungselektronen von Ni 3d-Charakter haben und daher einem engen Band (hohe Zustandsdichte) angehören, liegt die Fermienergie von Cu bereits im ausgedehnten 4s-Band mit einer viel kleineren Zustandsdichte (Abb.6.4). Damit sind die Cu-Leitungselektronen weniger lokalisiert und haben eine schwache Neigung zu Ferromagnetismus.

¹Auch die Stoner-Instabilität ist eine starke Vereinfachung des Quantenphasenüberganges. In den meisten Fällen ergibt sich ein unetstetiger magnetischer Phasenübergang aufgrund der Bandstruktur oder spezieller Fluktuationseffekte, die hier vernachlässigt worden sind (D. Belitz and T.R. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 89, 247202 (2002)).

6.1.3 Spinsuszeptibilität für $T > T_C$

Wir legen ein infinitesimales magnetisches Feld H entlang der z -Achse an, das via die Zeeman-Kopplung eine Spinpolarisation hervorruft. Damit erhalten wir aus obigen Selbstkonstanz-Gleichungen

$$\begin{aligned} m &= -\frac{1}{2} \int d\epsilon f(\epsilon) \sum_s s N \left(\epsilon - \mu_B s H - s \frac{Um}{2} \right) \approx \int d\epsilon f(\epsilon) N'(\epsilon) \left(\frac{Um}{2} + \mu_B H \right) \\ &= N(\epsilon_F) \left[1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \Lambda_1(\epsilon_F)^2 \right] \left(\frac{Um}{2} + \mu_B H \right) \end{aligned} \quad (6.21)$$

Nach m aufgelöst, ergibt sich

$$M = \mu_B m = \frac{\chi_0(T)}{1 - U\chi_0(T)/2\mu_B^2} H \quad \Rightarrow \quad \chi = \frac{M}{H} = \frac{\chi_0(T)}{1 - U\chi_0(T)/2\mu_B^2} \quad (6.22)$$

wobei

$$\chi_0(T) = \mu_B^2 N(\epsilon_F) \left[1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \Lambda_1(\epsilon_F)^2 \right] \quad (6.23)$$

Es ist nun wichtig zu sehen, dass der Nenner der Suszeptibilität $\chi(T)$ gerade verschwindet, wenn das Stoner-Instabilitätskriterium erfüllt ist, d.h. die divergierende Suszeptibilität zeigt die Instabilität an.

$$\chi(T) \approx \frac{\chi_0(T_C)}{\frac{T_C^2}{T^2} - 1} \quad (6.24)$$

6.2 Allgemeine Spinsuszeptibilität und magnetische Instabilitäten

Der ferromagnetische Zustand ist charakterisiert durch eine uniforme Magnetisierung. Es gibt jedoch auch magnetisch geordnete Zustände, die keine Netto-Magnetisierung aufweisen. Dies sind Spindichte-Wellen, Antiferromagneten oder Spin-Spiralzustände, um einige mögliche Beispiele aufzuzählen. Wir analysieren hier die allgemeinen Instabilitätsbedingungen.

6.2.1 Allgemeine dynamische Spinsuszeptibilität

Wir führen ein in Raum und Zeit oszillierendes magnetisches Feld ein und berechnen die resultierende Magnetisierung.

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r} - i\omega t} e^{\eta t} \quad (6.25)$$

Wir gehen wieder analog vor wie im Kapitel 3. Wir definieren den Spindichteoperator

$$\widehat{\vec{S}}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \sum_{s,s'} \widehat{\Psi}_s^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma}_{ss'} \widehat{\Psi}_{s'}(\vec{r}) \quad (6.26)$$

im Ortsraum und

$$\widehat{\vec{S}}_{\vec{q}} = \int d^3r \widehat{\vec{S}}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{\hbar}{2\Omega} \sum_{\vec{k},s,s'} c_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger \vec{\sigma}_{ss'} c_{\vec{k},s'} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \widehat{\vec{S}}_{\vec{k},\vec{q}} \quad (6.27)$$

im Impulsraum. Der Hamilton-Operator des elektronischen Systems mit Kontaktwechselwirkung ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},s} \epsilon_{\vec{k}} \widehat{c}_{\vec{k}s}^\dagger \widehat{c}_{\vec{k}s} - \underbrace{\frac{g\mu_B}{\hbar} \int d^3r \vec{H}(\vec{r}, t) \cdot \widehat{\vec{S}}(\vec{r})}_{=\mathcal{H}_Z} + U \int d^3r \widehat{\rho}_\uparrow(\vec{r}) \widehat{\rho}_\downarrow(\vec{r}) \quad (6.28)$$

Wir betrachten nun ein Magnetfeld in der x - y -Ebene:

$$\mathcal{H}_Z = -\frac{g\mu_B}{\hbar\Omega} \sum_{\vec{k}} H^+(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{S}_{\vec{k}, -\vec{q}}^- e^{-i\omega t + \eta t} \quad (6.29)$$

Wir bestimmen mit Hilfe der Bewegungsgleichungen die induzierte Magnetisierung, zunächst ohne den Wechselwirkungsterm.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S}^+ = [\mathcal{H}, \hat{S}^+] \quad (6.30)$$

wobei wir uns vorderhand auf den nicht-wechselwirkenden Teil des Hamilton-Operators beschränken. Ausgedrückt als Matrixelemente im Impulsraum erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\langle \vec{k}' | \hat{S}^+(t) | \vec{k} \rangle}_{S_{\vec{k}, \vec{k}' - \vec{k}}^+(t)} = (\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}}) \langle \vec{k}' | \hat{S}^+(t) | \vec{k} \rangle - g\hbar\mu_B (n_{\vec{k}\uparrow}(t) - n_{\vec{k}\downarrow}(t)) H^+(\vec{q}, \omega) \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q}} \quad (6.31)$$

Wir beschränken uns dabei nun auf die relevante Fourier-Komponente in Raum und Zeit:

$$(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega + i\hbar\eta) S_{\vec{k}, \vec{q}}^+ = -g\hbar\mu_B (n_{\vec{k} + \vec{q}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow}) H^+(\vec{q}, \omega) \quad (6.32)$$

woraus wir die entsprechende Fourier-Komponente der induzierten Spindichte (Magnetisierung) erhalten,

$$\begin{aligned} S_{ind}^+(\vec{q}, \omega) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} S_{\vec{k}, \vec{q}}^+ = -\frac{g\mu_B \hbar}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k} + \vec{q}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow}}{\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega + i\hbar\eta} H^+(\vec{q}, \omega) \\ &= \frac{\hbar}{\mu_B} \chi_0(\vec{q}, \omega) H^+(\vec{q}, \omega) \end{aligned} \quad (6.33)$$

Beachte, dass $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ eine Form analog zur Lindhard-Funktion (3.32) hat. Die Form (6.33) bestimmt die induzierte Spindichte in linearer Antwort-Näherung. Wir haben aber noch nicht den Effekt der Wechselwirkung berücksichtigt. Analog zur Ladungsdichte erzeugt die induzierte Spindichte wiederum ein effektives Feld. In der Austauschwechselwirkung erscheint die lokale Spinpolarisation als effektives Magnetfeld. Wir schreiben die Kontaktwechselwirkung in (6.28) um als

$$\begin{aligned} U \int d^3r \rho_{\uparrow}(\vec{r}) \rho_{\downarrow}(\vec{r}) &= \frac{U}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k} + \vec{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{\vec{k}' - \vec{q}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'\downarrow} \\ &\rightarrow -\frac{U}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k} + \vec{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}' - \vec{q}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} = -\frac{U}{\Omega \hbar^2} \sum_{\vec{q}} \hat{S}_{\vec{q}}^+ \hat{S}_{-\vec{q}}^- . \end{aligned} \quad (6.34)$$

Wir führen ein effektive Magnetfeld H_{ind}^+ ein, dass der lokalen Spinpolarisation entspricht:

$$-\frac{g\mu_B}{\hbar} H_{ind}^+(\vec{q}, \omega) \hat{S}_{-\vec{q}}^- = -\frac{U}{\hbar^2} S^+(\vec{q}, \omega) \hat{S}_{-\vec{q}}^- \Rightarrow H_{ind}^+ = \frac{U}{g\mu_B \hbar} S^+(\vec{q}, \omega) . \quad (6.35)$$

Auch dieses induzierte Feld wirkt nun auf die Spins, so dass die gesamte Reaktion der Spindichte auf das äussere Feld gegeben ist durch

$$\begin{aligned} M^+(\vec{q}, \omega) &= \frac{\mu_B}{\hbar} S^+(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) \{H^+(\vec{q}, \omega) + H_{ind}^+(\vec{q}, \omega)\} \\ &= \chi_0(\vec{q}, \omega) H^+(\vec{q}, \omega) + \chi_0(\vec{q}, \omega) \frac{U}{g\mu_B \hbar} S^+(\vec{q}, \omega) \end{aligned} \quad (6.36)$$

Somit gilt $M^+(\vec{q}, \omega) = \chi(\vec{q}, \omega)H^+(\vec{q}, \omega)$ mit

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \frac{U}{2\mu_B^2}\chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (6.37)$$

Analog zur Kapitel 3 handelt es sich hier um eine sogenannte RPA-Form.

Betrachten wir die Fall $\vec{q}, \omega \rightarrow 0$ der einem uniformen, statischen äusseren Feld entspricht. Dann gilt

$$\chi_0(\vec{q}, 0) = -\frac{2\mu_B^2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow}}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}} \xrightarrow{\vec{q} \rightarrow 0} -\frac{2\mu_B^2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{\partial f(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} = \chi_0(T) \quad (6.38)$$

was der Pauli-Spinsuszeptibilität entspricht ($g = 2$). Damit erhält $\chi(T)$ wieder die Form, die wir in (6.22) gesehen hatten, und beschreibt die Instabilität des Metalles gegenüber ferromagnetischer Spinpolarisierung durch das Verschwinden des Nenners. Es ist aber möglich, dass $\vec{q} = 0$ nicht die führende Instabilität ist, weil $\chi_0(\vec{q}, 0) > \chi_0(0, 0)$. Dann würde eine andere Form der magnetischen Ordnung auftreten.

6.2.2 Instabilität bei endlichem Wellenvektor \vec{q}

Um zu zeigen, dass die Stoner-Instabilität tatsächlich unter den möglichen magnetischen Instabilitäten nicht immer gewinnt, betrachten wir hier ein einfaches Argument, das auf der lokalen Suszeptibilität aufbaut. Wir definieren das lokale magnetische Moment entlang der z -Achse als $M(\vec{r}) = \mu_B(\hat{\rho}_\uparrow(\vec{r}) - \hat{\rho}_\downarrow(\vec{r}))$ und betrachten die nicht-lokale Beziehung

$$M(\vec{r}) = \int d^3r' \tilde{\chi}_0(\vec{r} - \vec{r}')H_z(\vec{r}') \quad (6.39)$$

Es gilt damit

$$\chi_0(\vec{q}) = \int d^3r \tilde{\chi}_0(\vec{r})e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad \text{mit} \quad M_{\vec{q}} = \chi(\vec{q})H_{\vec{q}}. \quad (6.40)$$

Nun vergleichen wir $\chi_0(\vec{q} = 0)$ und $\overline{\chi(\vec{q})} = \overline{\tilde{\chi}_0(\vec{r} = 0)}$, d.h. die uniforme und die lokale Suszeptibilität bei $T = 0$. Die lokale Suszeptibilität ist zugleich die Mittelung von $\chi_0(\vec{q})$ über alle \vec{q} :

$$\overline{\chi_0(\vec{q})} = \frac{2\mu_B^2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \frac{n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} = \frac{\mu_B^2}{2} \int d\epsilon N(\epsilon) \int d\epsilon' N(\epsilon') \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon')}{\epsilon' - \epsilon} \quad (6.41)$$

im Vergleich zu $\chi_0(\vec{q} = 0) = \mu_B^2 N(\epsilon_F)$. Die lokale Suszeptibilität hängt von der Zustandsdichte und der Fermienergie des Systems ab. Wir betrachten hier zur Illustration ein einfaches Beispiel:

$$N(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{D} & -D \leq \epsilon \leq +D \\ 0 & |\epsilon| > D \end{cases} \quad (6.42)$$

d.h. eine Kastenform für die Zustandsdichte eines Bandes mit der Breite $2D$. Damit lässt sich das Integral in (6.41) sehr leicht bestimmen:

$$R_0 = \frac{\overline{\chi_0(\vec{q})}}{\chi_0(\vec{q} = 0)} = \ln\left(\frac{4}{1 - \eta^2}\right) + \eta \ln\left(\frac{1 - \eta}{1 + \eta}\right) \quad (6.43)$$

mit $\eta = \epsilon_F/D$ (Abb.6.6).

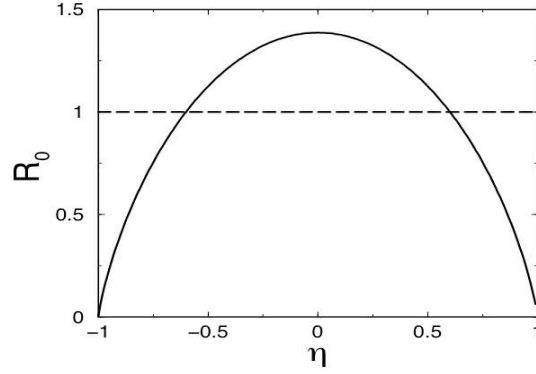


Abb. 6.6

Für kleine und grosse Bandfüllungen (Nähe Bandränder) ist die Tendenz zu Ferromagnetismus dominierend. Falls ϵ_F hingegen gegen die Bandmitte geht, wird die Suszeptibilität $\chi_0(\vec{q})$ nicht mehr bei $\vec{q} = 0$ maximal sein und magnetische Ordnungen mit endlichem \vec{q} wird wahrscheinlicher.

6.2.3 Bandstruktur-Eigenschaften

Die magnetische Ordnung bei endlichen \vec{q} -Vektoren hängt sehr stark von den Details der Bandstruktur ab. Das Argument mit der lokalen Suszeptibilität ist nicht mehr als ein allgemeiner Hinweis auf eine mögliche Instabilität bei endlichem \vec{q} . Sehr wichtig in der Wahl des geeigneten \vec{q} -Vektors ist die Eigenschaft des "Nesting". Nehmen wir an, dass für einen gewissen Bereich der Fermifläche gilt

$$\xi_{\vec{k}+\vec{Q}} = -\xi_{\vec{k}} \quad (6.44)$$

für fixierten Vektor \vec{Q} und \vec{k} in unmittelbarer Nähe der Fermifläche mit $\xi_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F$. Dann wird dieser Bereich die Spinsuszeptibilität dominieren. Betrachten wir die statische Suszeptibilität für $\vec{q} = \vec{Q}$ unter der Annahme, dass Eq.(6.44) für all \vec{k} gilt:

$$\begin{aligned} \chi_0(\vec{Q}, 0; T) &= \frac{2\mu_B^2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}+\vec{Q}} - n_{\vec{k}}}{\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}+\vec{Q}}} = \mu_B^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{f(-\xi_{\vec{k}}) - f(\xi_{\vec{k}})}{\xi_{\vec{k}}} \\ &= \mu_B^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\tanh(\xi_{\vec{k}}/2k_B T)}{\xi_{\vec{k}}} = \frac{\mu_B^2}{2} \int d\xi N(\xi) \frac{\tanh(\xi/2k_B T)}{\xi} \end{aligned} \quad (6.45)$$

Um dieses Integral näherungsweise auszuführen, setzen wir die Zustandsdichte als konstant an ($N(\xi) = N(\epsilon_F)$). Ferner konvergiert das Integral nur, wenn wir den Integralbereich einschränken (cut-off), den wir also $\epsilon_0 = D$, die halbe Bandbreite, ansetzen,

$$\begin{aligned} \chi_0(\vec{Q}, 0; T) &\approx -\mu_B^2 N(\epsilon_F) \int_0^{\epsilon_0} d\xi \frac{\tanh(\xi/2k_B T)}{\xi} \\ &= \mu_B^2 N(\epsilon_F) \left\{ \ln\left(\frac{\epsilon_0}{2k_B T}\right) + \ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi}\right) \right\} \approx \mu_B^2 N(\epsilon_F) \ln\left(\frac{1.14\epsilon_0}{2k_B T}\right), \end{aligned} \quad (6.46)$$

wobei wir annehmen, dass $\epsilon_0 \ll k_B T$, und $\gamma = 0.577777$ ist die Euler-Konstante. Die unrenormierte Suszeptibilität divergiert logarithmisch mit sinkender Temperatur. Wenn wir die nun in das verallgemeinerte Stoner-Beziehung einsetzen, finden wir als Instabilitätskriterium (Divergenz von $\chi(\vec{Q}, 0; T)$ in (6.37)),

$$0 = 1 - \frac{UN(\epsilon_F)}{2} \ln\left(\frac{1.14\epsilon_0}{2k_B T_c}\right) \Rightarrow k_B T_c = 1.14\epsilon_0 e^{-2/UN(\epsilon_F)}. \quad (6.47)$$

Offensichtlich gibt es für beliebige Werte von $UN(\epsilon_F)$ eine endliche kritische Temperatur. Die Nesting-Bedingung führt dazu, dass $\chi_0(\vec{q}, 0; T)$ bei $\vec{q} = \vec{Q}$ maximal ist und aus (6.37) die relevante Instabilität zu magnetischer Ordnung mit dem Wellenvektor \vec{Q} ergibt. Man spricht hier von einer *Spindichtewelle* (SDW: spin density wave). Die Spindichte hat zum Beispiel die Form

$$\vec{S}(\vec{r}) = \hat{z} S \cos(\vec{Q} \cdot \vec{r}) \quad (6.48)$$

Es gibt keine uniforme Komponente.

Solche Spindichtewellen sind bekannt in niedrigdimensionalen Systemen, wie organischen Leitern, oder in Übergangsmetallen wie Chrom (Cr). Überall spielt die Nesting-Eigenschaft eine wichtige Rolle (Abb. 6.7).

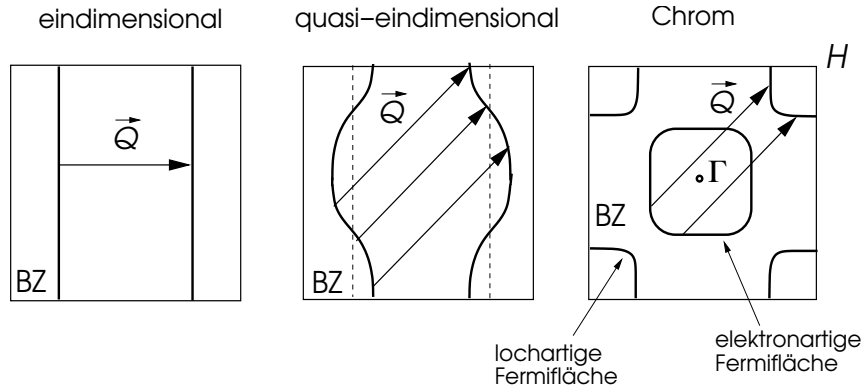


Abb. 6.7

In den quasiaeindimensionalen Elektronensystemen gibt es eine Hauptrichtung der Bewegung und zwei Nebenrichtungen mit relativ schwacher Dispersion. Chrom ist ein dreidimensionales Metall, in dem sich Nesting aus der Verbindung einer elektronartigen Fermifläche um Γ -Punkt und einer lochartigen Fermifläche am Brillouin-Zonenrand (H-Punkt) ergibt. Diese Fermiflächen stammen von verschiedenen Bändern. Chrom hat eine kubisch raumzentrierte Kristallstruktur. Der H-Punkt befindet sich bei $(\pi/a, 0, 0)$ und ergibt einen Nesting-Vektor $\vec{Q} \parallel (1, 0, 0)$ und äquivalenten Richtungen, und ist inkommensurabel mit dem Gitter.

Die Lehrbuchform der Nesting-Eigenschaft ergibt sich durch das tight-binding Modell im einfachen kubischen Gitter mit Hüpfern zwischen Nachbarn und halber Füllung. Die Bandstruktur ist

$$\epsilon_{\vec{k}} = -2t[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a] \quad (6.49)$$

mit dem chemischen Potential bei 0. Es ist offensichtlich, dass $\epsilon_{\vec{k} + \vec{Q}} = -\epsilon_{\vec{k}}$ für alle \vec{k} , falls $\vec{Q} = \frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$. Dies entspricht vollständiger Teilchen-Loch-Symmetrie.

Analog zur Peierls-Instabilität bringt die Spindichtewelle mit sich, dass sich eine Energielücke an der Fermifläche öffnet. Diese Instabilität ist eine Fermiflächen-induzierte Instabilität. Diese Lücke beschränkt sich auf die Fermiflächenbereiche, die die Nesting-Bedingung erfüllen. Damit kann im Gegensatz zur ferromagnetischen Ordnung das Metall für eine Spindichtewelle zum Isolator werden.

6.3 Stoner-Anregungen

Zum Abschluss wollen wir vom ferromagnetischen Grundzustand ausgehend die elementaren Anregungen untersuchen, die sowohl die einfachen Elektron-Loch-Anregungen als auch neue kollektive Anregungen miteinbeziehen. Wir konzentrieren uns dabei auf die Spinanregungen, die wir in folgender Weise ansetzen:

$$|\psi_{\vec{q}}\rangle = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k} + \vec{q}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow} |\psi_g\rangle \quad (6.50)$$

d.h. wir entnehmen den Grundzustand $|\psi_g\rangle$ ein Elektron und setzen es mit umgekehrtem Spin wieder ein. Dies impliziert natürlich einen Selektionsfaktor $n_{\vec{k}\uparrow}(1 - n_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow})$, der sicherstellt, dass das Teilchen bei $(\vec{k}\downarrow)$ entnommen und bei $(\vec{k} + \vec{q}, \uparrow)$ eingesetzt werden kann. Wir lösen nun die Gleichung:

$$\mathcal{H}|\psi_{\vec{q}}\rangle = (E_g + \hbar\omega_{\vec{q}})|\psi_{\vec{q}}\rangle \quad (6.51)$$

Eine relativ einfache Rechnung zeigt, dass die Eigenwertbedingung die Form hat:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}\downarrow} - n_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}}{\hbar\omega_{\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow} + \epsilon_{\vec{k}\uparrow}} \quad (6.52)$$

das einer Nullstelle des Nenners der RPA-Suszeptibilität (6.37) entspricht. Man sieht sofort, dass ein Teilset von Eigenwerten im Wesentlichen der einfachen Elektron-Loch-Anregung entspricht:

$$\hbar\omega_{\vec{q}} = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow} - \epsilon_{\vec{k}\uparrow} \quad (6.53)$$

Es gibt jedoch noch eine kollektive Anregung, die man auch als gebundenen Zustand des Elektrons und Lochs betrachten kann. Man sieht leicht, dass (6.52) im Grenzfall $\vec{q} \rightarrow 0$ zu

$$\frac{1}{U} = \frac{n_{\downarrow} - n_{\uparrow}}{\hbar\omega_0 - U(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})} \quad (6.54)$$

reduziert. Das bedeutet, dass $\hbar\omega_0 = 0$ eine Lösung ist, die wir nachher noch interpretieren werden. Wir entwickeln nun die rechte Seite von (6.52)

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\Delta\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow}}{1 - \frac{\hbar\omega}{\Delta} + \frac{1}{\Delta}(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})} \quad (6.55)$$

mit $\Delta = U(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$ und $\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow} - \epsilon_{\vec{k}\uparrow} = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} + \Delta$. Unter Verwendung von (6.54) erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{U}{\Delta} \sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow} - n_{\vec{k}\uparrow}) \left[\left\{ \hbar\omega + \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} \right\} - \frac{1}{\Delta} \left\{ \hbar\omega + \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} \right\}^2 \right] + \dots \\ &= \hbar\omega - \frac{U}{\Delta} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}\uparrow} - n_{\vec{k}\downarrow}}{2} (\vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}})^2 \epsilon_{\vec{k}} + \frac{U}{\Delta^2} \sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow} - n_{\vec{k}\uparrow}) (\vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}})^2 + O(\vec{q}^4) \end{aligned} \quad (6.56)$$

bis zweite Ordnung in \vec{q} . Für die konkrete Auswertung nehmen wir eine einfache parabolische Form für die Bandenergie annehmen ($\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m^*$) und eine schwache Magnetisierung $n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \ll n_0$:

$$\hbar\omega_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \frac{1}{\Delta} \left\{ U n_0 - \frac{4\epsilon_F}{3} \right\} = v q^2 \quad (6.57)$$

Beachte, dass $v > 0$ da das Instabilitätskriterium für diesen Fall: $U_c = 4\epsilon_F / 3n_0$:

$$\hbar\omega_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \frac{n_0}{3\sqrt{3}} \left(\frac{U_c}{U} - 1 \right)^{1/2} \geq 0 \quad (6.58)$$

Diese kollektive Anregung hat eine q^2 -Abhängigkeit und geht für $\vec{q} \rightarrow 0$ zu Null. Letzteres ist eine Konsequenz der Tatsache, dass der Ferromagnetische Zustand eine kontinuierliche Symmetrie bricht, nämlich die Rotationssymmetrie, durch die Wahl einer bestimmten Richtung der Magnetisierung. Jede Richtung ist gleichwertig und daher energetisch entartet. Eine uniforme Rotation der Magnetisierung kostet daher keine Energie. Dies entspricht dem sogenannten

*Goldstone Theorem.*² Eine solche infinitesimale Rotation wird durch unsere Anregung bei $\vec{q} = 0$ induziert (globale Spinrotation):

$$\sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} = \hat{S}_{tot}^- \quad (6.59)$$

Die elementaren Anregungen besitzen daher einen Elektron-Loch-Anteil, der bei kleinen \vec{q} eine Energielücke $\approx \Delta$ hat. Daher sind in diesem Bereich die kollektive Anregungen wohldefinierte Quasiteilchen, die wir *Magnonen* nennen. Es handelt sich dabei um propagierende Spinwellen. Wenn diese Anregung ins Elektron-Loch-Kontinuum eintritt, werden sie gedämpft analog zu den Plasmonen. Magnonen sind als eine Form des gebundenen Zustandes zwischen einem Elektron und einem Loch analog zu den Exzitationen bosonische Quasiteilchen.

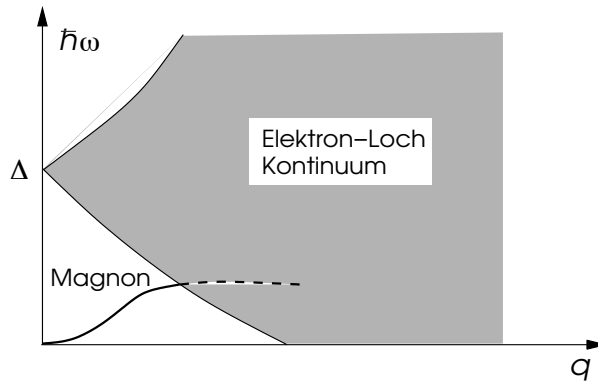


Abb. 6.7

²*Goldstone Theorem:* Für ein System mit nur kurzreichweitigen Wechselwirkungen besitzt eine Phase, die durch die Verletzung einer kontinuierlichen Symmetrie erreicht wird, kollektive Anregungen beliebig kleiner Energie, sogenannte Goldstone-Moden. Diese Moden haben Bosonischen Charakter. Für den Stoner-Ferromagneten sind dies die Magnonen oder Spinwellen.